

UNIVERSIDAD CENTRAL DE VENEZUELA  
FACULTAD DE CIENCIAS  
ESCUELA DE FÍSICA



**EL OSCILADOR ARMÓNICO EN UNA RED UNIDIMENSIONAL  
EN PRESENCIA DE UN CAMPO ELÉCTRICO NO HOMOGÉNEO  
Y RÁPIDAMENTE OSCILANTE EN EL TIEMPO**

Trabajo Especial de Grado presentado por  
Barbara Montañas  
ante la Facultad de Ciencias de la  
Ilustre Universidad Central de Venezuela  
como requisito parcial para optar al título  
de: **Licenciada en Física**  
Con la tutoría de: Dr. Luis A. González D.  
M.Sc. Hely Cordero

Mayo-2018  
Caracas-Venezuela

*Escuela de Física*



UNIVERSIDAD CENTRAL DE VENEZUELA  
FACULTAD DE CIENCIAS  
ESCUELA DE FÍSICA



**EL OSCILADOR ARMÓNICO EN UNA RED UNIDIMENSIONAL  
EN PRESENCIA DE UN CAMPO ELÉCTRICO NO HOMOGÉNEO  
Y RÁPIDAMENTE OSCILANTE EN EL TIEMPO**

Trabajo Especial de Grado presentado por  
Barbara Montañes  
ante la Facultad de Ciencias de la  
Ilustre Universidad Central de Venezuela  
como requisito parcial para optar al título  
de: **Licenciada en Física**

Con la tutoría de: Dr. Luis A. González D.  
M.Sc. Hely Cordero

Mayo-2018  
Caracas-Venezuela



15 de junio de 2018

Consejo de la Escuela de Física  
Facultad de Ciencias  
Universidad Central de Venezuela

Estimados miembros del Consejo de Escuela

Reciban un cordial saludo. Conforme a lo establecido en el artículo 13 de la “Normativa de Trabajo Especial de Grado de la Licenciatura en Física de la Facultad de Ciencias de la UCV” les remitimos tres ejemplares de la monografía de TEG de la estudiante **Barbara Montañes**, CI: **24.436.611**, titulado **El oscilador armónico en una red unidimensional en presencia de un campo eléctrico no homogéneo y rápidamente oscilante en el tiempo**, los cuales hemos revisado y consideramos listos para la evaluación por parte de un jurado.

Agradeciendo la consideración que sirvan prestar a la presente, nos despedimos atentamente,

Dr. Luis A. González D.  
10.497.103  
Tutor  
IVIC

M.Sc. Hely Cordero  
6.348.782  
Tutor  
UCV





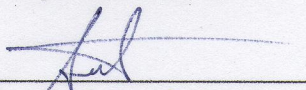
### VEREDICTO

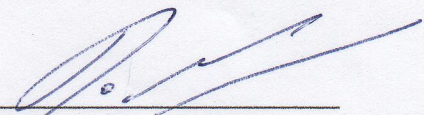
Quienes suscriben, miembros del Jurado designado por el Consejo de la Escuela de Física de la Facultad de Ciencias de la Universidad Central de Venezuela, para examinar el Trabajo Especial de Grado presentado por **Bárbara Montañés**, Cédula de Identidad **V-24436611**, bajo el título **“El oscilador armónico en una red unidimensional en presencia de un campo eléctrico no homogéneo y rápidamente oscilante en el tiempo”**, a los fines de cumplir con el requisito legal para optar al grado de **Licenciada en Física**, dejan constancia de lo siguiente:

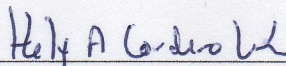
1. Leído como fue dicho trabajo por cada uno de los miembros del Jurado, éste fijó el día 19 de julio de 2018, a las 9:00 am, para que el autor lo defendiera en forma pública, lo que éste hizo en la Sala de Seminarios Guillermo Ruggeri de la Escuela de Física, mediante un resumen oral de su contenido, luego de lo cual respondió satisfactoriamente a las preguntas que le fueron formuladas por el jurado; todo ello conforme a los artículos 20, 21, 22, 25, 26 y 28 de la Normativa de Trabajo Especial de Grado de la Licenciatura en Física de la Facultad de Ciencias de la UCV vigente.
2. Finalizada la defensa pública del trabajo, el jurado decidió declararlo aprobado por considerar que se ajusta a lo dispuesto y exigido en la Normativa de Trabajo Especial de Grado de la Licenciatura en Física de la Facultad de Ciencias de la UCV vigente en sus artículos 1, 5 y 6.

Se levanta la presente acta a los 19 días del mes de julio de 2018, dejándose también constancia de que, conforme a la normativa jurídica vigente, actuó como coordinador del jurado el tutor del Trabajo Especial de Grado Prof Hely Arnal Cordero Leon.

Firma del jurado evaluador

  
Prof Fermín Arturo Dalmagro  
Alonso  
UCV

  
Prof Carlos Eduardo Rojas  
Gutierrez  
UCV

  
Prof Hely Arnal Cordero Leon  
UCV





## **DEDICATORIA.**

Este TEG, lo dedico a mi amado abuelo José Benitez, quien fue un abuelo, un padre y un amigo. Gracias por todos tus consejos sabios y por ser mi fuente de motivación e inspiración para poder superarme cada día más.

A mi amado padre José Antonio Montañes, por su amor incondicional, por su paciencia, por su ejemplo, por tu protección, gracias por ser mi padre.

Gracias a ambos por ser luz en tanta oscuridad. Se que me acompañan desde el cielo. Nunca los olvidaré.





## AGRADECIMIENTOS.

Primeramente le agradezco a Dios y a mi ángel de la guarda por guiarme en este camino y llenarme de fortaleza para salir adelante.

Quiero expresar mi mayor sentido de gratitud hacia aquellos que me acompañaron durante el desarrollo de esta licenciatura ya que gracias a ellos he podido disfrutar de todas las etapas de esta experiencia. Muchas gracias a Luis González, mi mentor académico, por su paciencia, dedicación, motivación, criterio y aliento, así cómo a Hely Cordero por sus consejos, enseñanzas y aliento. Ha sido un privilegio para mi contar con la guía y la ayuda de ambos. Muchas gracias al Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas (IVIC) por ayudarme al crecer tanto a nivel científico como a nivel personal, en especial al Laboratorio de Física Estadística de Medios Desordenados y al Laboratorio de Fisicoquímica Teórica de Materiales por todo el apoyo y por las herramientas brindadas para la culminación de este TEG. Muchas gracias a la Universidad Central de Venezuela (UCV), en especial a la Escuela de Física de la Facultad de Ciencias, por haberme dejado ser parte de ella y abierto las puertas de su seno científico para poder estudiar mi carrera, así como también a los profesores que me brindaron sus conocimientos, sus consejos y su apoyo durante la carrera, gracias por sus enseñanzas.

En lo personal, quiero agradecerles a los que están siempre presentes: a mi amada madre quien ha sido un ejemplar en mi vida, y con su experiencia me ha guiado en el camino de la vida y por confiar siempre en mí a pesar de las caídas y de los fracasos. A mis hermanos, Julian, Alirio, Kelber, Valentina, que siempre han confiado en mí. A mi abuela Migdalia Piña, por su cariño y dedicación. A mis tíos Yubely, Parica, Carolina, Yelitza, Freya, Maximiliana, Julio, Tato. A mi padrastro, César Hernández por acompañarme cada madrugada que tenía que salir para la universidad; a mis grandes amigos, amigos del alma, que me aguantaron durante tanto tiempo y que han estado no solo en los mejores momentos sino también en los peores: Diego Subero, Miguel Díaz, Diana Álvarez, María Fernanda García, Gilberto González, Luis Faría, Cristian Alvarado, Jesús Arévalo, Diego Catalá, David Coll, Alba Vidal, Liliana Maldonado, Yeraldin Hidalgo, Reyfel Mendoza, Yola Fakhry, Mónica Román, Fabiana Salazar, David Oliva, José Antonio Navia, Kilver Campos, Towe Zuazo, Augusto Hernández, Amaru Guerra; y a mis amigos de la iglesia María Omaira, Yera, Yuma, Norian, Duglas, Ernesto, Angelica, Sra. Adelaida, Sr. Enrique, Mari, Yessica, por siempre mantenerme en sus oraciones.



## RESUMEN.

Este TEG está dedicado al estudio teórico del oscilador armónico en la red en presencia de un campo eléctrico no homogéneo y rápidamente oscilante en el tiempo. Debido a que este es un sistema cuántico impulsado periódicamente y sometido a un régimen de alta frecuencia, hacemos uso de la teoría de Floquet para obtener la forma de la función de onda. Luego, usamos el método de Maricq para calcular el Hamiltoniano efectivo y el operador de micromovimiento. Mediante el Hamiltoniano efectivo calculamos las autofunciones y el espectro de energía, donde obtenemos que la alta frecuencia produce una selección de auto-estados del sistema y produce degeneración; también observamos que la no homogeneidad del campo eléctrico produce la aparición de nuevos estados. Utilizamos la función de onda para calcular de forma numérica la densidad de probabilidad y los valores medios de la posición y del momento, donde vemos que la partícula eventualmente se encuentra oscilando entre dos puntos de la red, entre los cuales hay uno preferencial. Mediante el valor medio de la posición, deducimos que hay localización dinámica. Finalmente, deducimos que hay un umbral en la frecuencia para el cual el sistema no responde.



# Índice general

<b>Lista de figuras</b>	<b>13</b>
<b>Introducción.</b>	<b>15</b>
<b>1. Teoría de Bandas.</b>	<b>19</b>
1.1. Bandas de Energía. . . . .	19
1.2. Semiconductores. . . . .	21
1.3. Teoría de Floquet. . . . .	22
1.3.1. Teorema de Floquet . . . . .	23
1.3.2. Teorema de Bloch . . . . .	24
1.4. Aproximación de electrones fuertemente enlazados (Aproximación de Tight-Binding) . . . . .	25
1.5. Funciones de Wannier. . . . .	28
1.6. Oscilaciones de Bloch. . . . .	29
<b>2. Tratamiento a alta frecuencia.</b>	<b>33</b>
2.1. Evolución Dinámica de Sistemas Cuantizados . . . . .	33
2.1.1. Esquema de Schrödinger . . . . .	34
2.1.2. Esquema de Heisenberg . . . . .	35
2.1.3. Esquema de Dirac o de Interacción . . . . .	36
2.2. Método de Floquet-Magnus. . . . .	37
2.3. Hamiltoniano efectivo. . . . .	38
2.4. Operador de micromovimiento. . . . .	38
2.5. Expansion de Floquet-Magnus. . . . .	39
2.6. Representación de Maricq. . . . .	40
2.7. Convergencia. . . . .	41
2.8. Teorema Adiabático. . . . .	42

---



<b>3. El oscilador armónico cuántico en la red.</b>	<b>43</b>
3.1. El oscilador armónico cuántico en la red. . . . .	43
3.2. El oscilador armónico en la red en presencia de un campo eléctrico homogéneo.	46
<b>4. El oscilador armónico en la red en presencia de un campo eléctrico no homogéneo y rápidamente oscilante en el tiempo.</b>	<b>49</b>
4.1. Hamiltoniano efectivo: Espectro y Autofunciones. . . . .	50
4.2. Función de Onda. . . . .	62
4.3. Densidad de probabilidad y valores medios. . . . .	65
4.3.1. Densidades de probabilidad . . . . .	66
4.3.2. Valores Medios . . . . .	77
<b>Conclusiones.</b>	<b>81</b>
<b>A. Cálculos de los conmutadores.</b>	<b>85</b>
<b>B. Método para eliminar la primera derivada.</b>	<b>89</b>
<b>C. Determinante de Hill.</b>	<b>91</b>

# Índice de figuras

1.1. Estructura de bandas. . . . .	20
1.2. Esquema de la ocupación electrónica de las bandas permitidas de energía correspondiente a aislantes y metales. Las zonas moradas indican las regiones llenas con electrones. . . . .	21
1.3. Esquema de la ocupación electrónica de las bandas permitidas de energía correspondiente a semiconductores. Las zonas moradas indican las regiones llenas con electrones. . . . .	22
1.4. Oscilaciones de Bloch, con un periodo $\tau_B = \frac{2\pi\hbar}{ae E }$ . . . . .	30
3.1. $(E + 2A)/(\frac{1}{2}ka^2)$ versus el parámetro de la energía cinética $2A/ka^2$ , para los primeros cinco niveles del oscilador [2] . . . . .	45
3.2. El valor medio $\langle x \rangle$ en unidades de $a$ para un paquete de onda en la red, como una función del tiempo. La posición de equilibrio del oscilador es $X_0 = -10a$ . [3] . . . . .	47
4.1. El espectro de energía en función del parámetro de la energía cinética $A$ . Para un campo eléctrico homogéneo . . . . .	59
4.2. El espectro de energía en función del parámetro de la energía cinética $A$ , tanto para el caso no homogéneo como para el homogéneo, respectivamente. Se ha elegido $\gamma = 0,2$ , $\epsilon = 0,8$ , $k = 1,8$ , $\omega = 95$ . . . . .	60
4.3. El espectro de energía en función de la intensidad del campo eléctrico homogéneo, $\epsilon$ . Se ha elegido $\gamma = 0,2$ , $A = 100$ , $k = 1,8$ , $\omega = 95$ . . . . .	61
4.4. Comportamiento del espectro de energía en función de la intensidad del campo eléctrico homogéneo, $\epsilon$ . Para el caso donde sólo existe campo homogéneo. Se ha elegido $\gamma = 0,2$ , $A = 100$ , $k = 1,8$ , $\omega = 95$ . . . . .	61
4.5. Comportamiento del espectro de energía en función de la intensidad del campo eléctrico homogéneo, $\epsilon$ . Para el caso donde existe el campo homogéneo y campo no homogéneo. Se ha elegido $\gamma = 0,2$ , $A = 100$ , $k = 1,8$ , $\omega = 95$ . . . . .	62

---

4.6. Comportamiento del espectro de energía en función de la intensidad del campo eléctrico no homogéneo, $\gamma$ . Se ha elegido $\epsilon = 0,8$ , $A = 100$ , $k = 1,8$ , $\omega = 95$ . . . . .	63
4.7. Densidad de probabilidad en función del momento, para diversos valores fijos de $t$ . Se ha elegido $\gamma = 0,2$ , $\epsilon = 0,8$ , $A = 100$ , $k = 1,8$ , $\omega = 95$ y $E = 0,1401$ . . . . .	67
4.8. Comportamiento de la densidad de probabilidad en función del momento. Se ha elegido $\gamma = 0,2$ , $\epsilon = 0,8$ , $A = 100$ , $k = 1,8$ , $\omega = 95$ y $E = 0,1401$ . . . . .	67
4.9. Comportamiento de la densidad de probabilidad en función del tiempo. Se ha elegido $\gamma = 0,2$ , $\epsilon = 0,8$ , $A = 100$ , $k = 1,8$ , $\omega = 95$ y $E = 0,1401$ . . . . .	68
4.10. Comportamiento de la densidad de probabilidad en función de la posición. Se ha elegido $\gamma = 0,2$ , $\epsilon = 0,8$ , $A = 100$ , $k = 1,8$ , $\omega = 95$ y $E = 0,1401$ . . . . .	69
4.11. Comportamiento de la densidad de probabilidad versus del momento al variar el signo de $\epsilon$ . Se ha elegido $\gamma = 0,2$ , $A = 100$ , $k = 1,8$ y $\omega = 95$ . . . . .	70
4.12. Comportamiento de la densidad de probabilidad en función de la posición al variar el signo de $\epsilon$ . Se ha elegido $\gamma = 0,2$ , $A = 100$ , $k = 1,8$ y $\omega = 95$ . . . . .	71
4.13. Comportamiento de la densidad de probabilidad en función del momento al variar el signo de $\gamma$ . Se ha elegido $\epsilon = 0,8$ , $A = 100$ , $k = 1,8$ y $\omega = 95$ . . . . .	72
4.14. Comportamiento de la densidad de probabilidad en función de la posición al variar el signo de $\gamma$ . Se ha elegido $\epsilon = 0,8$ , $A = 100$ , $k = 1,8$ y $\omega = 95$ . . . . .	73
4.15. Comportamiento de la densidad de probabilidad en función del momento al variar $A$ y $E$ . Se ha elegido $\epsilon = 0,8$ , $\gamma = 0,2$ , $k = 1,8$ y $\omega = 95$ . . . . .	74
4.16. Comportamiento de la densidad de probabilidad en función del tiempo al variar $A$ y $E$ . Se ha elegido $\epsilon = 0,8$ , $\gamma = 0,2$ , $k = 1,8$ y $\omega = 95$ . . . . .	75
4.17. Comportamiento de la densidad de probabilidad en función de la posición al variar $A$ y $E$ . Se ha elegido $\epsilon = 0,8$ , $\gamma = 0,2$ , $k = 1,8$ y $\omega = 95$ . . . . .	76
4.18. El Valor Medio de $X$ en función del tiempo. Se ha elegido $\gamma = 0,2$ , $\epsilon = 0,8$ , $A = 100$ , $k = 1,8$ , $\omega = 95$ y $E = 0,1401$ . . . . .	78
4.19. El valor medio de $P$ en función del tiempo. Se ha elegido $\gamma = 0,2$ , $\epsilon = 0,8$ , $A = 100$ , $k = 1,8$ , $\omega = 95$ y $E = 0,1401$ . . . . .	78
4.20. El período del valor medio de $P$ en función de $\tau$ . . . . .	79
4.21. La amplitud del valor medio de $P$ en función de $\omega$ . . . . .	80

# INTRODUCCIÓN.

El oscilador armónico es el sistema más estudiado en la Física, en especial en la física del estado sólido donde los puntos de una red cristalina representan a los átomos en un sólido cristalino, los cuales realizan pequeñas oscilaciones sinusoidales alrededor de su punto de equilibrio; este comportamiento se representan mediante el oscilador armónico cuántico. Basandonos en el creciente interés en el estudio de este sistema físico forzado, consideramos necesario el estudio del sistema oscilador armónico cuántico forzado en una red.

En 1986, Mattis [1] propone al oscilador armónico cuántico en la red para modelar el espectro de autovalores de la capa de inversión en la superficie de un semiconductor cuando los electrones (o huecos) saltan en una región de densidad de carga eléctrica constante. Seguidamente, Chalbaud, Gallinar y Mata [2] en ese mismo año publican las soluciones a este problema, donde las autofunciones vienen dadas por las funciones de Mathieu; a diferencia del caso continuo donde las autofunciones vienen dada por las funciones de Hermite. Luego, Gallinar y Chalbaud [3] estudiaron la dinámica que sigue el oscilador armónico cuando está en presencia de un campo eléctrico homogéneo, siendo uno de sus aportes las oscilaciones de Bloch amortiguadas asociada a este sistema.

Por otra parte, sabemos que uno de los temas que actualmente ha adquirido un gran interés en el área de física del estado sólido, tanto en estudios experimentales como teóricos, son los sistemas cuánticos impulsados periódicamente [4]; ya que ofrece una forma prometedora para explorar nuevos fenómenos cuánticos que serían difíciles o imposibles de observar de otra manera. Estos sistemas cuánticos influyen notablemente en la localización dinámica [5, 6] y en la transiciones de fase dinámicas [7, 8]. Para tratar estos sistemas cuánticos impulsados periódicamente utilizamos la Teoría de Floquet, la cual se usa para estudiar los sistemas de ecuaciones diferenciales lineales con coeficientes periódicos y ha sido extendido al tratamiento de Hamiltonianos dependientes periódicamente del tiempo por Shirley y posteriormente por Sambe alrededor de 1970 [9, 10]. Nuestro interés en trabajar con esta teoría está basado en que este método nos permite obtener las soluciones para un problema con Hamiltoniano dependientes periódicamente del tiempo, de manera no perturbativa [11, 12, 13, 14]. Aunque la forma general de la solución de una ecuación diferencial con coeficientes periódicos es dada por el Teorema de Floquet; este teorema por sí mismo no nos proporciona información de cómo calcular la función o solución de Floquet, simplemente afirma que tal función existe [15, 14, 11, 16].

Recientemente, se ha generado un gran interés en el área de la física de materia condensada en estudiar los sistemas cuánticos impulsados periódicamente y sometidos a un régimen de alta frecuencia; por ejemplo, en el contexto de transporte cuántico [17, 18, 19, 20], fases cuánticas topológicas [21, 22] y detecciones cuánticas del Fermión de Majorana [23, 24]. Aunque el estudio de las ecuaciones diferenciales con coeficientes periódicos presenta una seria dificultad debido a que no se conoce ningún método general para determinar una solución de Floquet del Hamiltoniano periódico; tenemos que un método muy usado especialmente para el límite de alta frecuencia, donde la contribución de orden superior es despreciable, es la expansión de Floquet-Magnus [11, 16]. En este TEG, utilizamos la representación dada por Maricq de dicha expansión [25].

Basandonos en lo antes expuesto, en este TEG, estudiamos el comportamiento del modelo dado por Gallinar-Chalbaud, pero con un campo eléctrico no homogéneo que oscila rápidamente en el tiempo. El desarrollo de este trabajo se estructura en los siguientes objetivos:

### Objetivo General.

Estudiar la dinámica del sistema físico oscilador armónico en una red unidimensional bajo la acción de un campo eléctrico no homogéneo, periódico y rápidamente oscilante en el tiempo.

### Objetivos Específicos.

- Estudiar la documentación teórica relacionada a teoría de bandas, método de tight-binding, teoría de Floquet, oscilaciones de Bloch, expansión de Floquet-Magnus, método de Maricq, localización dinámica y el oscilador armónico en una red.
- Hallar el Hamiltoniano efectivo, independiente del tiempo, de manera estroboscópica, considerando como Hamiltoniano del sistema

$$H(t) = -2A \cos(ap) + \frac{kx^2}{2} + \left( \epsilon x - \frac{\gamma}{3} x^3 \right) \cos(\omega t), \quad \omega \gg \omega_0 \quad (1)$$

- Calcular el espectro y las funciones de ondas del Hamiltoniano efectivo y analizar la distribución de probabilidad asociada.



- Hallar el operador de micromovimiento, mostrar que posee términos oscilantes y analizar la presencia de términos no adiabáticos en la función de onda del Hamiltoniano dependiente del tiempo.

Este TEG, está organizado de la siguiente manera:

- En el Capítulo 1, introduciremos los conceptos básicos para la comprensión del contexto en el que se desarrolla este TEG. Comenzaremos por estudiar como se agrupan los estados electrónicos en las bandas de energía, para diferenciar los tipos de sólidos cristalinos; enfocando nuestra atención en los materiales semiconductores. Seguido de esto, se presenta la teoría de Floquet como herramienta para analizar la forma general de la solución de una ecuación diferencial con coeficientes periódicos. En la Sección 1.4, daremos una descripción de la aproximación de tight-binding, debido a que la energía cinética del Hamiltoniano del sistema en estudio es la energía asociada a la aproximación de tight-binding. Finalmente, discutiremos acerca de la definición de las oscilaciones de Bloch.
- En el Capítulo 2, estudiaremos un método para hallar al menos una solución de Floquet del Hamiltoniano periódico, llamado expansion de Floquet-Magnus; utilizando la representación dada por Maricq de dicha expansion. Al final de este capítulo, introduciremos el concepto de adiabaticidad, debido a que nuestro sistema está sometido a una perturbación con dependencia temporal.
- En el Capítulo 3, hacemos una revisión bibliográfica del oscilador armónico cuántico en la red, comenzaremos por Mattis [1] quien propone al oscilador armónico cuántico en la red. Seguidamente, señalamos las soluciones de este problema que dieron Chalbaud, Gallinar y Mata [2]. Finalmente, en la Sección 3.2, analizamos la dinámica que sigue el oscilador armónico cuando está en presencia de un campo eléctrico homogéneo basandonos en el trabajo de Gallinar y Chalbaud [3], donde uno de sus aporte es las oscilaciones de Bloch asociada a este sistema.
- En el Capítulo 4, se muestran los resultados principales de este TEG. En la Sección 4.1, calculamos analíticamente, haciendo uso de la representación de Maricq, el Hamiltoniano efectivo y el Operador de micromovimiento; del Hamiltoniano efectivo

cálculamos las autofunciones y el espectro de energía. Analizamos el comportamiento del espectro en función de los parámetros  $A$ ,  $\epsilon$  y  $\gamma$ . En la Sección 4.2, haciendo uso de la teoría de Floquet, obtenemos la Función de Onda de (1). Además, discutimos sobre los términos no adiabáticos del operador de micromovimiento. Finalmente, en la Sección 4.3, mostramos cómo es la dinámica que sigue la función de onda mediante el estudio de la densidad de probabilidad de los operadores posición y momentum y del valor medio de dichos operadores .

# Capítulo 1

## Teoría de Bandas.

En este capítulo introduciremos los conceptos básicos para la comprensión del contexto en el que se desarrolla este TEG. Comenzaremos por estudiar como se agrupan los estados electrónicos en las bandas de energía, para diferenciar los tipos de sólidos cristalinos; enfocando nuestra atención en los materiales semiconductores. Seguido de esto, se presenta la teoría de Floquet como herramienta para analizar la forma general de la solución de una ecuación diferencial con coeficientes periódicos [14, 15, 13]. En la sección 1.4, daremos una descripción de la aproximación de tight-binding, debido a que la energía cinética del Hamiltoniano del sistema en estudio es la energía asociada a la aproximación de tight-binding. Finalmente, discutiremos acerca de la definición de las oscilaciones de Bloch y el cómo podemos observarlas.

### 1.1. Bandas de Energía.

Las bandas de energía electrónica en un sólido representan la estructura electrónica básica del sólido. Para estudiar la formación de la banda de energía, consideramos la agregación de los  $N$  átomos ( $N \approx 10^{23}$ ); cuando estos átomos se aproximan, los niveles de energía de cada átomo se ven influenciados por los otros átomos, de manera que el nivel de energía de uno en particular se divide en  $N$  subniveles estrechamente espaciados, formando así una banda de energía [26, 27].

Tenemos que los electrones en los cristales están repartidos en bandas de energía, estas bandas de energía son: *la banda de valencia* en la cual se encuentra los electrones de los estados de valencia no conductores, esta banda está predominantemente llena de electrones; *las bandas de conducción* están predominantemente vacías. A la mínima diferencia de

---



Figura 1.1: Estructura de bandas.

energía entre estas bandas de energía se le denomina gap o banda de energía prohibida. En la Figura 1.1 mostramos la estructura de banda de un cristal, donde la frontera entre los estados ocupados y los no ocupados a temperatura cero es la energía de Fermi, de manera que las bandas de valencia son bandas con energía menor a la energía de Fermi, mientras que las bandas de conducción aparecen a energías superiores [26, 28].

Una manera de imaginar a un aislante es juntando varios átomos que no comparten electrones entre sí; de esta manera los electrones se localizan mayoritariamente alrededor del átomo al que pertenecen. Los aislantes tienen un gap grande y por lo tanto sus electrones requieren grandes cantidades de energía para moverse ( $> 1 \text{ eV}$ ); debido a que un campo eléctrico externo no sería lo suficientemente intenso como para que los electrones pasen a la banda de conducción. Los semiconductores (como el silicio y el germanio) son materiales tecnológicamente muy útiles, debido a que sus átomos comparten mejor los electrones y por lo tanto sus gaps son más pequeños que los gaps de los aislantes. Los semiconductores son por tanto excelentes interruptores presente en cualquier procesador moderno. Por otra parte, tenemos que en los metales existen muchos estados energéticos vacíos donde los electrones pueden excitarse con facilidad (ver Figura 1.2). El metal posee estados electrónicos que necesitan una energía muy pequeña con respecto a la que necesitan los semiconductores para conducir. Otra manera de tener un metal es cuando

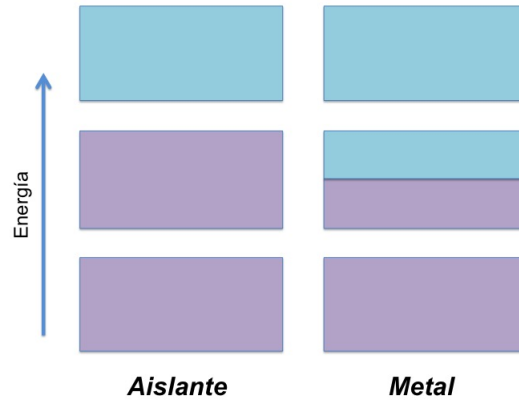


Figura 1.2: Esquema de la ocupación electrónica de las bandas permitidas de energía correspondiente a aislantes y metales. Las zonas moradas indican las regiones llenas con electrones.

las bandas de energía se solapan en un cristal que tiene un número par de electrones por celda primitiva, en este caso tendríamos dos bandas parcialmente llenas [26, 29, 30, 31].

## 1.2. Semiconductores.

Un semiconductor intrínseco o puro es un semiconductor cristalino sin impurezas ni defectos en su red, tales como el silicio y el germanio. En el cero absoluto (0 K) el semiconductor tiene justo los suficientes electrones para llenar las bandas de valencia, por lo que no sobran electrones para ocupar las bandas de conducción, como se muestra en la Figura 1.1. En este caso el semiconductor se comporta como un aislante [28, 30].

Sin embargo, cuando incrementamos la temperatura la agitación térmica rompe algunos enlaces que quedan incompletos. Cada enlace roto crea un par de portadores, electrón y hueco. Estos electrones se excitan térmicamente desde la banda de valencia hasta la banda de conducción, en donde se convierten en móviles. Por otra parte, tenemos que la ocupación electrónica de un semiconductor depende del aumento de la temperatura, ya que el número de estados accesibles (o huecos) aumenta (ver semiconductor de la izquierda de 1.3) cuando aumentamos la temperatura y de la presencia de impurezas, ya que el semiconductor sufre un déficit de electrones (ver semiconductor de la izquierda de 1.3) o aumento de electrones (ver semiconductor de la derecha de 1.3) cuando éste está en presencia de impurezas [26].



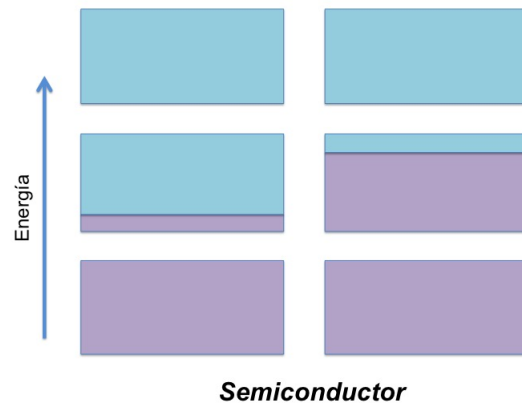


Figura 1.3: Esquema de la ocupación electrónica de las bandas permitidas de energía correspondiente a semiconductores. Las zonas moradas indican las regiones llenas con electrones.

La banda de conducción está vacante en el cero absoluto y está separada por una banda prohibida de la banda de valencia llena. Cuando se aumenta la temperatura, los electrones se excitan térmicamente desde la banda de valencia hasta la banda de conducción. Tanto los electrones de la banda de conducción como los orbitales vacantes o huecos que dejan tras sí en la banda de valencia, contribuyen a la conductividad eléctrica. Además, la conductividad eléctrica de un semiconductor es generalmente mucho menor que la de un conductor, debido al número reducido de electrones y huecos disponibles. Otra característica de los semiconductores es que su conductividad depende fuertemente de la temperatura, que es la que regula el número de portadores [26, 31].

### 1.3. Teoría de Floquet.

El matemático francés Achille Marie Gaston Floquet formuló en 1883 un teorema para resolver ecuaciones diferenciales ordinarias conocido posteriormente como el teorema de Floquet. Este teorema da las soluciones a las ecuaciones diferenciales lineales con coeficientes periódicos, y ha sido extendido al tratamiento de Hamiltonianos dependientes periódicamente del tiempo [11, 12, 13, 14].

Nuestro interés en trabajar con esta teoría está basado en que este método nos permite

obtener las soluciones para un problema con Hamiltoniano dependientes periódicamente del tiempo,

$$H(t) = H(t + \tau)$$

La forma general de la solución de una ecuación diferencial con coeficientes periódicos es dada por el *Teorema de Floquet*. El cual estudiaremos a continuación.

### 1.3.1. Teorema de Floquet

Comenzamos el estudio del teorema de Floquet partiendo de las soluciones de la ecuación de Hill, la cual tiene la forma

$$\Psi''(t) + q(t)\Psi(t) = 0 \tag{1.1}$$

dicha ecuación está caracterizada por la periodicidad de  $q(t)$  con periodo mínimo  $\tau$ ; es decir

$$q(t + \tau) = q(t).$$

Sean  $\psi_1(t)$  y  $\psi_2(t)$  dos soluciones linealmente independientes de la ecuación de Hill, entonces  $\psi_1(t + \tau)$  y  $\psi_2(t + \tau)$  son también soluciones de la ecuación de Hill, ya que dicha ecuación permanece invariante al sustituir  $t$  por  $t + \tau$ . Ahora bien, por medio del siguiente teorema indicaremos cuando una solución es de tipo Floquet.

#### **Teorema # 01: Solución o Función de Floquet**

*Existe al menos una constante  $\rho$  no nula y una solución  $\psi(t)$  de la ecuación de Hill que cumple con la siguiente igualdad*

$$\psi(t + \tau) = \rho\psi(t) \tag{1.2}$$

*todas las soluciones  $\psi(t)$  que cumplen con esta propiedad son consideradas soluciones o funciones de Floquet [15].*

Este teorema nos garantiza que hay al menos una solución de la ecuación de Hill que cumple con la propiedad de Floquet enunciada en el Teorema # 01, pero este teorema no nos dice nada acerca de la otra solución de dicha ecuación,  $\Psi_2(t)$ . Para estudiar que pasa con la segunda solución de la ecuación de Hill, enunciamos el siguiente teorema [13]

**Teorema # 02**

*Existen dos soluciones linealmente independientes  $\psi_1(t)$  y  $\psi_2(t)$  de la ecuación de Hill, tal que*

i)  $\psi_1(t) = e^{h_1 t} P_1(t)$  ,  $\psi_2(t) = e^{h_2 t} P_2(t)$  donde  $h_1$  y  $h_2$  son constantes, no necesariamente distintas, y  $P_1(t)$  y  $P_2(t)$  son funciones periódicas con período  $\tau$ .

o

ii)  $\psi_1(t) = e^{ht} P_1(t)$  ,  $\psi_2(t) = e^{ht} [x P_1(t) + P_2(t)]$  donde  $h$  es una constante, y  $P_1(t)$  y  $P_2(t)$  son funciones periódicas con período  $\tau$ .

En el caso (i) tenemos que ambas soluciones cumplen con la propiedad de Floquet, es decir, son de forma

$$\psi_i(t + \tau) = \rho_i \psi_i(t) \quad i = 1, 2.$$

Este caso es el más usado, debido a que el teorema de Bloch se puede ver como una combinación lineal de dos soluciones de la ecuación de Hill de tipo Floquet; es decir, que ambas soluciones de la ecuación de Hill cumplan con la propiedad de Floquet [15]. Este teorema es análogo al teorema de Bloch, donde el potencial es periódico en el espacio.

**1.3.2. Teorema de Bloch**

En 1928, Bloch descubrió que no importa cuán fuerte sea el potencial periódico, mientras sea periódico, se conserva el momento cristalino. Este descubrimiento se conoce como el Teorema de Bloch.

*El Teorema de Bloch* enuncia que la función de onda de un electrón en un potencial periódico externo

$$V(x) = V(x + a),$$

se puede escribir como el producto de una función con la misma periodicidad del potencial y un factor de fase derivado de la simetría traslacional, es decir,

$$\psi_{j,k}(x) = e^{ikx} u_{j,k}(x),$$

con  $u_{j,k}(x) = u_{j,k}(x + a)$ ,  $j$  es el número de banda y  $k$  un vector del espacio recíproco.

Al desplazar la función de onda con un vector de traslación unitario  $a$  (para el caso unidimensional), ésta adquiere la forma

$$\psi_{j,k}(x + a) = e^{ika} \psi_{j,k}(x) \quad , \quad (1.3)$$

de modo que la densidad de probabilidad  $|\psi_{j,k}(x)|^2$  es exactamente la misma debido a que la magnitud del factor de fase es uno [32].

Por otra parte, tenemos que las funciones de Bloch son funciones periódicas en  $k$  [33]; es decir,

$$\psi_{j,k+\frac{2\pi}{a}}(x) = \psi_{j,k}(x).$$

Las funciones de Bloch pueden combinarse en paquetes de ondas localizadas para representar electrones que se propagan libremente a través del campo potencial de los núcleos iónicos.

Un ejemplo unidimensional que nos ayudará a la comprensión de este teorema es el modelo de Kronig-Penney, el cual consiste en una sucesión de pozos cuadrados y aunque es una simplificación muy grande respecto a un potencial real, muestra la estructura de bandas típicas debidas a la simetría traslacional de la red (ver [26, 28]).

## 1.4. Aproximación de electrones fuertemente enlazados (Aproximación de Tight-Binding)

El modelo de electrones fuertemente enlazados (tight-binding) o el método de LCAO (combinación lineal de orbitales atómicos) fue originalmente propuesto por Bloch en 1928. La idea del modelo de tight-binding es representar los estados electrónicos de la red por funciones, tales que cerca de un ión se parezca a un estado atómico [34]. Además, debido a que experimenta ligeras variaciones por la presencia de otros átomos en el sólido y a que los electrones están fuertemente ligados a sus propios átomos, sus funciones de onda están casi libres de influencia por átomos vecinos. La aproximación es más útil para describir las bandas de energía que surge de la capa  $d$  parcialmente llena de los átomos de metales de transición y para describir la estructura electrónica de aislantes [28, 31].

---

En el desarrollo de este modelo, suponemos que todos los átomos de la red se comportan de misma manera, por lo que estudiamos como un sólo átomo localizado en un punto de la red se ve afectado por sus átomos vecinos mediante el Hamiltoniano,  $H_{at}$ , y extrapolamos este comportamiento a los demás átomos. Mediante la ecuación de Schrödinger, tenemos

$$H_{at}\Psi_n = E_n\Psi_n,$$

donde requerimos que  $\Psi_n(x)$  sea muy pequeño cuando  $x$  exceda una distancia del orden de la constante de red  $a$ .

Ahora bien, supongamos que  $\psi_a(x-l)$  es un orbital atómico para un átomo libre con centro  $l$ , esto implica que podemos construir una función que satisface la condición de Bloch

$$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=1}^N e^{ikl} \psi_a(x-l). \quad (1.4)$$

Tenemos que  $\psi_a(x-l)$  es de gran magnitud en las vecindades de  $l$  y decae rápidamente para otros puntos alrededor de  $l$ . Al alcanzar el vecino próximo,  $\psi_a(x-l) \approx 0$  y el solapamiento entre los  $\psi_a$  es mínimo.

Procedemos a escribir a  $\psi_k(x)$  como una función de Bloch usual; es decir,

$$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ikx} \sum_{l=1}^N e^{-ik(x-l)} \psi_a(x-l),$$

esto implica que  $\psi_k(x)$  es una función que depende únicamente de la posición relativa  $x-l$ .

Como primera aproximación, tenemos que el valor esperado de la energía se comporta como

$$\varepsilon(k) = \frac{\langle \psi_k | H(x) | \psi_k \rangle}{\langle \psi_k | \psi_k \rangle}. \quad (1.5)$$

Tenemos que la corrección para los valores de átomo libre será pequeña si las funciones de onda vecinas y potenciales no se superponen. Por otra parte, debido a que  $\psi_k(x)$  es la función de onda electrónica, y además hay  $N$  electrones, tenemos que sumar la contribución de todos los electrones. De esta forma

$$\varepsilon(k) = \left\langle \sum_{l'} \psi_k \left| H(x) \right| \sum_{l'} \psi_k \right\rangle = \frac{1}{N} \sum_{l'} e^{ik(l-l')} \langle \psi_k(x-l') | H(x) | \psi_k(x-l) \rangle$$

$$\implies \varepsilon(k) = \frac{1}{N} \sum_h e^{ikh} \varepsilon_h \quad (1.6)$$

de donde,  $h = l - l'$ . Haciendo  $l' = 0$ , obtenemos que

$$\varepsilon_h = \langle \psi_k(x) | H(x) | \psi_k(x - h) \rangle . \quad (1.7)$$

Debido a la periodicidad de la red, las integrales  $\varepsilon_h$  dependen únicamente de la posición relativa de los átomos,  $h = l - l'$ , de los sitios sobre los cuales los orbitales están centrados.

Por otra parte, tenemos que  $V(x)$  es la energía potencial cristalina, la cual separaremos en dos contribuciones:  $V_a$  que es la contribución de la energía potencial de un átomo aislado situado en el origen y  $\tilde{V}(x)$  la contribución debida a los otros átomos.

Usando (1.6), tenemos que

$$\varepsilon(k) = \frac{1}{N} \left( \varepsilon_0 + \sum_h e^{ikh} \varepsilon_h \right) \quad (1.8)$$

Para  $h = 0$  de (1.7), tenemos que

$$\varepsilon_0 = \varepsilon_a + \langle \psi_k(x) | \tilde{V}(x) | \psi_k(x) \rangle = \varepsilon_a$$

donde  $\langle \psi_k(x) | H_{at} | \psi_k(x) \rangle = \varepsilon_a$ , si  $h = 0$  y  $\langle \psi_k(x) | H_{at} | \psi_k(x) \rangle = 0$  si  $h \neq 0$ .

Estas integrales  $\varepsilon_h$  serán distintas de cero sólo cuando se considere superposición de funciones entre átomos primeros vecinos. También esperamos que sólo se superpongan los orbitales de la banda más externa. Las otras bandas, correspondientes a niveles atómicos de energía más bajos, no alcanzan a superponerse a la distancia de equilibrio interatómica.

Las integrales  $\varepsilon_h = -A$  son todas iguales entre sí y los niveles de energía están dados por:

$$\varepsilon(k) = \varepsilon_a - A (e^{ika} + e^{-ika}) = \varepsilon_a - 2A \cos(ka) \quad (1.9)$$

Si la banda no está completamente llena, la energía total de todos los electrones disminuye a medida que los átomos se mueven juntos y el ancho de banda aumenta. Esta disminución de la energía es precisamente la fuerza vinculante de un enlace metálico. Esto es resultado del hecho de que los electrones que sostienen los átomos juntos son móviles, por esta razón pueden reajustar sus posiciones cuando el cristal es deformado [28, 29, 31].

---

## 1.5. Funciones de Wannier.

Aunque el método de tight-binding es conceptualmente más simple, existen serias dificultades cuando intentamos usarlo como un método cuantitativo. Parte de esas dificultades surgen porque los estados de tight-binding no son ortogonales entre sí. En particular, si construimos dos estados del mismo número de onda pero basado en diferentes estados atómicos podemos fácilmente ver que debido a términos de solapamiento esos estados no son ortogonales. Estas dificultades podrían evitarse tomando combinaciones lineales apropiadas de los orbitales atómicos en diferentes átomos tal que las integrales de superposición desaparezcan. Hay una manera sistemática de lograr esto que es el método de las funciones de Wannier [29, 33].

Las funciones de Wannier forman una base apropiada para expresar estados localizados en sólidos cristalinos. Tenemos que cada estado de Bloch puede ser expresado por una serie de Fourier, es decir,

$$\psi_{j,k}(x) = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^{1/2} \sum_n W_{j,n}(x) e^{ikna}, \quad (1.10)$$

de donde  $W_{j,n}(x)$  es la función de Wannier de la  $j$ -ésima banda y la  $n$ -ésima celda. Por otra parte, tenemos que

$$W_{j,n}(x) = W_j(x - na)$$

y

$$W_{j,n}(x) = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^{1/2} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \psi_{j,k}(x) dk. \quad (1.11)$$

Así, de (1.11), vemos que la función de Wannier  $W_{j,n}(x)$  es una combinación lineal localizada de todas las ondas de Bloch de una banda dada. Haciendo uso de la normalización de las funciones de Bloch

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{j,k}^*(x) \psi_{j',k'}(x) dx = \frac{2\pi}{a} \delta_{j,j'} \delta(k - k') \quad (1.12)$$

para  $k$  y  $k'$ , en la primera zona de Brillouin. Tenemos que

$$\int_{-\infty}^{\infty} W_{j,n}^*(x) W_{j',n'}(x) dx = \delta_{j,j'} \delta_{n,n'} \quad (1.13)$$

En virtud de que podemos definir la función de onda de Bloch como

$$\tilde{\psi}_{j,k}(x) = e^{i\phi_j(k)}\psi_{j,k}(x)$$

la cual describe el mismo estado normalizado que  $\psi_{j,k}(x)$ , siempre que  $\phi_j(k)$  sea una función real y que

$$\phi_j(k + 2\pi/a) - \phi_j(k) = 2\pi r_j$$

con  $r_j$  siendo un entero, tenemos que

$$\tilde{W}_j(x) = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^{1/2} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \tilde{\psi}_{j,k}(x) dk = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^{1/2} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} e^{i\phi_j(k)}\psi_{j,k}(x) dk$$

lo cual nos dice que la función de Wannier no está unívocamente definida [33].

## 1.6. Oscilaciones de Bloch.

Las oscilaciones de Bloch fueron señaladas por primera vez por Bloch y Zener mientras estudiaban las propiedades eléctrica de los cristales. Ellos observaron que el movimiento de los electrones en un cristal perfecto que está bajo la acción de un campo eléctrico constante sería oscilatorio en lugar de uniforme. Por esta razón, se deduce que este fenómeno llamado *oscilaciones de Bloch* describe las oscilaciones de una partícula confinada en un potencial periódico cuando una fuerza constante está actuando sobre la partícula [4, 35, 36].

Para describir este comportamiento, calculamos la posición con respecto al tiempo,  $X(t)$ , de esta forma observaremos la trayectoria que sigue la partícula en un instante determinado. Para esto, tenemos que la ecuación de movimiento para un electrón perturbado por un campo eléctrico constante  $E$  es

$$\hbar \frac{dk}{dt} = -eE \quad (1.14)$$

que tiene la solución

$$k(t) = k(0) - \frac{eE}{\hbar}t.$$

La velocidad  $v$  del electrón está dada por

$$v(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{d\varepsilon(k)}{dk} \quad (1.15)$$



donde  $\varepsilon(k)$  indica la relación de dispersión para una banda de energía dada. Supongamos que  $\varepsilon(k)$  es la energía asociada a la aproximación de tight-binding, esto es

$$\varepsilon(k) = -2A \cos(ak) \quad (1.16)$$

donde  $a$  es la constante de red y  $A$  es el elemento de matriz de “salto”.

Así,  $v(k)$  esta dada por

$$v(k) = \frac{2Aa}{\hbar} \sin(ak) .$$

Por lo tanto, la trayectoria que sigue el electrón para un determinado tiempo, tomando  $k(0) = 0$ , es

$$X(t) = \int_0^t v(k(t')) dt' = X(0) - \frac{2A}{eE} \cos\left(\frac{aeE}{\hbar} t\right) \quad (1.17)$$

donde  $X(0) = \frac{2A}{eE}$ .

Esto muestra que el electrón oscila en el espacio real. La frecuencia angular de las oscilaciones viene dada por  $\omega_B = \frac{ae|E|}{\hbar}$  y el período con el cual se efectúan las oscilaciones es  $\tau_B = \frac{2\pi\hbar}{ae|E|}$ .

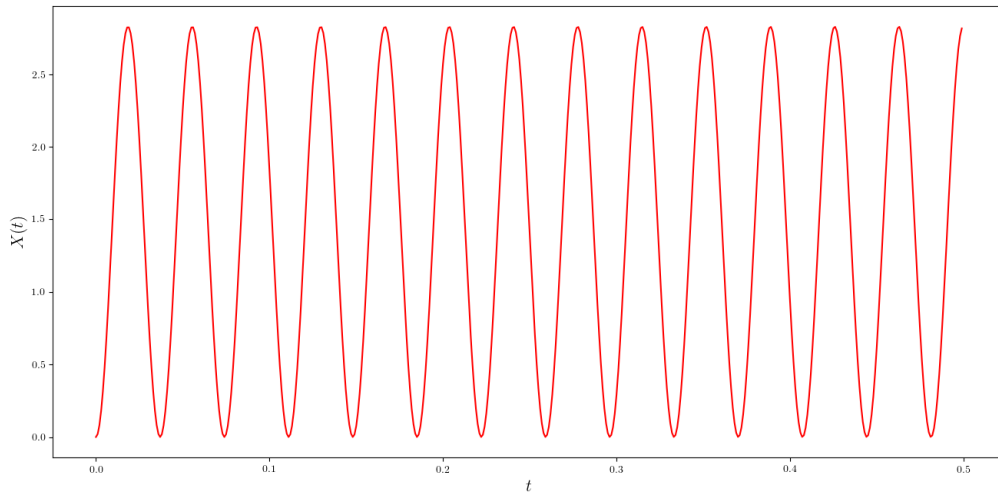


Figura 1.4: Oscilaciones de Bloch, con un período  $\tau_B = \frac{2\pi\hbar}{ae|E|}$ .

El fenómeno de las oscilaciones de Bloch, sólo podemos observarlo si  $\tau_B$  es más corto que el tiempo de relajación habitual  $\tau$ .

Por otra parte, en un metal tenemos que  $\tau_B$  es sustancialmente más largo que un tiempo de relajación típico (temperatura ambiente) de  $\tau$ . En este caso, para observar las oscilaciones de Bloch tenemos dos posibilidades. La primera consiste en bajarle la temperatura a un sólido casi perfecto para aumentar  $\tau$  con respecto a  $\tau_B$ . La segunda es construyendo una red artificial con una constante  $b$  que es mucho más grande que la escala atómica de  $a$  (por ejemplo usando una técnica de nanoestructura). Esto conducirá a una distancia reducida en el espacio recíproco que los electrones deben recorrer para completar una oscilación de forma que se pueda observar el fenómeno [4, 36].

---



# Capítulo 2

## Tratamiento a alta frecuencia.

Uno de los temas que actualmente ha adquirido un gran interés en el área de Física del estado sólido, y que es base fundamental en esta investigación son los sistemas cuánticos impulsados periódicamente y sometidos a un régimen de alta frecuencia [17, 18, 19, 20]. Para tratar estos sistemas utilizamos la Teoría de Floquet, la cual se usa para estudiar los sistemas de ecuaciones diferenciales lineales con coeficientes periódicos [11, 12, 13, 14]. El Teorema de Floquet por sí mismo no nos proporciona información de como calcular la función o solución de Floquet, simplemente afirma que tal función existe. En este capítulo, estudiaremos un método para hallar al menos una solución de Floquet del Hamiltoniano periódico, llamado expansion de Floquet-Magnus; utilizando la representación dada por Maricq de dicha expansion [25].

Al final de este capítulo, introduciremos el concepto de adiabaticidad, debido a que nuestro sistema está sometido a una perturbación con dependencia temporal [22, 37].

### 2.1. Evolución Dinámica de Sistemas Cuantizados

En esta sección, estudiamos como evoluciona la dinámica de los sistemas cuantizados en el tiempo, mediante el operador de evolución temporal  $U(t)$ . Tres maneras de describir la evolución dinámica son: el esquema de Schrödinger, el esquema de Heisenberg y el esquema de interacción (o Dirac). En el *esquema de Schrödinger*, los estados cambian en el tiempo y los operadores permanecen constante; a diferencia del *esquema de Heisenberg*, donde lo operadoras evolucionan en el tiempo y los estados permanecen constante. Mientras que en el *esquema de Dirac* tenemos que tanto los operadores como los estados evolucionan en el tiempo [38, 39].

---

### 2.1.1. Esquema de Schrödinger

En el esquema de Schrödinger tenemos que los estados evolucionan con el tiempo y los operadores que no dependen explícitamente de  $t$  permanecen constantes. Por lo tanto, para un estado en el instante  $t_0$ ,  $\Psi(t_0)$ , tenemos que mediante el operador de evolución  $U(t, t_0)$  definido en el espacio de Hilbert asociado al sistema cuantizado obtenemos el estado  $\Psi(t)$  en un tiempo posterior  $t$ , esto es

$$\Psi_s(t) = U(t, t_0)\Psi_s(t_0). \quad (2.1)$$

donde el subíndice se refiere a que estamos considerando los estados en el esquema de Schrödinger [38, 40].

El operador de evolución temporal  $U(t, t_0)$  es unitario, es decir,

$$U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0) = U(t, t_0)U^\dagger(t, t_0) = \mathbb{I} ,$$

y satisface la ecuación diferencial

$$-i\hbar \frac{\partial U(t, t_0)}{\partial t} + H(t)U(t, t_0) = 0 . \quad (2.2)$$

Así, de la ecuación diferencial (2.2) obtenemos

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi_s(t)}{\partial t} + H(t)\Psi_s(t) = 0 . \quad (2.3)$$

Esta es la conocida forma de **la ecuación dinámica de Schrödinger**, donde el Hamiltoniano  $H$  es denominado el Hamiltoniano del sistema.

Por otra parte, tenemos que los valores medios  $A_s$  evolucionan en el tiempo de acuerdo a

$$\langle A_s \rangle_t = \langle \Psi_s(t) | A_s | \Psi_s(t) \rangle . \quad (2.4)$$

La ecuación dinámica de movimiento que obedece los observables dinámicos es

$$\frac{d}{dt} \langle A_s \rangle_t = \frac{i}{\hbar} \langle [H, A_s] \rangle_t . \quad (2.5)$$

El esquema de Schrödinger es particularmente útil para ejecutar cálculos prácticos, ya que la evolución temporal se obtiene resolviendo una ecuación diferencial [38].

### 2.1.2. Esquema de Heisenberg

En el esquema de Heisenberg los operadores son los que evolucionan temporalmente mientras que los estados permanecen constantes. La evolución temporal de los operadores debe ser tal que dé lugar a las mismas propiedades cuánticas, para el mismo instante  $t$ , que en el esquema de Schrödinger.

El esquema de Heisenberg es unitariamente equivalente a el de Schrödinger. Para determinar la forma de los observables y de los estados en el esquema de Heisenberg hacemos una transformación canónica generada por el operador de evolución  $U^{-1}(t, t_0)$ , definido en (2.2). Esto es,

$$\Psi_H(t) = U^{-1}(t, t_0)\Psi_s(t) , \quad (2.6)$$

$$A_H(t) = U^{-1}(t, t_0)A_sU(t, t_0) \quad (2.7)$$

De las expresiones anteriores obtenemos que para el esquema de Heisenberg el vector estado es un vector fijo en el espacio de Hilbert, es decir, el vector estado es constante [38, 40].

Por otra parte, tenemos que el valor medio de cualquier observable en el tiempo  $t$  es calculado a partir de

$$\langle A_H \rangle_t = \langle \Psi_H(t) | A_H | \Psi_H(t) \rangle . \quad (2.8)$$

Para evaluar esta ecuación hay que resolver la ecuación dinámica de los operadores autoadjuntos

$$\frac{d}{dt} \langle A_H \rangle_t = \frac{i}{\hbar} [H, A_H] + \frac{\partial A_H}{\partial t} . \quad (2.9)$$

Las propiedades cuánticas son expresadas mediante las reglas de conmutación, las cuales, para el mismo instante  $t$ , son las mismas que en el esquema de Schrödinger.

La ventaja particular del esquema de Heisenberg es que las ecuaciones de movimiento tienen la forma canónica y permiten la descripción covariante de las ecuaciones clásicas de movimiento del análogo clásico. La desventaja del esquema en cuestión es que debemos resolver una ecuación de movimiento diferente para cada observable [38].

### 2.1.3. Esquema de Dirac o de Interacción

Este esquema fue diseñado para combinar las ventajas de los dos esquemas anteriores. Mientras mantiene las ecuaciones de movimiento simples, este esquema también nos permite realizar cálculos en forma práctica y simple. El esquema de Interacción (o Dirac) es de gran utilidad cuando el Hamiltoniano al que está sometido el sistema se puede descomponer como la suma de dos Hamiltoniano,  $H = H_0 + W(t)$ , donde  $H_0$  es tal que las correspondientes ecuaciones de movimiento de Heisenberg son fácilmente solubles [38, 39, 40]. En muchos casos,  $W(t)$  es una interacción perturbativa, pero no tenemos que suponer nada sobre su magnitud.

El esquema de Interacción para definir los estados  $\Psi_D(t)$  y los observables dinámicos  $A_D$  del sistema, le aplicamos una transformación unitaria  $R(t_0, t)$ , donde la familia de operadores  $R(t_0, t)$  es unitaria y además satisface la ecuación diferencial (2.2), al esquema de Schrödinger [38, 40]. Esto es,

$$\Psi_D(t) = R(t_0, t)\Psi_s(t) , \quad (2.10)$$

$$A_D(t) = R(t_0, t)A_sR^{-1}(t_0, t) . \quad (2.11)$$

La evolución temporal de los observables depende sólo de  $H_0$ , el cual, en muchas aplicaciones, corresponde al movimiento libre no influenciado por la interacción. Por otra parte, la evolución temporal del vector estado es únicamente determinada por  $R(t_0, t)W(t)R^{-1}(t_0, t)$ , el cual corresponde a los efectos dinámicos de la interacción.

La consecuencia inmediata de lo antes expuesto es que las ecuaciones de movimiento de los diversos observables en el esquema de interacción serían los mismos que los del esquema de Heisenberg si  $W(t) \equiv 0$ . Las ecuaciones de movimiento de los observables en el esquema de Interacción son formalmente ecuaciones de movimiento “libres” .

El vector estado obedece la ecuación dinámica

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi_D(t)}{\partial t} + R(t_0, t)W(t)R^{-1}(t_0, t)\Psi_D(t) = 0 . \quad (2.12)$$

El valor medio de cualquier observable en el tiempo  $t$  es calculado a partir de

$$\langle A_D \rangle_t = \langle \Psi_D(t) | A_D | \Psi_D(t) \rangle . \quad (2.13)$$

Para evaluar esta ecuación hay que resolver la ecuación dinámica de los operadores autoadjuntos

$$\frac{d}{dt} \langle A_D \rangle_t = \frac{i}{\hbar} [R(t_0, t) H_0 R^{-1}(t_0, t), A_D] + \frac{\partial A_D}{\partial t}. \quad (2.14)$$

Las propiedades cuánticas son expresadas mediante las reglas de conmutación (relaciones de Heisenberg), las cuales, para el mismo instante  $t$  son las mismas que en el esquema de Schrödinger y en el de Heisenberg [38].

El esquema de Interacción está a medio camino entre los esquemas de Schrödinger y el de Heisenberg, ya que *tanto los estados como los observables cambian en el tiempo*. Además, las evoluciones cinemática y dinámica del sistema se separan [38].

En este TEG, trabajaremos con la interpretación dada por Dirac, es decir, con el esquema de Interacción. Debido a que en nuestro sistema está en presencia de un campo eléctrico no homogéneo y rápidamente oscilante en el tiempo.

## 2.2. Método de Floquet-Magnus.

Nuestro interés en estudiar este método se debe a que el sistema en estudio está en presencia de un campo eléctrico que oscila rápidamente en el tiempo, por lo que la evolución temporal de sus estados cuánticos pueden describirse mediante un Hamiltoniano dependiente del tiempo. La ecuación de autovalores para este sistema viene dada por

$$\frac{dF(t)}{dt} = iH(t)F(t), \quad (2.15)$$

donde  $H(t) = H(t + \tau)$ , siendo  $\tau$  el período de dicho Hamiltoniano. El teorema de Floquet indica que la solución  $\Psi(x, t)$  tiene una estructura muy precisa:

$$F(t) = P(t)e^{-iGt}, \quad (2.16)$$

donde  $G$  es el Hamiltoniano efectivo, un Hamiltoniano independiente del tiempo, y  $P(t)$  es el operador de micromovimiento, el cual cumple con la siguiente propiedad  $P(t) = P(t + \tau) \forall t$  para garantizar la estructura de Floquet [11, 41]. Por lo tanto, aunque una solución de (2.15) en general no sea periódica, la periodicidad del operador de micromovimiento nos garantiza que (2.16) sea periódica [41].



El teorema de Floquet por sí mismo no proporciona información práctica de como determinar al Hamiltoniano efectivo y al operador de micromovimiento. Simplemente afirma su existencia. Aunque el estudio de las ecuaciones diferenciales con coeficientes periódicos presenta una seria dificultad debido a que no se conoce ningún método general para determinar a  $P(t)$  y a  $G$ .

Dos maneras de explorar la estructura de  $F(t)$  son

1<sup>era</sup>) Se realiza una expansión de Fourier de la solución formal, llevando a un sistema infinito de ecuaciones diferenciales lineales con coeficientes constantes. Así, el sistema finito dependiente de  $t$  es reemplazado por una constante al precio de manejar dimensión infinita. La resolución del sistema truncado proporciona una solución aproximada.

2<sup>do</sup>) Es de caracter perturbativa. Trata directamente con la forma (2.16) expandiendo

$$P(t) = \sum_{n=1}^{\infty} P_n(t) \quad G = \sum_{n=1}^{\infty} G_n \quad , \quad (2.17)$$

donde cada término  $G$  en (2.17) es fijo para asegurar  $P_n(t) = P_n(t + \tau)$ , lo que a su vez garantiza la estructura de Floquet (2.16) en cualquier orden de aproximación [41].

### 2.3. Hamiltoniano efectivo.

En el teorema de Floquet, observamos al sistema estroboscópicamente, esto es, en tiempos  $t_2 = t_1 + N\tau$ , donde  $N\tau$  es el tiempo estroboscópico medido en unidades del período. Es decir, el sistema se observa a dos escalas de tiempo: la primera escala se representa mediante el *Hamiltoniano efectivo*  $G$ , el cual se rige por el tiempo estroboscópico [4]. El Hamiltoniano efectivo es el Hamiltoniano del sistema promediado, el cual nos da la parte adiabática de los sistemas cuánticos impulsados periódicamente. Por esta razón, podemos calcular las autofunciones y el espectro de energía mediante el Hamiltoniano efectivo.

### 2.4. Operador de micromovimiento.

La segunda escala de tiempo que obtenemos al mirar el sistema de forma estroboscópica está representada por el *operador de micromovimiento*,  $P(t)$ . Este operador nos brinda

la contribución que proviene de la dependencia periódica del tiempo de los modos Floquet, ya que cumple con la siguiente propiedad,  $P_n(t) = P_n(t + \tau)$ , para garantizar la estructura de Floquet (2.16) en cualquier orden de aproximación [11, 25, 41].

Mediante el operador de micromovimiento podemos recuperar la parte no adiabática del sistema.

## 2.5. Expansion de Floquet-Magnus.

La aproximación de Floquet-Magnus, nos proporciona un método para determinar al operador de micromovimiento y al Hamiltoniano efectivo, de tal manera que garantizamos la estructura de (2.16).

Para estudiar este método, comenzaremos por introducir la función de Floquet (2.16) en la ecuación diferencial (2.15), para obtener la ecuación de evolución para  $P(t)$ :

$$\dot{P}(t) = -iH(t)P(t) - iP(t)G, \quad P(0) = \mathbb{I}$$

determinamos  $G$  para asegurar que  $P_n(t) = P_n(t + \tau)$  [11, 41]. Ahora bien, reemplazamos el esquema perturbativo usual en la ecuación (2.17)

$$P(t) = e^{\Lambda(t)}, \quad \Lambda(0) = 0 \tag{2.18}$$

la periodicidad se preserva con  $\Lambda(t + T) = \Lambda(t)$ .

Ahora bien, considerando las expansiones de las series  $\Lambda$  y  $G$ , esto es

$$\Lambda(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \Lambda_n(t) \quad G = \sum_{n=1}^{\infty} G_n, \tag{2.19}$$

con  $\Lambda_n = 0, \forall n$ . Obtenemos finalmente, la forma explícita del ansatz propuesto para  $F(t)$

$$F(t) = e^{\sum_{n=1}^{\infty} \Lambda_n(t)} e^{\sum_{n=1}^{\infty} G_n} \tag{2.20}$$

Este método es llamado *la expansión de Floquet-Magnus* [11].

## 2.6. Representación de Maricq.

Esta representación de la expansión de Floquet-Magnus que nos brinda Maricq, es un método más sencillo para determinar al operador de micromovimiento  $P(t)$ , garantizando la estructura de la función de Floquet.

Para estudiar este método dado por Maricq [25], tenemos que para un Hamiltoniano periódico en el tiempo con período  $\tau$ , el operador de evolución satisface la condición de ser unitario y de cumplir con la ecuación diferencial

$$\frac{dU(t)}{dt} = -iH(t)U(t) . \quad (2.21)$$

Como el Hamiltoniano  $H(t)$  es una función periódica en el tiempo, con período  $\tau$ , tenemos que la ecuación diferencial (2.21) tiene la forma de la ecuación diferencial de Hill. Por el teorema de Floquet tenemos que la solución a la ecuación (2.21) es la función de Floquet; por lo tanto, el operador de evolución puede ser escrito como

$$U(t) = P(t)e^{-iGt} . \quad (2.22)$$

Al sustituir el operador de evolución dado en (2.22) en la ecuación (2.21), obtenemos

$$\frac{dP(t)}{dt} = -iH(t)P(t) + iP(t)G , \quad (2.23)$$

con  $P(0) = \mathbb{I}$ . Obtenemos un esquema perturbativo proponiendo las siguientes expansiones

$$\begin{aligned} P(t) &= \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n P_n(t) \\ G &= \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n G_n \end{aligned} \quad (2.24)$$

y con la sustitución de  $H \rightarrow \lambda H$ . El factor  $\lambda$  se ha introducido para realizar un seguimiento de los distintos ordenes y se fija en 1 al final.

Al sustituir la ecuación (2.24) en (2.23), y luego comparando los coeficientes de  $\lambda^n$  de cada lado de la ecuación, obtenemos el resultado principal

$$\begin{aligned}
P_n(t) &= -i \int_0^t dt' \left\{ H(t')P_{n-1}(t') - \sum_{k=1}^{n-1} P_k(t')G_{n-k} - G_n \right\} \\
G_n &= \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt' \left\{ H(t')P_{n-1}(t') - \sum_{k=1}^{n-1} P_k(t')G_{n-k} \right\}
\end{aligned} \tag{2.25}$$

Los  $G_n$  son obtenidos con el requisito adicional de que cada  $P_n(t)$  son periódicos con período  $\tau$ . Las condiciones de consistencia impuesta por este método son  $P_0(t) = \mathbb{I}$  y  $G_0 = 0$  [25].

## 2.7. Convergencia.

En esta sección, estudiaremos la convergencia de las series dadas por las ecuaciones en (2.24). Para cualquier discusión de la convergencia, cuando el tamaño de términos sucesivos debe ser determinado, el concepto de una norma debe ser introducido. En nuestro caso sólo necesitamos saber que una norma puede definirse en el espacio de operadores que contienen a  $H(t)$  [25].

De la ecuación (2.22) y de la periodicidad de  $P(t)$ , tenemos que

$$U(\tau) = e^{iG\tau} \tag{2.26}$$

Determinamos  $U(t)$  por el método de aproximación de Picard. Una secuencia de funciones se define por

$$\begin{aligned}
U(t) &= 1 \\
U(t) &= 1 - i \int_0^t \lambda H(t')U_n(t')dt' .
\end{aligned} \tag{2.27}$$

El factor  $\lambda$  es introducido como un parámetro de expansión. Note que la secuencia anterior produce por lo tanto una expansión en serie de potencia para  $U(t)$  en términos del parámetro  $\lambda$ . Para la discusión actual de la convergencia, tenemos  $\lambda$  como una medida del tamaño del Hamiltoniano. Así,  $\|\lambda H\| = \lambda$ . Por inducción, la norma de las diferencias de los términos sucesivos son

$$\|U_n(t) - U_{n-1}(t)\| \leq \frac{\lambda^n t^n}{n!} . \tag{2.28}$$

Por lo tanto, (2.27) produce una sucesión convergente para el propagador  $U(t)$ . La periodicidad del Hamiltoniano es explicada por la expansión de  $H(t)$  en una serie de Fourier.

Si la convergencia de  $U_n(t)$  implica mediante la ecuación (2.26), que la serie para  $e^{-iGt}$  converge. Entonces, la serie de potencia  $G = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n G_n$  también debe de converger [25].

Debido a las dificultades en la evaluación de los términos de orden mayor  $P_n(t)$ , es deseable truncar la serie después de los tres primeros términos [25].

## 2.8. Teorema Adiabático.

En esta sección estudiamos el teorema adiabático, debido a que nuestro sistema en estudio consiste en el oscilador armónico cuántico en la red, el cual está en presencia de un campo eléctrico no homogéneo que oscila rápidamente en el tiempo. Observando al sistema estroboscópicamente, tenemos dos regímenes. El primero es cuando la perturbación o la dependencia temporal del Hamiltoniano varían mucho más lentamente que los tiempos característicos del sistema, llamado límite adiabático; en este régimen el operador de evolución completo es equivalente a la evolución del sistema generado por el Hamiltoniano estático. El segundo régimen es cuando esta aproximación no se cumple y los tiempos característicos de la dinámica del sistema son comparables a la dependencia temporal del Hamiltoniano. En el caso de una perturbación periódica en el tiempo, debemos comparar el período  $\tau$  del Hamiltoniano con los tiempos característicos del sistema. Cuando estos tiempos son del mismo orden, la perturbación es no adiabática [22].

Por otra parte, tenemos que si el Hamiltoniano  $H(t)$  de un sistema es dependiente del tiempo  $t$ , la ecuación de movimiento de Schrödinger

$$\hbar \frac{d\Psi(t)}{dt} = -iH(t)\Psi(t) \quad (2.29)$$

tiene en general soluciones no estacionarias. Pero en el límite cuando el cambio de  $H(t)$  se hace más lento que los tiempos característicos del sistema, el sistema pasa de un estado estacionario de  $H(0)$  a otros estados estacionarios de  $H(t)$ , para todo  $t$ . Esta es la afirmación del **teorema adiabático de la mecánica cuántica** [37].

La prueba más completa hasta ahora dada al teorema adiabático se debe a Max Born y Vladimir Fock. Ellos postularon que *un estado físico permanece en su autoestado instantáneo si la perturbación que actúa sobre él es suficientemente lenta en comparación con los tiempos característicos del sistema y hay una brecha entre su autovalor y el resto del espectro del Hamiltoniano.*

# Capítulo 3

## El oscilador armónico cuántico en la red.

En este capítulo, hacemos una revisión bibliográfica del oscilador armónico cuántico en la red, comenzamos por Mattis [1] quien en 1986 propone el oscilador armónico cuántico en la red para modelar el comportamiento de los electrones (o huecos) que saltan en una región de densidad de carga eléctrica constante en la superficie de un semiconductor. Seguidamente, señalamos las soluciones de este problema que dieron Chalbaud, Gallinar y Mata [2] en ese mismo año. Finalmente, analizamos la dinámica que sigue el oscilador armónico cuando está en presencia de un campo eléctrico homogéneo basandonos en el trabajo de Gallinar y Chalbaud [3], donde uno de sus aporte es las oscilaciones de Bloch asociada a este sistema.

### 3.1. El oscilador armónico cuántico en la red.

En 1986, Mattis [1] propuso el Hamiltoniano,  $H$ , que describe al oscilador armónico cuántico en la red para modelar el comportamiento de la densidad de carga en la superficie de un semiconductor. Este Hamiltoniano tiene la forma  $H = H_0 + V(x)$ , donde  $H_0$  es la energía cinética del sistema, la cual adopta la forma del término de energía de la aproximación de tight binding para describir el movimiento de las partículas de Wannier (electrones o huecos) cuando “saltan” desde un sitio de la red a otro.

El potencial  $V(x)$  describe el comportamiento de la densidad de carga de las partículas, la cual varía como  $V(x) \propto x^2/2$ , donde  $x = na \geq 0$  es la distancia perpendicular desde la superficie del semiconductor, siendo  $n$  la etiqueta de los índices del plano y  $a$  la

---

constante de la red o la distancia entre los planos que son paralelos a la superficie.

El Hamiltoniano en cuestión viene dado por

$$H = -A(e^{iap} + e^{-iap}) + \frac{kx^2}{2} \quad (3.1)$$

donde  $A \geq 0$  es el usual elemento de matriz de “salto” (hopping) obtenido a partir de la estructura de banda de energía,  $k$  es la constante elástica del oscilador. Los operadores  $e^{\pm iap}$  producen las traslaciones de la partícula en la red.

Basados en el trabajo de Mattis [1], Chalbaud, Gallinar y Mata [2] obtuvieron las soluciones a este problema. Ellos partieron de la ecuación de Schrödinger en la representación de los momentos,  $H\Psi(p) = E\Psi(p)$ , para obtener la forma canónica de la ecuación diferencial de Mathieu, la cual resulta ser

$$\frac{d^2\Psi(\nu)}{d\nu^2} + (\alpha - 2q \cos(2\nu))\Psi(\nu) = 0, \quad (3.2)$$

donde

$$\nu \equiv \frac{1}{2}ap, \quad q \equiv -\frac{8A}{ka^2}, \quad \alpha \equiv \frac{8E}{ka^2}.$$

Como  $x/a$  tiene que ser un número entero porque la partícula existe sólo en los puntos de la red, las funciones de onda básicas en la representación de los momentos serán ondas planas con la periodicidad de la red recíproca  $p = 2\pi/a$ . Las autofunciones  $\Psi_r(\nu)$  de (3.2) vienen dadas en términos de las funciones de Mathieu  $ce_{2r}(\nu; q)$  y  $se_{2r}(\nu; q)$  :

$$\Psi_r^e(\nu) = N_r^e ce_{2r}(\nu; q) \quad r = 0, 1, 2, \dots, \quad (3.3)$$

para las funciones periódicas pares de período  $\pi$ , y

$$\Psi_r^0(\nu) = N_r^0 se_{2r}(\nu; q) \quad r = 1, 2, \dots, \quad (3.4)$$

para las funciones periódicas impares de período  $\pi$ , siendo  $N_r^e$  y  $N_r^0$  las constantes de normalización apropiadas. Los autovalores de energía correspondientes son

$$E_r^e = \frac{1}{8}ka^2 a_{2r}(q) \quad r = 0, 1, 2, \dots \text{ (par)} \quad (3.5)$$

y

$$E_r^0 = \frac{1}{8}ka^2 b_{2r}(q) \quad r = 1, 2, \dots \text{ (impar)}, \quad (3.6)$$

siendo  $a_{2r}(q)$  y  $b_{2r}(q)$  los números característicos de las funciones de Mathieu periódicas pares o impares de período  $\pi$ , respectivamente. Los primeros cinco niveles de estos

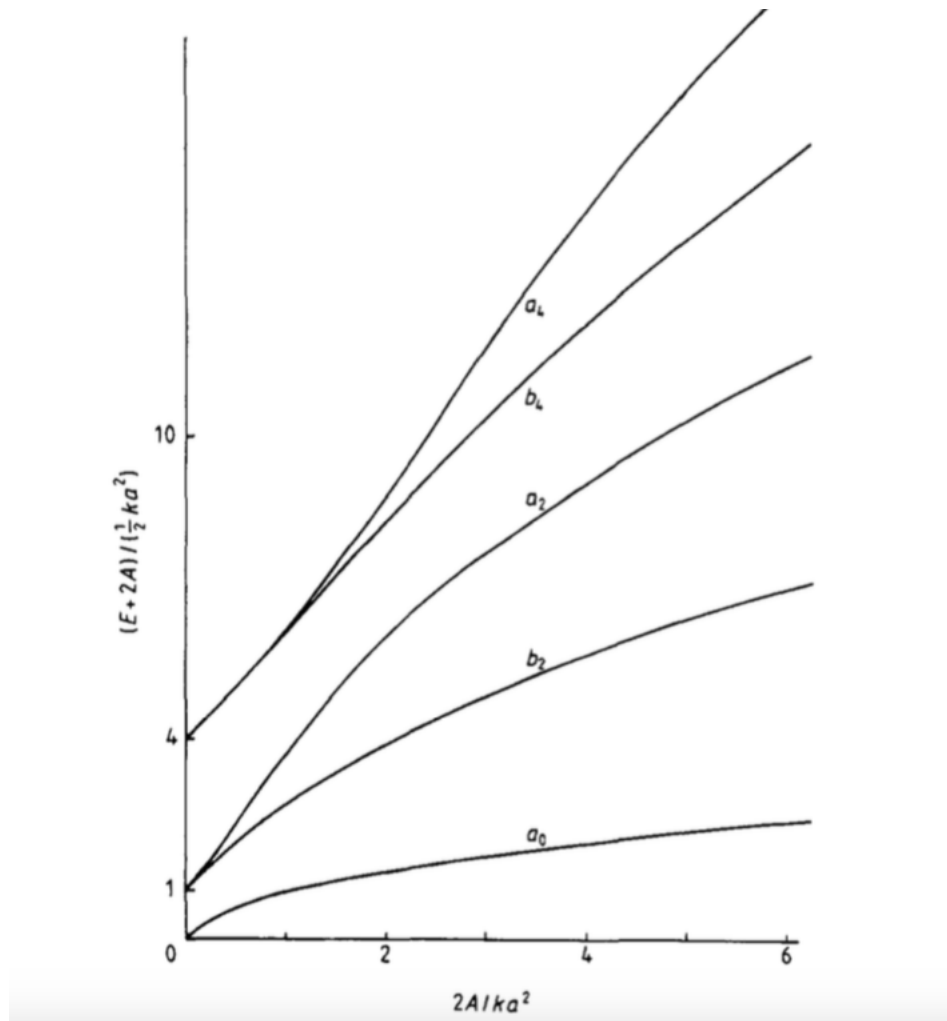


Figura 3.1:  $(E + 2A)/(\frac{1}{2}ka^2)$  versus el parámetro de la energía cinética  $2A/ka^2$ , para los primeros cinco niveles del oscilador [2] .

autovalores de energía se muestran en la Figura 3.1, como una función del parámetro adimensional “Energía cinética”  $2A/ka^2$ .

Uno de los resultado más importante del modelo oscilador armónico cuántico en la red se observan cuando el parámetro de la energía cinética es cero. Debido a que en este límite  $E_r^e = E_r^0 = \frac{ka^2r^2}{2}$ ; es decir, la partícula “se sienta” en los dos últimos vecinos más cercanos del origen (o en el origen), por lo que la energía total pasa a ser sólo energía potencial. En este mismo límite ( $A = 0$ ), las funciones de onda  $ce_{2r}(\nu; 0)$  y  $se_{2r}(\nu; 0)$  en (3.3) y (3.4) se comportan respectivamente como  $\cos(2r\nu)$  y  $\sin(2r\nu)$ , correspondientes a la deslocalización en el espacio de los momentos. A medida que aumentamos el parámetro



de la energía cinética se abre en niveles pares e impares, que se entrelazan entre sí como se muestra en la Figura 3.1.

### 3.2. El oscilador armónico en la red en presencia de un campo eléctrico homogéneo.

Basados en los resultados anteriores, Gallinar y Chalbaud se plantearon la pregunta de cuáles efectos produce una fuerza constante, de intensidad  $\alpha$  sobre el oscilador armónico cuántico en una red [3]. En el límite continuo el oscilador armónico cuántico forzado es un modelo conocido de la mecánica cuántica, donde se observan que las autofunciones de Hermite son desplazadas con respecto al caso donde el sistema no está forzado, y autovalor  $E_n$  experimenta un cambio general

$$E_n \rightarrow \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega - \frac{\alpha^2}{2k} . \quad (3.7)$$

Al igual que en el límite continuo, el problema  $\alpha \neq 0$  en la red también resulta ser soluble en forma cerrada, mostrando nuevas características interesantes totalmente ausentes en el caso continuo. Además, la presencia de la red da a lugar a dinámicas interesantes, y aún algo polémicas, como lo son *oscilaciones de Bloch*, ausentes en el límite del continuo.

El Hamiltoniano  $H$  que describe al oscilador armónico en una red unidimensional sometido a un campo de fuerza constante, viene dado por

$$H = -A(e^{iap} + e^{-iap}) + \frac{kx^2}{2} - \alpha x \quad (3.8)$$

Para resolver la ecuación de Schrödinger, consideraron  $x$  como una variable continua, para luego proyectarla en el espacio de Hilbert discreto donde  $x/a$  toma sólo valores enteros. Definiendo  $u \equiv x - x_0$ ; donde  $x_0 \equiv \alpha/k$  es la posición de equilibrio del oscilador desplazado, los autores obtuvieron la ecuación diferencial de Mathieu

$$\frac{d^2}{d\nu^2} \Psi(\nu) + (E' - 2q \cos(2\nu)) \Psi(\nu) = 0 \quad (3.9)$$

con  $\nu \equiv ap/2$ ,  $q \equiv -8A/ka^2$  y  $E' \equiv \frac{8}{ka^2} \left(E + \frac{\alpha^2}{2k}\right)$ .

Para obtener las soluciones de este problema, los autores aplicaron el teorema de Floquet, por lo que las soluciones son escritas como

$$\Psi_r(u, v) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} C_m^r(v) e^{i(v+2m)u} \quad (3.10)$$

donde  $v$  es el exponente característico de Floquet; con  $v = \frac{2\alpha}{ka}$ .

Por otra parte, Gallinar y Chalbaud estudiaron de forma numérica la dinámica de los paquetes de onda, partiendo de la función de onda del estado fundamental desplazada del oscilador armónico en el límite continuo:

$$\psi_0 = (2/\pi\sqrt{|q|})^{1/4} \exp[-x^2/(a^2\sqrt{|q|})], \quad (3.11)$$

con  $m = 1/2Aa^2$ ,  $\omega = (k/m)^{1/2}$ ,  $\tau = \frac{2\pi}{\omega}$  y  $|q| = 8A/ka^2$ .

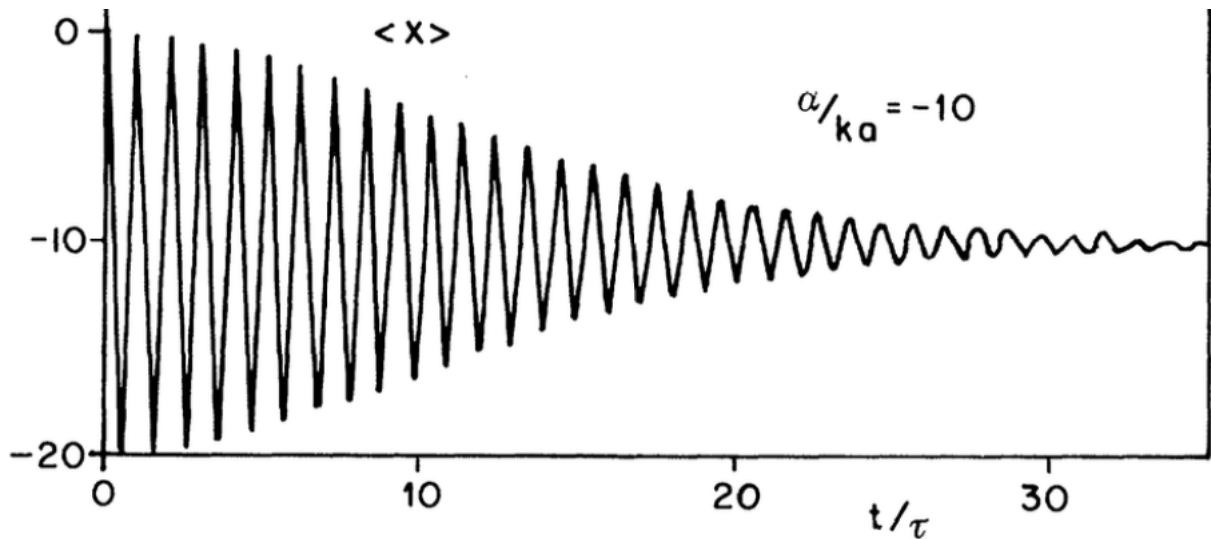


Figura 3.2: El valor medio  $\langle x \rangle$  en unidades de  $a$  para un paquete de onda en la red, como una función del tiempo. La posición de equilibrio del oscilador es  $X_0 = -10a$ . [3]

De la Figura 3.2, podemos observar el amortiguamiento de las oscilaciones de Bloch debido al potencial parabólico.

Gallinar y Chalbaud mostraron que los efectos de la red alteran drásticamente la dependencia del campo  $\alpha$  de los autovalores y autofunciones, así como también la dinámica de los paquetes de onda del oscilador. Además, otros de sus aportes fue que este tratamiento mecánico cuántico de la dinámica del paquete de onda muestra claramente las deficiencias del modelo semiclásico. Particularmente, la amortiguación exacta encontrada

cuando  $k \neq 0$ , ausente del modelo semiclásico.

Finalmente, ellos predicen que la presencia de intensidades no homogéneas en el campo eléctrico debería inducir un alargamiento del período de las oscilaciones de Bloch,  $\tau_B$ , en consecuencia esto aumentaría la dificultad de la observación experimental de las oscilaciones de Bloch.

---

# Capítulo 4

## El oscilador armónico en la red en presencia de un campo eléctrico no homogéneo y rápidamente oscilante en el tiempo.

En este TEG, estudiamos el efecto que produce el campo eléctrico no homogéneo y rápidamente oscilante en el tiempo sobre el sistema del oscilador armónico cuántico en una red. El Hamiltoniano que modela este comportamiento es

$$H(t) = -2A \cos(ap) + \frac{kx^2}{2} + \left( \epsilon x - \frac{\gamma}{3} x^3 \right) \cos(\omega t), \quad \omega \gg \omega_0 \quad (4.1)$$

donde  $\epsilon$  es la intensidad de la parte homogénea del campo eléctrico,  $\gamma$  es la intensidad de la parte no homogénea del campo eléctrico y  $\omega_0$  es la frecuencia natural del sistema.

En este capítulo, se muestran los resultados principales de este TEG. En la Sección 4.1, calculamos analíticamente, haciendo uso de la representación de Maricq, el Hamiltoniano efectivo y el operador de micromovimiento; del Hamiltoniano efectivo calculamos las autofunciones y el espectro de energía. Analizamos el comportamiento del espectro en función de los parámetros  $A$ ,  $\epsilon$  y  $\gamma$ . En la Sección 4.2, haciendo uso de la teoría de Floquet, obtenemos la Función de Onda de (4.1). Además, discutimos sobre los términos no adiabáticos del operador de micromovimiento. Finalmente, en la Sección 4.3, mostramos cómo es la dinámica que sigue la función de onda mediante el estudio de la densidad de probabilidad de los operadores posición y momentum y del valor medio de dichos operadores .

---

## 4.1. Hamiltoniano efectivo: Espectro y Autofuncio- nes.

El oscilador armónico cuántico en la red en presencia de un campo eléctrico no homogéneo y rápidamente oscilante en el tiempo está representado por el Hamiltoniano de la ecuación (4.1), el cual reescribimos de la siguiente manera

$$H(t) = H_0 + V(x, t), \quad V(x, t) = V(x, t + \tau) \quad (4.2)$$

donde  $H_0 = -2A \cos(ap) + V_1(x)$  representa al Hamiltoniano del oscilador armónico cuántico en la red, donde la energía cinética es el término asociado a la energía de tight-binding y  $V_1(x) = \frac{kx^2}{2}$  es el potencial parabólico. Por otra parte, tenemos que  $V(x, t) = V_2(x) \cos(\omega t)$ ,  $V_2(x) = (\epsilon x - \frac{\gamma}{3} x^3)$  es el potencial asociado al campo eléctrico no homogéneo y rápidamente oscilante en el tiempo, donde  $\omega \gg \omega_0$ , siendo  $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}} = \sqrt{2Aa^2k}$ , la frecuencia natural del sistema.

Para encontrar las soluciones de  $H(t)$ , aplicamos el Teorema de Floquet, enunciado en la sección 1.3.1. Este teorema expresa que la forma de la función de onda para un Hamiltoniano periódico en el tiempo es

$$\Psi(p, t) = P(t)e^{-iGt}\varphi(p) \quad (4.3)$$

donde  $P(t)$  es el operador de micromovimiento,  $E$  y  $\varphi(p)$  son respectivamente el espectro de energía y las autofunciones asociada al Hamiltoniano efectivo  $G$ . Debido a que el teorema de Floquet por sí sólo no nos proporciona información de cómo calcular la función o solución de Floquet, simplemente afirma que tal función existe; utilizamos la expansión de Floquet-Magnus, en la representación dada por Maricq para calcular  $G$  y  $P(t)$ . En el esquema perturbativo, Maricq propone las siguientes expansiones

$$P(t) = \sum_{n=1}^{\infty} P_n(t)$$

$$G = \sum_{n=1}^{\infty} G_n$$


---

donde los  $P_n(t)$  y  $G$  son calculados de la siguiente manera

$$P_n(t) = -i \int_0^t dt' \left\{ H(t') P_{n-1}(t') - \sum_{k=1}^{n-1} P_k(t') G_{n-k} - G_n \right\},$$

$$G_n = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt' \left\{ H(t') P_{n-1}(t') - \sum_{k=1}^{n-1} P_k(t') G_{n-k} \right\}.$$

Para calcular los  $G_n$  debemos tener en cuenta que  $P_n(t) = P_n(t + \tau)$  y las condiciones de consistencia impuesta por el método,  $P_0(t) = \mathbb{I}$  y  $G_0 = 0$ .

Así, obtenemos que los  $G_n$  y  $P_n(t)$  para el Hamiltoniano del sistema en estudio son

$$G_1 = -2A \cos(ap) + V_1(x),$$

$$P_1(t) = -i \frac{V_2(x)}{\omega} \sin(\omega t),$$

$$G_2 = 0$$

$$P_2(t) = \frac{4A}{\omega^2} [\cos(ap), V_2(x)] \sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right) - \frac{V_2^2(x)}{2\omega^2} \sin^2(\omega t),$$

y

$$G_3 = -\frac{4A^2}{\omega^2} [\cos(ap), [\cos(ap), V_2(x)]] + \frac{2A}{\omega^2} [V_1(x), [\cos(ap), V_2(x)]] + \frac{A}{2\omega^2} [V_2(x), [\cos(ap), V_2(x)]]$$

Truncamos la serie hasta los términos de  $\omega^{-2}$ , debido a que  $\omega$  es grande. Por lo tanto, nos queda que el Hamiltoniano efectivo es

$$G = -2A \cos(ap) + V_1(x) - \frac{4A^2}{\omega^2} [\cos(ap), [\cos(ap), V_2(x)]]$$

$$+ \frac{2A}{\omega^2} [V_1(x), [\cos(ap), V_2(x)]] - \frac{A}{2\omega^2} [V_2(x), [\cos(ap), V_2(x)]]$$

y el operador de micromovimiento es

$$P(t) = 1 - i \frac{V_2(x)}{\omega} \sin(\omega t) + \frac{4A}{\omega^2} [\cos(ap), V_2(x)] \sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right) - \frac{V_2^2(x)}{2\omega^2} \sin^2(\omega t) \quad (4.4)$$

Sustituyendo en el Hamiltoniano efectivo los conmutadores calculados en el Apéndice A, considerando sólo términos de orden uno en  $\gamma$  y suponiendo que  $k\gamma \approx 0$ , tenemos que el Hamiltoniano efectivo es

$$\begin{aligned}
 G = & \left( -2A \cos(ap) \left( 1 + \frac{4iAa^3\gamma}{\omega^2} \sin(ap) - \frac{a^2\epsilon}{4\omega^2} \left( \epsilon - \frac{2\gamma a^2}{3} \right) \right) + \frac{iAka^3\epsilon}{\omega^2} \sin(ap) \right) \\
 & - \left( \frac{2iAka^2\epsilon}{\omega^2} \cos(ap) + \frac{Aa^2\gamma}{\omega^2} (8iA \sin(ap) + a\epsilon) \sin(ap) \right) \frac{\partial}{\partial p} \\
 & + \left( -\frac{k}{2} + \frac{Aa^2\gamma\epsilon}{\omega^2} \cos(ap) \right) \frac{\partial^2}{\partial p^2}
 \end{aligned} \tag{4.5}$$

Del Hamiltoniano efectivo podemos observar que al agrupar los términos que acompañan a la energía cinética,

$$-2A \cos(ap) \left( 1 + \frac{4iAa^3\gamma}{\omega^2} \sin(ap) - \frac{a^2\epsilon}{4\omega^2} \left( \epsilon - \frac{2\gamma a^2}{3} \right) + \frac{ka^2\epsilon}{\omega^2} x + \frac{a^2\gamma\epsilon}{2\omega^2} x^2 \right),$$

vemos que el parámetro de la energía cinética, pasa de ser una constante ( $-2A$ ) a ser una función que depende del momentum y de la posición. Es decir, que al someter al Hamiltoniano a altas frecuencias la constante de hopping (salto) deja de ser una constante, dependiendo ahora de la posición y del momentum de la partícula.

Por otra parte, se puede observar que cuando  $\gamma = 0$ , recuperamos el Hamiltoniano efectivo del oscilador armónico en la red cuando está en presencia de un campo eléctrico homogéneo y rápidamente oscilante en el tiempo, esto es

$$G = \left( -2A \cos(ap) \left( 1 - \frac{a^2\epsilon^2}{4\omega^2} \right) + \frac{iAka^3\epsilon}{\omega^2} \sin(ap) \right) - \frac{2iAka^2\epsilon}{\omega^2} \cos(ap) \frac{\partial}{\partial p} - \frac{k}{2} \frac{\partial^2}{\partial p^2} \tag{4.6}$$

Dicho Hamiltoniano ha sido considerado por González y Martínez [publicación en proceso].

Sabemos de la sección 2.2, que el Hamiltoniano efectivo es el Hamiltoniano del sistema promediado; debido a esto, podemos calcular las autofunciones y el espectro de energía mediante el Hamiltoniano efectivo. Partiendo de la ecuación de autovalores en la representación de los momentos,  $G\varphi(p) = E\varphi$ , obtenemos

---

$$\begin{aligned}
& \left( -2A \cos(ap) \left( 1 + \frac{4iAa^3\gamma}{\omega^2} \sin(ap) - \frac{a^2\epsilon}{4\omega^2} \left( \epsilon - \frac{2\gamma a^2}{3} \right) \right) + \frac{iAka^3\epsilon}{\omega^2} \sin(ap) \right. \\
& \left. - E \right) \varphi(p) - \left( \frac{2iAka^2\epsilon}{\omega^2} \cos(ap) + \frac{Aa^2\gamma}{\omega^2} (8iA \sin(ap) + a\epsilon) \sin(ap) \right) \frac{\partial \varphi(p)}{\partial p} \\
& + \left( -\frac{k}{2} + \frac{Aa^2\gamma\epsilon}{\omega^2} \cos(ap) \right) \frac{\partial^2 \varphi(p)}{\partial p^2} = 0
\end{aligned} \tag{4.7}$$

Ahora bien, procedemos a aplicar el método de eliminación de la primera derivada para pasar la ecuación diferencial (4.7) a una ecuación diferencial de Hill. Este método que implementamos a continuación se explica en detalle en el Apéndice B. Tenemos que la ecuación diferencial (4.7) se puede escribir cómo

$$\frac{d^2 \varphi(p)}{dp^2} + N(p) \frac{d\varphi(p)}{dp} + Q(p) \varphi(p) = 0 \tag{4.8}$$

donde

$$N(p) = - \frac{\frac{2iAka^2\epsilon}{\omega^2} \cos(ap) + \frac{Aa^2\gamma}{\omega^2} (8iA \sin(ap) + a\epsilon) \sin(ap)}{-\frac{k}{2} + \frac{Aa^2\gamma\epsilon}{\omega^2} \cos(ap)},$$

despreciando los términos mayores a  $\omega^{-2}$ , obtenemos

$$N(p) = \frac{2Aa^2}{k\omega^2} (2ik\epsilon \cos(ap) + \gamma(a\epsilon + 8iA \sin(ap)) \sin(ap)) \tag{4.9}$$

y

$$Q(p) = \frac{-2A \cos(ap) \left( 1 + \frac{4iAa^3\gamma}{\omega^2} \sin(ap) - \frac{a^2\epsilon}{4\omega^2} \left( \epsilon - \frac{2\gamma a^2}{3} \right) \right) + \frac{iAka^3\epsilon}{\omega^2} \sin(ap) - E}{-\frac{k}{2} + \frac{Aa^2\gamma\epsilon}{\omega^2} \cos(ap)},$$

despreciando los términos mayores a  $\omega^{-2}$ , obtenemos

$$\begin{aligned}
Q(p) = & \frac{2}{k} (E + 2A \cos(ap)) + \frac{Aa^2}{3k^2\omega^2} (\epsilon \cos(ap) (2a^2k\gamma + 12E\gamma \\
& - 3k\epsilon + 24A\gamma \cos(ap)) + 6iak \sin(ap) (-k\epsilon + 8A\gamma \cos(ap))).
\end{aligned} \tag{4.10}$$

Aplicando la transformación  $\varphi(p) = v(p)u(p)$  a (4.8), obtenemos que

$$v(p) = e^{-\int \frac{N(p)}{2} dp} \tag{4.11}$$



$$\frac{d^2 u(p)}{dp^2} + q(p)u(p) = 0, \quad (4.12)$$

donde

$$q(p) = -\frac{N'(p)}{2} - \frac{N^2(p)}{4} + Q(p), \quad (4.13)$$

como estamos despreciando los términos mayores a  $\omega^{-2}$ , tenemos que

$$N^2(p) \approx 0,$$

$$N'(p) = \frac{2Aa^3}{k\omega^2} (8iaA\gamma \sin(2ap) + a\gamma\epsilon \cos(ap) - 2ik\epsilon \sin(ap)),$$

al sustituir en (4.13), obtenemos que

$$q(p) = \frac{1}{3k\omega^2} (6kE\omega^2 + A \cos(ap) (-a^2\epsilon(a^2k\gamma - 12Ek\gamma + 3k\epsilon) + 12k\omega^2 + 24a^2A\gamma\epsilon \cos(ap))). \quad (4.14)$$

Así, obtenemos que la ecuación diferencial para  $u(p)$  es

$$\frac{d^2 u(p)}{dp^2} + \frac{1}{3k\omega^2} ((6kE\omega^2 + A \cos(ap) (-a^2\epsilon(a^2k\gamma - 12Ek\gamma + 3k\epsilon) + 12k\omega^2 + 24a^2A\gamma\epsilon \cos(ap)))u(p) = 0 \quad (4.15)$$

Por otra parte, tenemos que

$$\int \frac{N(p)}{2} dp = \frac{Aa^2\gamma\epsilon}{k\omega^2} \cos(ap) - \frac{2iAa}{k\omega^2} (k\epsilon \sin(ap) - A\gamma(\sin(2ap) - 2ap)) \quad (4.16)$$

al sustituir (4.16) en (4.11), obtenemos

$$v(p) = e^{\frac{Aa^2\gamma\epsilon}{k\omega^2} \cos(ap)} e^{-\frac{2iAa}{k\omega^2} (k\epsilon \sin(ap) - A\gamma(\sin(2ap) - 2ap))} \quad (4.17)$$

La ecuación (4.15) tiene la forma de la ecuación de Hill, donde  $q(p) = q(p + \frac{2\pi}{a})$ . Por lo tanto, procedemos a aplicar el teorema de Floquet, esto es

$$u_\nu(p) = e^{ia\nu p} \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n^\nu e^{ianp} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n^\nu e^{ia(n+\nu)p}, \quad (4.18)$$


---

donde  $\nu$  es el exponente característico de Floquet. Para determinar  $\nu$ , le aplicamos la transformada de Fourier a  $u_\nu(p)$ , esto es

$$\begin{aligned}\phi_\nu(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dp e^{ipx} \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n^\nu e^{ia(n+\nu)p} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n^\nu \int dp e^{i(x+an+a\nu)p} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n^\nu \delta(x + an + a\nu).\end{aligned}$$

Al proyectar sobre el subespacio de Hilbert donde  $x = a\eta$ , con  $\eta \in \mathbb{Z}$ , deducimos del argumento de la función delta de Dirac que el exponente característico es

$$\nu = -(n + \eta) = -l, \quad l \in \mathbb{Z},$$

es decir,  $\nu$  es un entero.

Por otra parte, tenemos que *las autofunciones* vienen dada por la transformación  $\varphi(p) = v(p)u(p)$ .

$$\varphi(p) = e^{\frac{Aa^2\gamma\epsilon}{k\omega^2} \cos(ap)} e^{-\frac{2iAa}{k\omega^2} (k\epsilon \sin(ap) - A\gamma(\sin(2ap) - 2ap))} \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n^\nu e^{ia(n+\nu)p}. \quad (4.19)$$

Ahora bien, para calcular el espectro de energía tenemos que

$$u_\nu''(p) = -a^2 \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n^\nu (n + \nu)^2 e^{ia(n+\nu)p},$$

al sustituirlo en la ecuación diferencial (4.15), obtenemos

$$\begin{aligned}-a^2 \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n^\nu (n + \nu)^2 e^{ia(n+\nu)p} + \frac{1}{3k\omega^2} ((6kE\omega^2 + A \cos(ap))(-a^2\epsilon(a^2k\gamma - 12Ek\gamma + 3k\epsilon) \\ + 12k\omega^2 + 24a^2A\gamma\epsilon \cos(ap))) \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n^\nu e^{ia(n+\nu)p} = 0\end{aligned} \quad (4.20)$$

Al hacer uso de la igualdad

$$\cos(\mu ap) e^{ia(n+\nu)p} = \frac{1}{2} (e^{ia(n+\nu+\mu)p} + e^{-ia(n+\nu+\mu)p})$$

en la ecuación (4.20) y haciendo varias manipulaciones algebraicas, obtenemos la ecuación en diferencia para los  $C_n^\nu$

$$S_3 C_{n-2}^\nu + S_2 C_{n-1}^\nu + (S_1 - a^2(n + \nu)^2) C_n^\nu + S_2 C_{n+1}^\nu + S_3 C_{n+2}^\nu = 0 \quad (4.21)$$

donde

$$S_1 \equiv \frac{2E}{k} + \frac{4a^2 A^2 \gamma \epsilon}{k^2 \omega^2},$$

$$S_2 \equiv \frac{2A}{k} - \frac{Aa^4 \gamma \epsilon}{6k\omega^2} + \frac{2Aa^2 E \epsilon \gamma}{k^2 \omega^2} - \frac{Aa^2 \epsilon^2}{2k\omega^2}$$

y

$$S_3 \equiv \frac{2a^2 A^2 \gamma \epsilon}{k^2 \omega^2}.$$

Para asegurar la convergencia de los  $C_n^\nu$ , dividimos la ecuación en diferencias (4.21) por  $(S_1 - a^2 n^2)$ , así

$$\frac{S_3}{S_1 - a^2 n^2} C_{n-2}^\nu + \frac{S_2}{S_1 - a^2 n^2} C_{n-1}^\nu + \frac{S_1 - a^2(n + \nu)^2}{S_1 - a^2 n^2} C_n^\nu + \frac{S_2}{S_1 - a^2 n^2} C_{n+1}^\nu$$

$$+ \frac{S_3}{S_1 - a^2 n^2} C_{n+2}^\nu = 0. \quad (4.22)$$

Luego, para determinar las raíces del determinante de Hill, seguimos a F. M. Phelps en [42], quien obtiene una expresión para calcular las raíces de la ecuación del determinante, este tratamiento lo explicamos con detalle en el Apéndice C. Siguiendo el procedimiento descrito en el apéndice, obtenemos

$$\Delta(\nu) = \Delta(0) - \frac{\sin^2(\nu\pi)}{\sin^2\left(\frac{S_1^{1/2}}{a}\pi\right)}, \quad (4.23)$$

en nuestro caso, tenemos que  $\nu$  es un número entero; por lo tanto,

$$\Delta(\nu) = \Delta(0), \quad (4.24)$$

como el determinante de Hill es  $\Delta(\nu) = 0$ , sus raíces vienen dadas por

$$\Delta(0) = 0. \quad (4.25)$$

Ahora bien, para calcular  $\Delta(0)$ , partimos de (4.22), donde obtenemos que el determinante de Hill para  $\nu = 0$  es

---

$$\begin{vmatrix}
 \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \\
 \cdots & 1 & \frac{S_2}{S_1-4a^2} & \frac{S_3}{S_1-4a^2} & 0 & 0 & \cdots \\
 \cdots & \frac{S_2}{S_1-a^2} & 1 & \frac{S_2}{S_1-a^2} & \frac{S_3}{S_1-a^2} & 0 & \cdots \\
 \cdots & \frac{S_3}{S_1} & \frac{S_2}{S_1} & 1 & \frac{S_2}{S_1} & \frac{S_3}{S_1} & \cdots \\
 \cdots & 0 & \frac{S_3}{S_1-a^2} & \frac{S_2}{S_1-a^2} & 1 & \frac{S_2}{S_1-a^2} & \cdots \\
 \cdots & 0 & 0 & \frac{S_3}{S_1-4a^2} & \frac{S_2}{S_1-4a^2} & 1 & \cdots \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 
 \end{vmatrix} = 0 \quad (4.26)$$

El determinante es infinito. Sin embargo, dado que la serie de la cual se obtiene este determinante es rápidamente convergente, debería ser posible tomar aproximaciones sucesivas al determinante infinito y obtener una solución tan exacta como lo requiramos. Por lo tanto, las aproximaciones sucesivas requeridas son

$$\Delta(0)^0 = 1,$$

$$\Delta(0)^1 = \begin{vmatrix}
 1 & \frac{S_2}{S_1-a^2} & \frac{S_3}{S_1-a^2} \\
 \frac{S_2}{S_1} & 1 & \frac{S_2}{S_1} \\
 \frac{S_3}{S_1-a^2} & \frac{S_2}{S_1-a^2} & 1
 \end{vmatrix},$$

$$\Delta(0)^2 = \begin{vmatrix} 1 & \frac{S_2}{S_1-4a^2} & \frac{S_3}{S_1-4a^2} & 0 & 0 \\ \frac{S_2}{S_1-a^2} & 1 & \frac{S_2}{S_1-a^2} & \frac{S_3}{S_1-a^2} & 0 \\ \frac{S_3}{S_1} & \frac{S_2}{S_1} & 1 & \frac{S_2}{S_1} & \frac{S_3}{S_1} \\ 0 & \frac{S_3}{S_1-a^2} & \frac{S_2}{S_1-a^2} & 1 & \frac{S_2}{S_1-a^2} \\ 0 & 0 & \frac{S_3}{S_1-4a^2} & \frac{S_2}{S_1-4a^2} & 1 \end{vmatrix}.$$

debido a que los términos mayores a  $\omega^{-2}$  son despreciable, en este trabajo utilizaremos la solución de primer orden del determinante de Hill, esto es

$$\Delta(0) \cong 1 + \frac{2S_2^2 S_3 - 2S_2^2 (S_1 - a^2) - S_3^2 S_1}{S_1 (S_1 - a^2)^2}. \quad (4.27)$$

Así, usando la igualdad en (4.25), obtenemos que la forma implícita del *espectro de Energía* es

$$\begin{aligned} & - \frac{1}{3k(ka^2 - 2E)^2 E^2 \omega^2} \left( -12k\omega^2 E^4 + (12a^2 k^2 \omega^2 + 96A^2 a^2 \gamma \epsilon) E^3 + \right. \\ & + (24A^2 k \omega^2 - 12A^2 a^2 k \epsilon^2 - 3a^4 k^3 \omega^2 - 52a^4 A^2 k \gamma \epsilon) E^2 \\ & \left. + (6A^2 a^4 k^2 \epsilon^2 - 12A^2 a^2 k^2 \omega^2 - 120A^4 a^2 \gamma \epsilon) E + 24A^4 a^4 k \gamma \epsilon \right) = 0, \end{aligned} \quad (4.28)$$

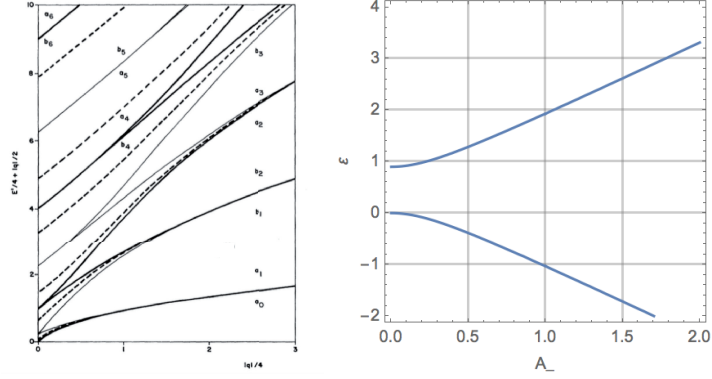
para  $E \neq 0$  y  $E \neq \frac{ka^2}{2}$ . Así,

$$\begin{aligned} & -12k\omega^2 E^4 + (12a^2 k^2 \omega^2 + 96A^2 a^2 \gamma \epsilon) E^3 + (24A^2 k \omega^2 - 12A^2 a^2 k \epsilon^2 - \\ & - 3a^4 k^3 \omega^2 - 52a^4 A^2 k \gamma \epsilon) E^2 + (6A^2 a^4 k^2 \epsilon^2 - 12A^2 a^2 k^2 \omega^2 - \\ & - 120A^4 a^2 \gamma \epsilon) E + 24A^4 a^4 k \gamma \epsilon = 0, \end{aligned} \quad (4.29)$$

obtenemos un ecuación para el espectro de energía en función de los parámetros  $A$ ,  $\epsilon$  y  $\gamma$ .

Para completar la discusión del espectro de energía, analizaremos el espectro de energía de nuestro sistema, dada por la ecuación (4.29) en paralelo al caso donde el campo eléctrico

---



(a) Independiente del tiempo. (b) Dependiente del tiempo.

Figura 4.1: El espectro de energía en función del parámetro de la energía cinética  $A$ . Para un campo eléctrico homogéneo

es homogéneo y rápidamente oscilante en el tiempo, donde el espectro de energía viene dado por

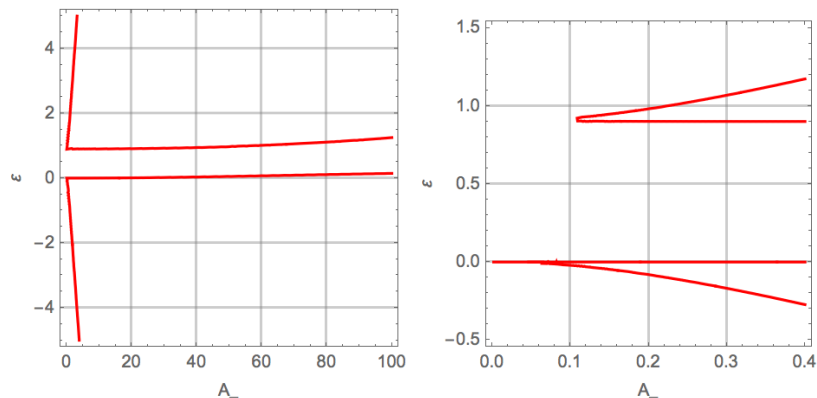
$$-\frac{1}{(ka^2 - 2E)E} \left( 2A^2 a^2 \epsilon^2 - 4A^2 \omega^2 - ka^2 \omega^2 E + 2\omega^2 E^2 \right) = 0, \quad (4.30)$$

donde al igual que en el caso donde el campo eléctrico es no homogéneo tenemos que para garantizar la existencia de (4.30) se debe cumplir que  $E \neq 0$  y  $E \neq \frac{ka^2}{2}$ .

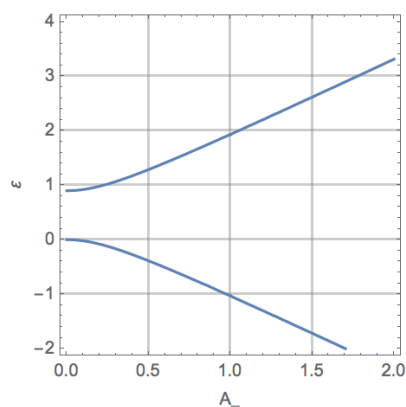
De la Figura 4.1, observamos que la alta frecuencia produce una selección de autoestados del sistema, a diferencia del caso independiente del tiempo donde hay muchos estados posibles. También se puede notar la degeneración, ya que para un valor de la energía ( $E = \epsilon$ ) dado, hay  $\nu$  estados posibles. Por otra parte, de la Figura 4.2 se deduce que la no homogeneidad del campo eléctrico produce la aparición de dos nuevas bandas de energía y por consecuencia de dos estados.

Por otra parte, de la gráfica 4.2(b) se puede apreciar que cuando el parámetro de la energía cinética es muy pequeño desaparecen dos estados de energía. De la Figura 4.2(a), observamos que a medida que aumentamos el parámetro de la energía cinética aumenta la separación entre las bandas.

De las Figuras en 4.3, confirmamos que la no homogeneidad produce la aparición de nuevos estados. Por otra parte, al detallar cada banda de energía en las gráficas 4.3(a) y 4.3(b), observamos como responden las bandas de energía a la intensidad de la parte homogénea del campo eléctrico, para el caso homogéneo y para el caso no homogéneo.



(a) Campo eléctrico no homogéneo, con  $0 < A \leq 100$ . (b) Campo eléctrico no homogéneo, con  $0 < A \leq 0,4$ .

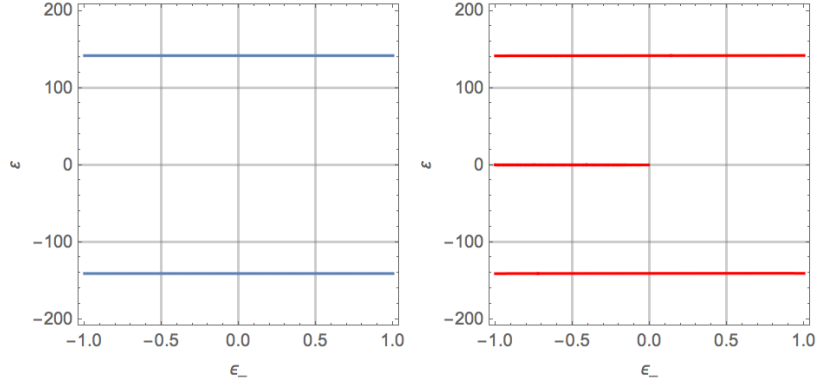


(c) Campo eléctrico homogéneo, con  $0 < A \leq 2$

Figura 4.2: El espectro de energía en función del parámetro de la energía cinética  $A$ , tanto para el caso no homogéneo como para el homogéneo, respectivamente. Se ha elegido  $\gamma = 0,2$ ,  $\epsilon = 0,8$ ,  $k = 1,8$ ,  $\omega = 95$ .

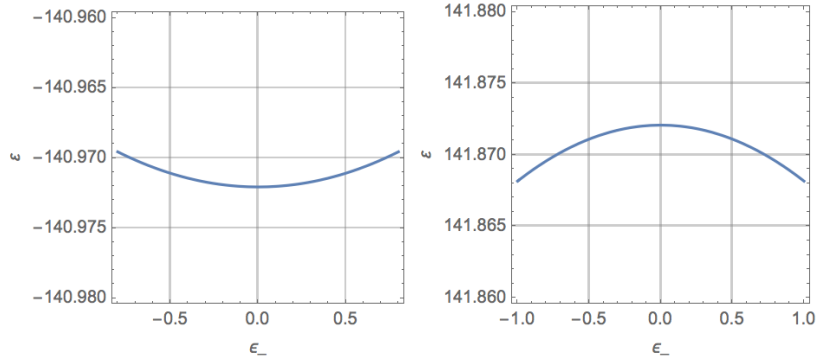
Para el caso del campo eléctrico homogéneo, observamos que las bandas se comportan de forma parabólica, predominando así el potencial parabólico sobre el potencial lineal. Luego, al estudiar cada banda individualmente, observamos que la banda superior (Figura 4.4(a)), se comporta como una función convexa, generando un máximo de energía; a diferencia de la banda inferior (Figura 4.4(b)), que se comporta como una función cóncava, generando así un mínimo de energía.

Por otra parte, para el caso del campo eléctrico no homogéneo, observamos que tanto la banda superior como la inferior se comportan como una recta con pendiente positiva, por lo que deducimos que el potencial predominante es el lineal. A diferencia de las ban-



(a) Campo eléctrico homogéneo, (b) Campo eléctrico no homogéneo, con  $-1 \leq \epsilon \leq 1$ .

Figura 4.3: El espectro de energía en función de la intensidad del campo eléctrico homogéneo,  $\epsilon$ . Se ha elegido  $\gamma = 0,2$  ,  $A = 100$  ,  $k = 1,8$  ,  $\omega = 95$ .



(a) Banda superior, con  $-1 \leq \epsilon \leq 1$ . (b) Banda inferior, con  $-1 \leq \epsilon \leq 1$ .

Figura 4.4: Comportamiento del espectro de energía en función de la intensidad del campo eléctrico homogéneo,  $\epsilon$ . Para el caso donde sólo existe campo homogéneo. Se ha elegido  $\gamma = 0,2$  ,  $A = 100$  ,  $k = 1,8$  ,  $\omega = 95$ .

das intermedia, las cuales se rigen por un comportamiento parabólico como se nota en la Figura 4.5(c), predominando el potencial parabólico. Además, podemos observar que a diferencia del caso del campo eléctrico homogéneo estas bandas no están acotadas.

De la Figura 4.6, observamos que las bandas de energía en función de la intensidad de la parte no homogénea del campo eléctrico sigue un comportamiento similar al caso de las bandas de energía en función de la intensidad de la parte homogénea del campo eléctrico ante expuesto.



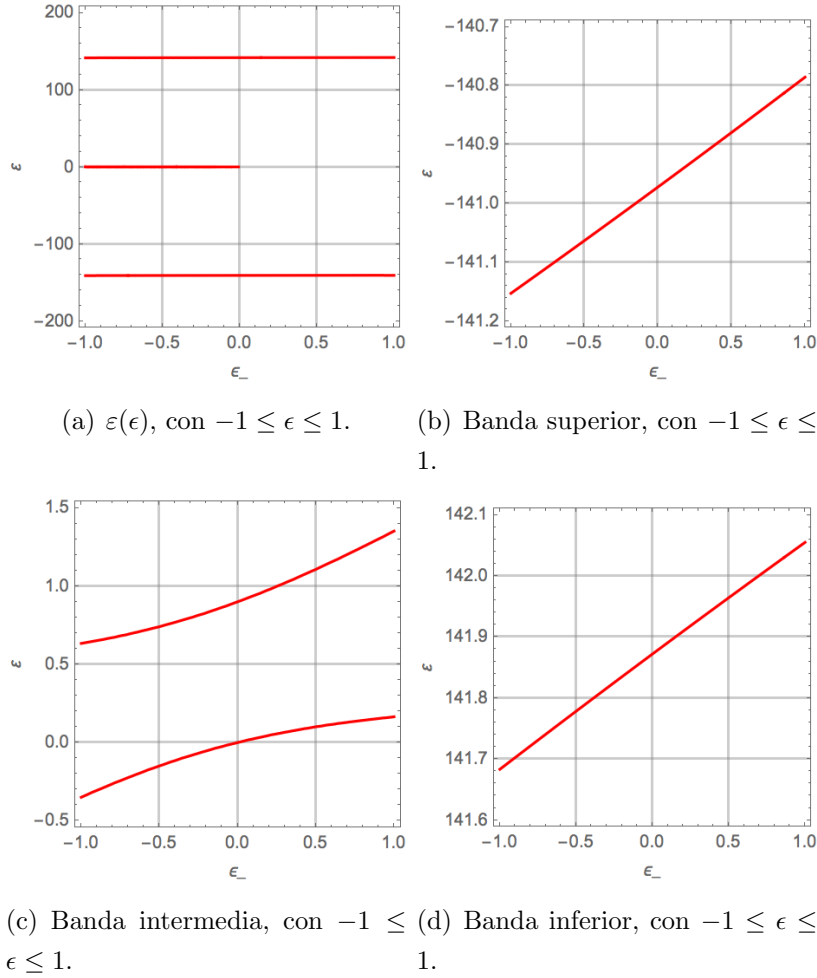


Figura 4.5: Comportamiento del espectro de energía en función de la intensidad del campo eléctrico homogéneo,  $\epsilon$ . Para el caso donde existe el campo homogéneo y campo no homogéneo. Se ha elegido  $\gamma = 0,2$ ,  $A = 100$ ,  $k = 1,8$ ,  $\omega = 95$ .

## 4.2. Función de Onda.

El Hamiltoniano que describe a nuestro sistema, es un Hamiltoniano que depende periódicamente del tiempo; es decir,  $H(t) = H(t + \tau)$ . Por esta razón, para describir la evolución de este sistema usaremos el esquema de Interacción (o de Dirac), en este esquema la función de onda evoluciona entre los tiempos  $t_0 = 0$  y  $t$  como  $\Psi(p, t) = U(t, 0)\Psi(p, 0) = U(t)\varphi(p)$  donde  $\varphi(p)$  son las autofunciones del sistema.

Por otra parte, para asegurar la conservación de la probabilidad, el operador de evolución debe ser unitario y además debe satisfacer la ecuación diferencial

$$\frac{\partial U(t)}{\partial t} = -iH(t)U(t), \quad U(0) = \mathbb{I}. \quad (4.31)$$

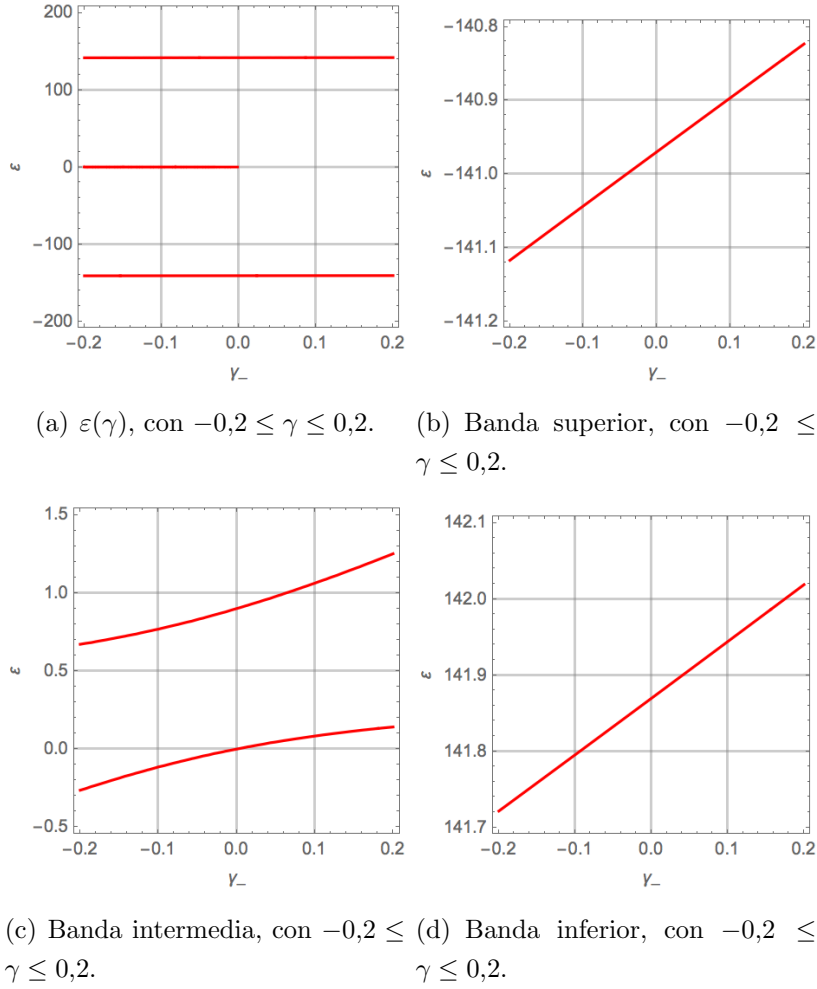


Figura 4.6: Comportamiento del espectro de energía en función de la intensidad del campo eléctrico no homogéneo,  $\gamma$ . Se ha elegido  $\epsilon = 0,8$ ,  $A = 100$ ,  $k = 1,8$ ,  $\omega = 95$ .

Esta forma de ecuación diferencial es conocida como la ecuación diferencial de Hill, la cual tiene como solución la solución de Floquet, según el teorema de Floquet. Por lo tanto, tenemos que el operador de evolución puede ser escrito en función de la solución de Floquet

$$U(t) = e^{-iGt} P(t), \quad P(0) = \mathbb{I}. \quad (4.32)$$

Así, la función de onda para un Hamiltoniano periódico en el tiempo puede escribirse de la siguiente manera

$$\Psi(p, t) = e^{-iGt} P(t) \varphi(p) = e^{-iEt} P(t) \varphi(p) \quad (4.33)$$

donde  $P(t)$  es el operador de micromovimiento,  $E$  y  $\varphi(p)$  son respectivamente el espectro de energía y las autofunciones asociada al Hamiltoniano efectivo  $G$ .

Por otra parte, de la ecuación 4.34, tenemos que el operador de micromovimiento para el Hamiltoniano del sistema es

$$P(t) = 1 - i \frac{V_2(x)}{\omega} \sin(\omega t) + \frac{4A}{\omega^2} [\cos(ap), V_2(x)] \sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right) - \frac{V_2^2(x)}{2\omega^2} \sin^2(\omega t)$$

donde

$$V_2(x) = \left( \epsilon x - \frac{\gamma}{3} x^3 \right) ,$$

donde el conmutador  $[\cos(ap), V_2(x)]$  en la representación de los momentos es

$$[\cos(ap), V_2(x)] = ia \left( \left( \epsilon x - \frac{\gamma}{3} x^3 \right) \sin(ap) \frac{\partial}{\partial p} + \gamma \sin(ap) \frac{\partial^2}{\partial p^2} \right)$$

Sustituyendo el conmutador en el operador de micromovimiento y agrupando, obtenemos que *operador de micromovimiento* en la representación de los momentos es

$$\begin{aligned} P(t) = & \left( 1 + \frac{4iAa}{\omega^2} \left( \epsilon - \frac{\gamma a^2}{3} \right) \sin(ap) \sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right) \right) \\ & + \left( \frac{\epsilon}{\omega} \sin(\omega t) + \frac{4iAa^2\gamma}{\omega^2} \cos(ap) \sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right) \right) \frac{\partial}{\partial p} \\ & + \left( \frac{4iAa^2\gamma}{\omega^2} \cos(ap) \sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right) + \frac{\epsilon^2}{2\omega} \sin^2(\omega t) \right) \frac{\partial^2}{\partial p^2} \\ & + \left( \frac{\gamma}{3\omega} \sin(\omega t) \right) \frac{\partial^3}{\partial p^3} + \left( \frac{\gamma\epsilon}{3\omega^2} \sin^2(\omega t) \right) \frac{\partial^4}{\partial p^4} \end{aligned} \tag{4.34}$$

Como se puede notar de (4.34),  $P(t)$  es una función periódica con período  $\tau = \frac{2\pi}{\omega}$ , donde  $\omega$  es la frecuencia con la cual oscila el campo eléctrico, para la cual  $\omega \gg \omega_0$ ;  $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$  es la frecuencia natural del sistema, donde  $m$ , la masa efectiva del electron en la red, viene dada por  $m = \frac{1}{2Aa^2}$  [3]. Debido a que el tiempo con el cual responde, el cual está dado por el operador de micromovimiento, es el período de la forzadora,  $\tau$ ; es decir, el tiempo de respuesta es más pequeño que el tiempo característico del sistema,  $\tau_0$ ; decimos que nuestro sistema es no adiabático. Es decir, que al sistema no le da chance de llegar al estado de equilibrio, por lo que se ve obligado a ir de un estado de no equilibrio a otro estado de no equilibrio.

La acción del operador de micromovimiento sobre  $\varphi(p)$ , considerando sólo términos de  $\frac{1}{\omega}$  a orden 2, es

---

$$\begin{aligned}
P(t)\varphi_\nu(p) = & e^{\frac{Aa^2\gamma\epsilon}{k\omega^2} \cos(ap)} e^{-\frac{2iAa}{k\omega^2} (k\epsilon \sin(ap) - A\gamma(\sin(2ap) - 2ap))} \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n^\nu e^{ia(n+\nu)p} \left( 1 + \right. \\
& + \left. \left( \frac{4iAa}{\omega^2} \left( \epsilon - \frac{\gamma a^2}{3} (3(n+\nu)^2 + 1) \right) \sin(ap) - \frac{4Aa^3\gamma}{\omega^2} (n+\nu) \cos(ap) \right) \right. \\
& \sin^2 \left( \frac{\omega t}{2} \right) + \frac{ia(n+\nu)}{\omega} \left( \epsilon - \frac{\gamma a^2}{3} (n+\nu)^2 \right) \sin(\omega t) + \\
& \left. + \frac{\epsilon a^2}{2\omega^2} (n+\nu)^2 \left( \frac{2\gamma a^2}{3} (n+\nu)^2 - \epsilon \right) \sin^2(\omega t) \right)
\end{aligned}$$

Finalmente, obtenemos que *la función de onda* para el oscilador armónico cuántico en la red en presencia de un campo eléctrico no homogéneo y rápidamente oscilante en el tiempo es

$$\begin{aligned}
\Psi_\nu(p, t) = & e^{-iEt} e^{\frac{Aa^2\gamma\epsilon}{k\omega^2} \cos(ap)} e^{-\frac{2iAa}{k\omega^2} (k\epsilon \sin(ap) - A\gamma(\sin(2ap) - 2ap))} \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n^\nu e^{ia(n+\nu)p} \left( 1 + \right. \\
& + \left. \left( \frac{4iAa}{\omega^2} \left( \epsilon - \frac{\gamma a^2}{3} (3(n+\nu)^2 + 1) \right) \sin(ap) - \frac{4Aa^3\gamma}{\omega^2} (n+\nu) \cos(ap) \right) \right. \\
& \sin^2 \left( \frac{\omega t}{2} \right) + \frac{ia(n+\nu)}{\omega} \left( \epsilon - \frac{\gamma a^2}{3} (n+\nu)^2 \right) \sin(\omega t) + \\
& \left. + \frac{\epsilon a^2}{2\omega^2} (n+\nu)^2 \left( \frac{2\gamma a^2}{3} (n+\nu)^2 - \epsilon \right) \sin^2(\omega t) \right)
\end{aligned} \tag{4.35}$$

### 4.3. Densidad de probabilidad y valores medios.

En esta sección, estudiaremos el comportamiento de los electrones por medio de la densidad de probabilidad y que trayectoria sigue los electrones por medio del valor medio. Los cálculos en esta sección se hacen de forma numérica, haciendo uso del lenguaje de programación *Python*.

### 4.3.1. Densidades de probabilidad

Debido a que estamos trabajando en la representación de los momentos, comenzaremos por estudiar la densidad de probabilidad en función del momento,  $\rho(p, t)$ . La densidad de probabilidad,  $\rho(p, t)$ , es la probabilidad de encontrar a una partícula en cierta región del espacio de los momentos en un determinado tiempo  $t$ . En la representación de los momentos tenemos que la densidad de probabilidad viene dada por

$$\rho(p, t) = \Psi_\nu^*(p, t)\Psi_\nu(p, t) \quad (4.36)$$

donde  $\Psi_\nu^*(p, t)$  es el conjugado de la función de onda, la cual viene dada por

$$\begin{aligned} \Psi_\nu^*(p, t) = & e^{iEt} e^{\frac{Aa^2\gamma\epsilon}{k\omega^2} \cos(ap)} e^{\frac{2iAa}{k\omega^2} (k\epsilon \sin(ap) - A\gamma(\sin(2ap) - 2ap))} \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n^\nu e^{-ia(n+\nu)p} \left( 1 + \right. \\ & - \left. \left( \frac{4iAa}{\omega^2} \left( \epsilon - \frac{\gamma a^2}{3} (3(n+\nu)^2 + 1) \right) \sin(ap) - \frac{4Aa^3\gamma}{\omega^2} (n+\nu) \cos(ap) \right) \right) \\ & \sin^2 \left( \frac{\omega t}{2} \right) - \frac{ia(n+\nu)}{\omega} \left( \epsilon - \frac{\gamma a^2}{3} (n+\nu)^2 \right) \sin(\omega t) + \\ & \left. + \frac{\epsilon a^2}{2\omega^2} (n+\nu)^2 \left( \frac{2\gamma a^2}{3} (n+\nu)^2 - \epsilon \right) \sin^2(\omega t) \right). \end{aligned} \quad (4.37)$$

Por otro lado, para observar el comportamiento de la densidad de probabilidad  $\rho(p, t)$ , hacemos un análisis numérico partiendo de la ecuación (4.36). Comenzamos por graficar  $\rho(p, t)$  en función de  $p$  dejando  $t$  fijo; donde  $p$  pertenece a la primera zona de Brillouin, es decir,  $p \in (-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$ . Los  $t$  que fijaremos son  $t = 0$ ,  $t = \tau_0$ , siendo  $\tau_0 = \frac{\pi}{a} \sqrt{\frac{2}{kA}}$  el período natural del oscilador armónico cuántico en la red,  $t = \tau$ , donde  $\tau = \frac{2\pi}{\omega}$  es el período de la forzadora, y  $t = \tau_B$ , donde  $\tau_B = \frac{2\pi}{\epsilon a}$  es el período de Bloch. La gráfica de  $\rho(p, t)$  en función de  $p$  dejando  $t$  fijo se presenta en la Figura 4.7. También estudiamos el comportamiento que sigue la densidad de probabilidad en función del momento en la Figura 4.8.

De las Figuras 4.7 y 4.8, podemos deducir que el período al cual responde el sistema es el período de la forzadora,  $\tau$ . De esta manera comprobamos que nuestro sistema es no adiabático, tal como se observo con el operador de micromovimiento.

---

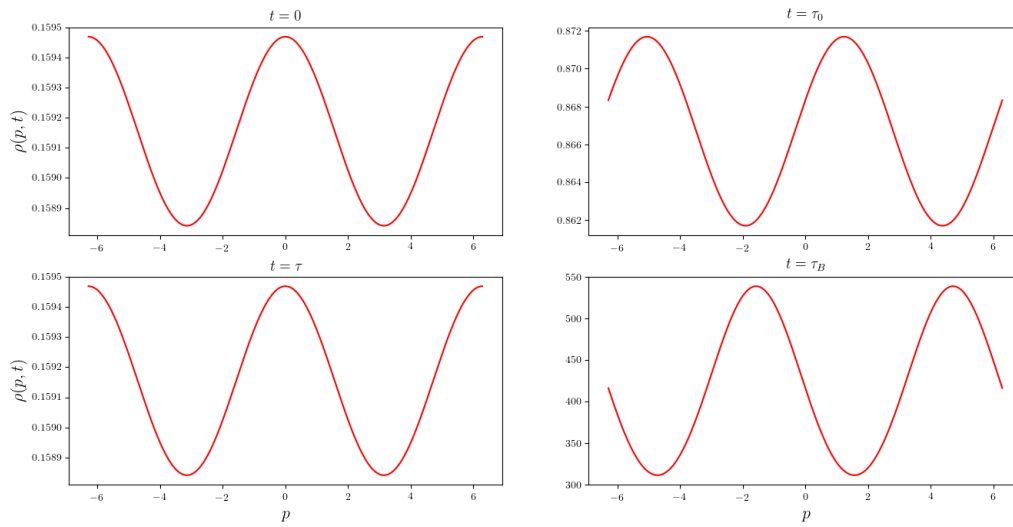


Figura 4.7: Densidad de probabilidad en función del momento, para diversos valores fijos de  $t$ . Se ha elegido  $\gamma = 0,2$  ,  $\epsilon = 0,8$  ,  $A = 100$  ,  $k = 1,8$  ,  $\omega = 95$  y  $E = 0,1401$ .

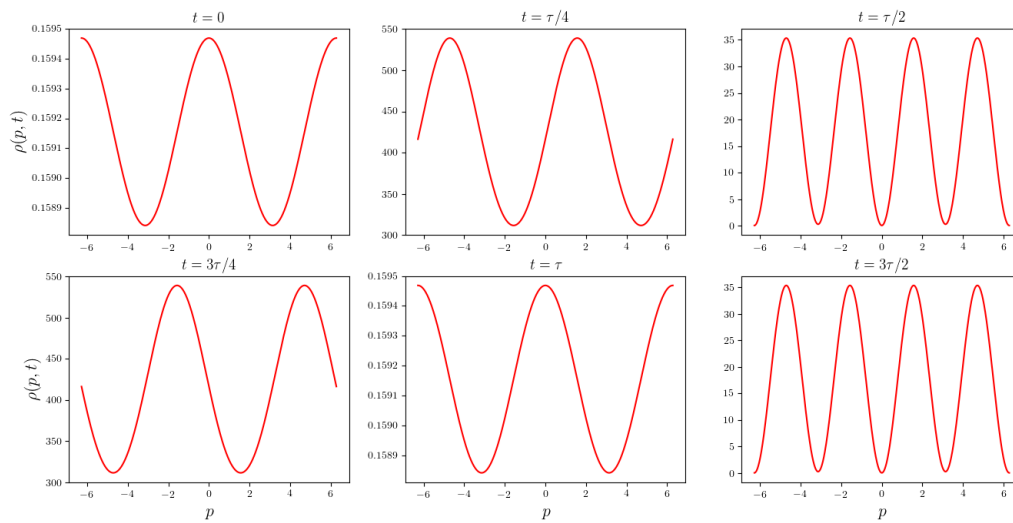


Figura 4.8: Comportamiento de la densidad de probabilidad en función del momento. Se ha elegido  $\gamma = 0,2$  ,  $\epsilon = 0,8$  ,  $A = 100$  ,  $k = 1,8$  ,  $\omega = 95$  y  $E = 0,1401$ .

Luego, graficamos  $\rho(p, t)$  en función de  $t$  dejando  $p$  fijo; donde  $t \in (0, \tau)$ . Los  $p$  que fijamos son  $p = -\frac{\pi}{3a}$  ,  $p = 0$  y  $p = \frac{\pi}{3a}$ . La gráfica de  $\rho(p, t)$  en función de  $t$  dejando  $p$  fijo se presenta en la Figura 4.9.

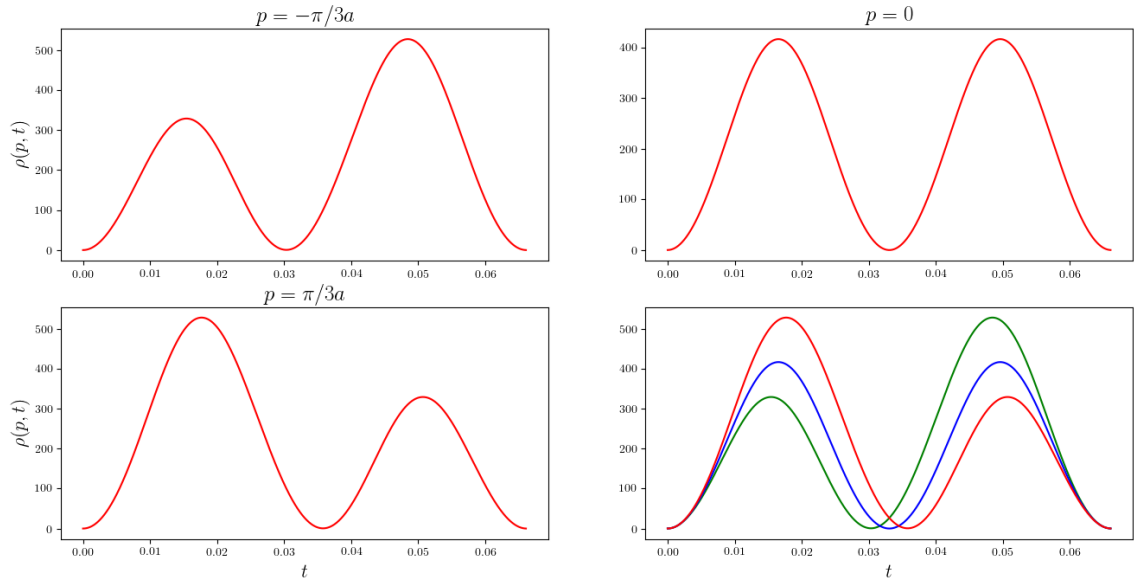


Figura 4.9: Comportamiento de la densidad de probabilidad en función del tiempo. Se ha elegido  $\gamma = 0,2$  ,  $\epsilon = 0,8$  ,  $A = 100$  ,  $k = 1,8$  ,  $\omega = 95$  y  $E = 0,1401$ .

De la Figura 4.9, observamos que la densidad de probabilidad es temporalmente asimétrica respecto al momento.

Por otra parte, tenemos que la densidad de probabilidad,  $\rho(x, t)$ , es la probabilidad de encontrar a una partícula en cierta región del espacio en un determinado tiempo  $t$ . En la representación de las coordenadas tenemos que la densidad de probabilidad viene dada por

$$\rho(x, t) = \Phi_{\nu}^{*}(x, t)\Phi_{\nu}(x, t) \quad (4.38)$$

donde  $\Phi_{\nu}(x, t)$  es la transformada de Fourier de  $\Psi_{\nu}(p, t)$ , esto es

$$\Phi_{\nu}(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dp e^{ipx} \Psi_{\nu}(p, t), \quad (4.39)$$

en consecuencia, tenemos que su conjugado es

$$\Phi_{\nu}^{*}(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dp e^{ipx} \Psi_{\nu}^{*}(p, t).$$


---

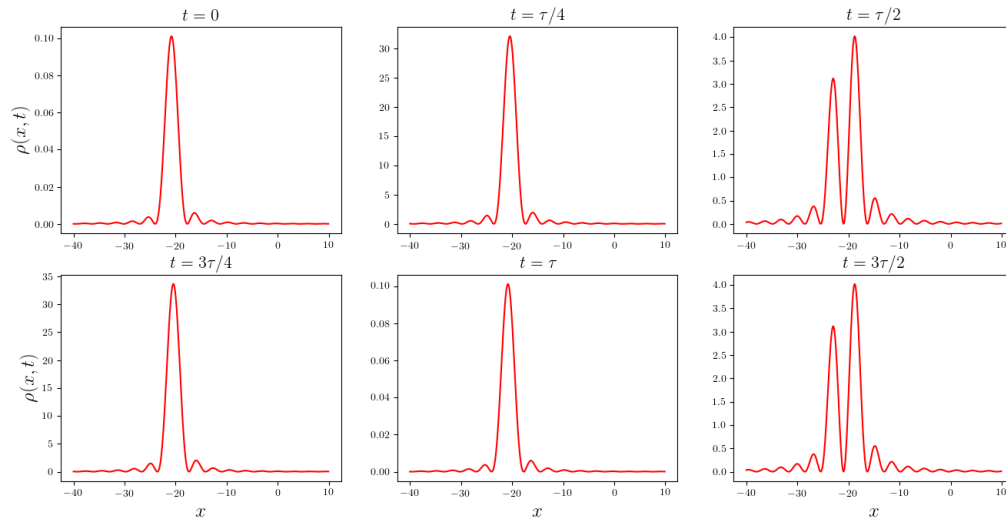


Figura 4.10: Comportamiento de la densidad de probabilidad en función de la posición. Se ha elegido  $\gamma = 0,2$ ,  $\epsilon = 0,8$ ,  $A = 100$ ,  $k = 1,8$ ,  $\omega = 95$  y  $E = 0,1401$ .

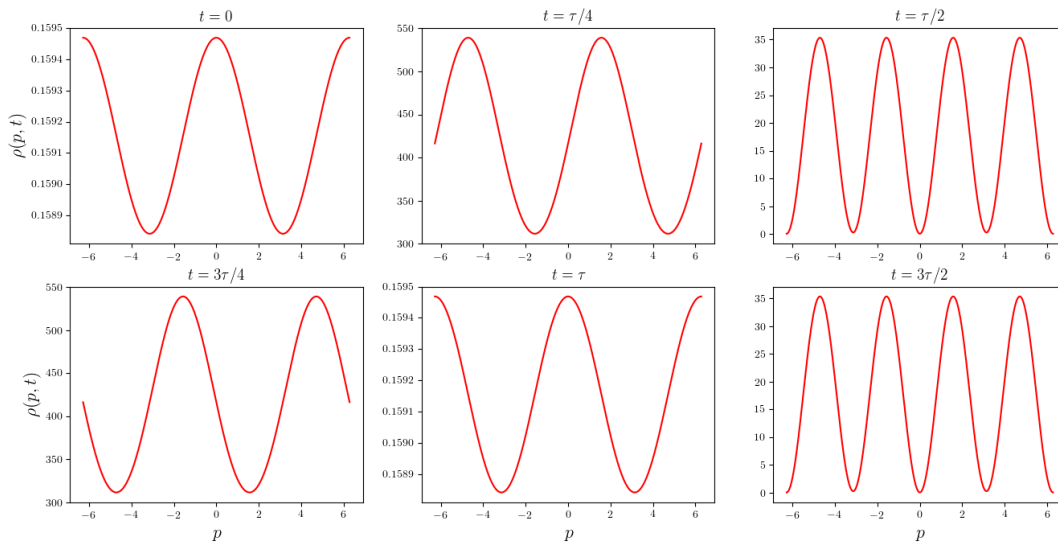
Partiendo de la ecuación (4.38), graficamos la densidad de probabilidad en función de la posición, para  $x \in (-40, 10)$  (unidades de distancia), dejando  $t$  fijo.

De la Figura 4.10, podemos observar que la partícula tiene mayor probabilidad de encontrarse en la región  $(-30, -20)$  (unidades de distancia) y en el caso del tiempo  $t = \tau/2$  y  $t = 3\tau/2$ , la partícula tiene dos sitios fuertemente probables de donde encontrarse, siendo uno más probable que otro. También, deducimos por la variación de la amplitud de la densidad de probabilidad que a medida que aumentamos el tiempo, la partícula se desplaza de forma oscilatoria, con período  $\tau$ ; este desplazamiento es debido al campo eléctrico no homogéneo y rápidamente oscilante en el tiempo.

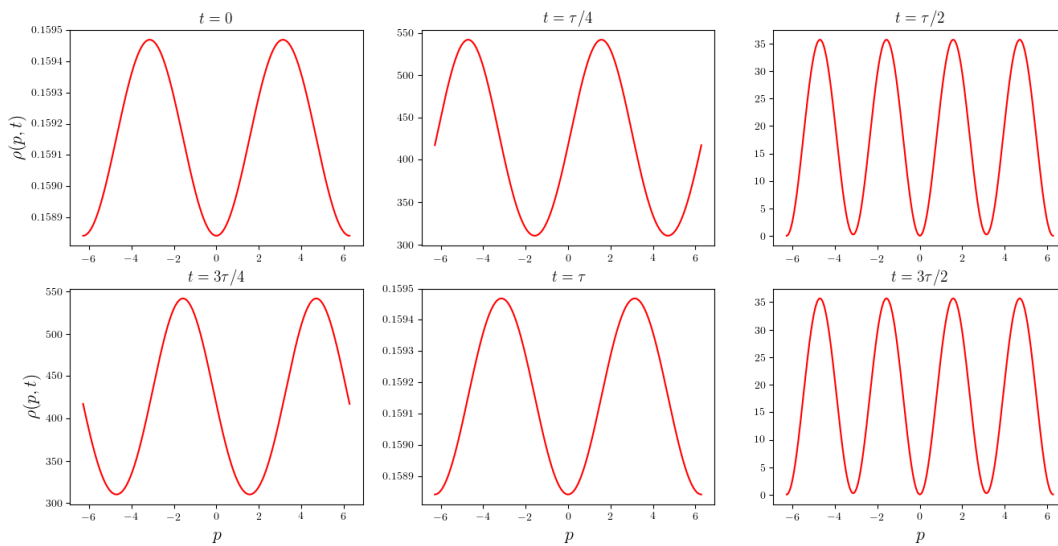
Ahora bien, estudiaremos cómo responde la densidad de probabilidad al variar el signo de la intensidad del campo eléctrico homogéneo.

De la Figura 4.11, observamos como se comporta la densidad de probabilidad en función del momento al variar el signo de la intensidad de la parte homogénea del campo eléctrico,  $\epsilon$ . Para  $\epsilon$  positivo la amplitud de la densidad de probabilidad es mayor que para  $\epsilon$  negativo, también se puede ver que para  $\epsilon$  positivo, el máximo de amplitud de la densidad de probabilidad con respecto al momento para un período  $\tau$ , es el mínimo de amplitud de la densidad de probabilidad con respecto al momento cuando  $\epsilon$  es negativo; es decir, que





(a)  $\epsilon = 0,8$  y  $E = 0,1401$



(b)  $\epsilon = -0,8$  y  $E = -0,264012$

Figura 4.11: Comportamiento de la densidad de probabilidad versus del momento al variar el signo de  $\epsilon$ . Se ha elegido  $\gamma = 0,2$ ,  $A = 100$ ,  $k = 1,8$  y  $\omega = 95$ .

al cambiar el signo de  $\epsilon$  se produce un desfase de  $\pm\pi$  de la densidad de probabilidad en función del momento para un período  $n\tau$  (con  $n \in \mathbb{Z}$ ).

En la Figura 4.12, observamos que la variación del signo de la intensidad de la parte

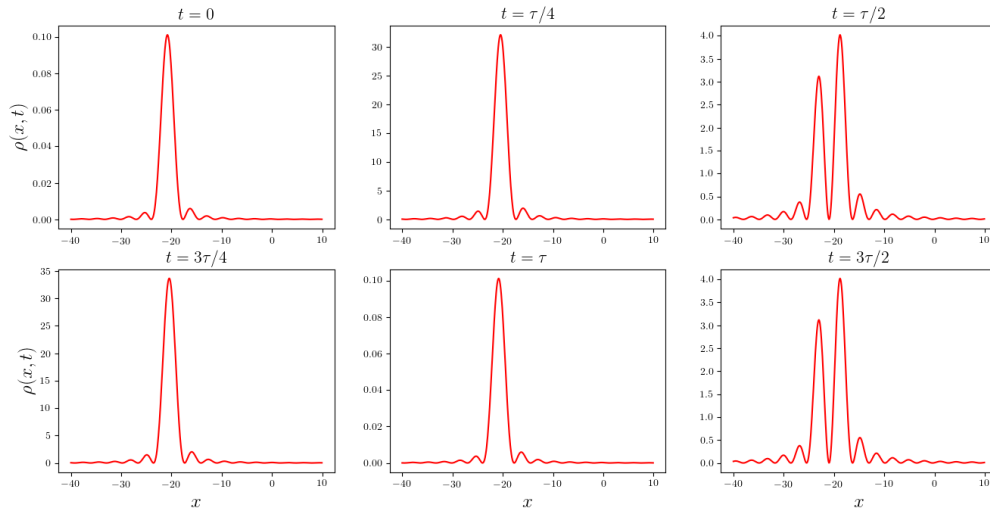
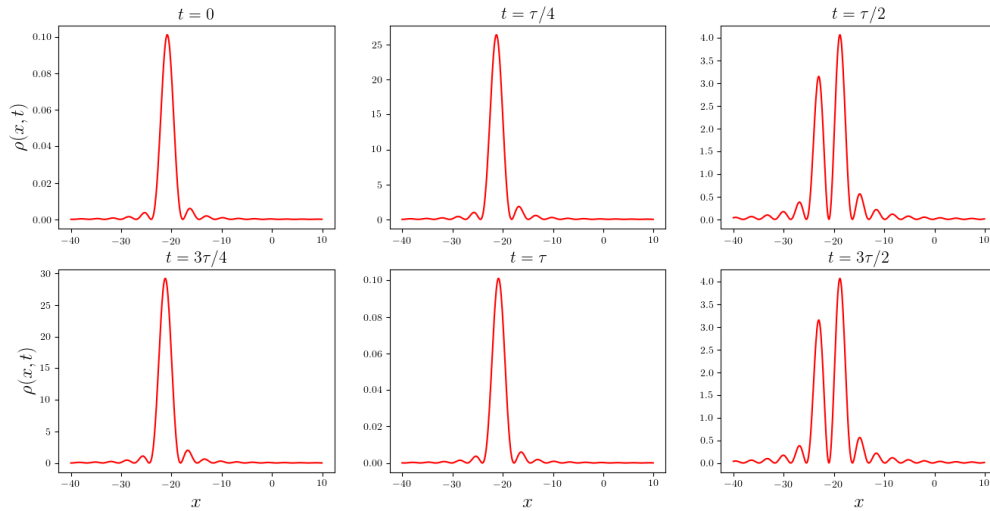
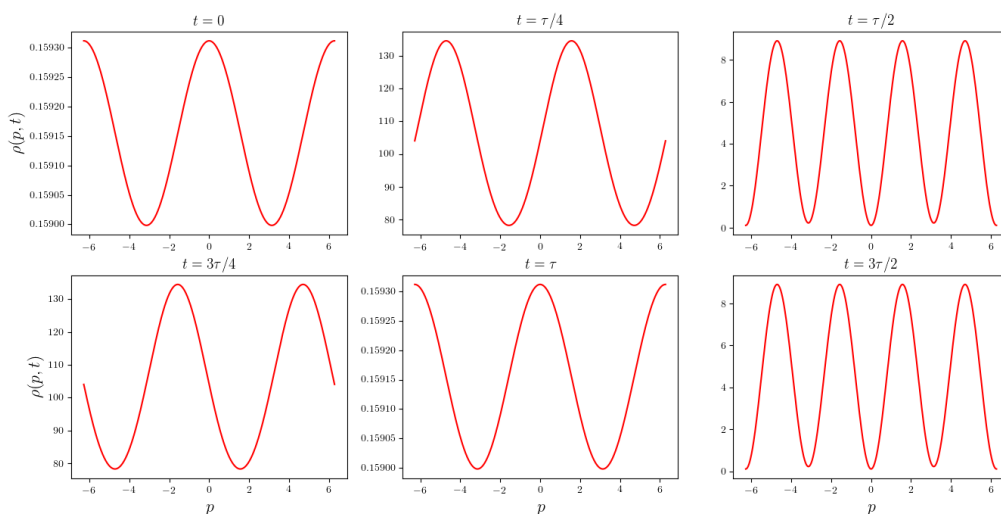
(a)  $\epsilon = 0,8$  y  $E = 0,1401$ (b)  $\epsilon = -0,8$  y  $E = -0,264012$ 

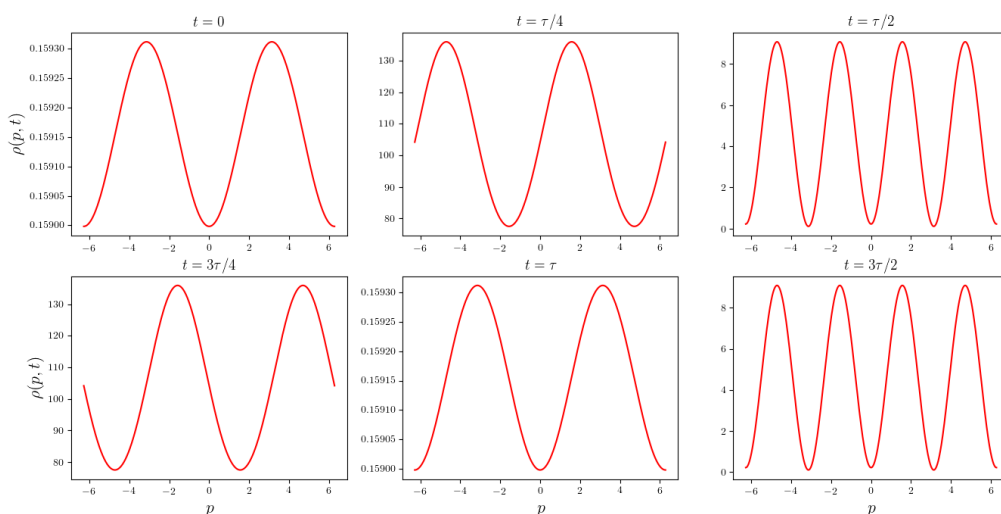
Figura 4.12: Comportamiento de la densidad de probabilidad en función de la posición al variar el signo de  $\epsilon$ . Se ha elegido  $\gamma = 0,2$ ,  $A = 100$ ,  $k = 1,8$  y  $\omega = 95$ .

homogénea del campo eléctrico no produce ningún efecto sobre la densidad de probabilidad en función de la posición.

Por otra parte, cuando variamos el signo de la intensidad de la parte no homogénea del campo eléctrico observamos que la amplitud de la densidad de probabilidad es la misma



(a)  $\gamma = 0,1$  y  $E = 0,0834$



(b)  $\gamma = -0,1$  y  $E = -0,1153$

Figura 4.13: Comportamiento de la densidad de probabilidad en función del momento al variar el signo de  $\gamma$ . Se ha elegido  $\epsilon = 0,8$ ,  $A = 100$ ,  $k = 1,8$  y  $\omega = 95$ .

cuando  $\gamma$  es positivo o negativo (ver Figura 4.13). También se puede ver que al cambiar el signo de  $\gamma$  se produce un desfase de  $\pm\pi$  de la densidad de probabilidad en función del momento para un período  $n\tau$  (con  $n \in \mathbb{Z}$ ). Por lo que deducimos que la dirección del campo eléctrico la proporciona la variación del signo de  $\epsilon$  y de  $\gamma$ .

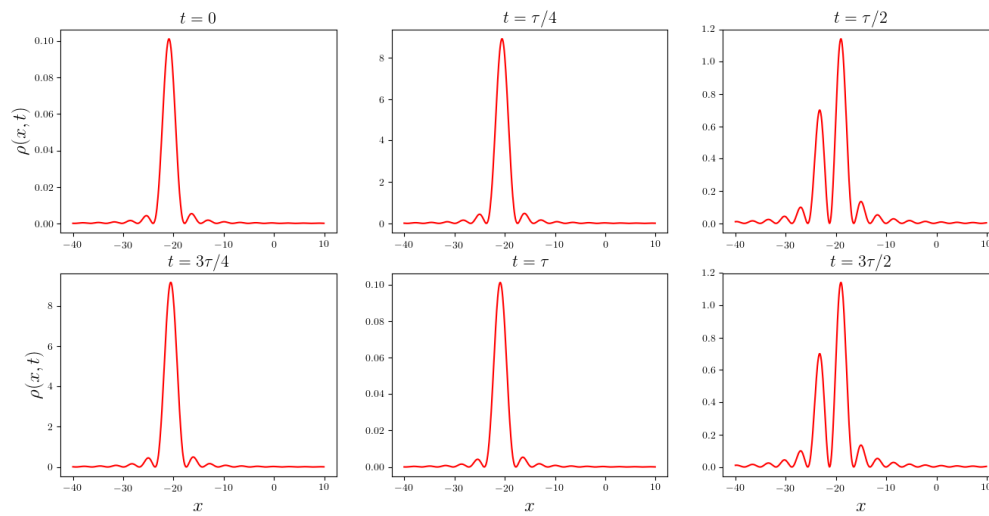
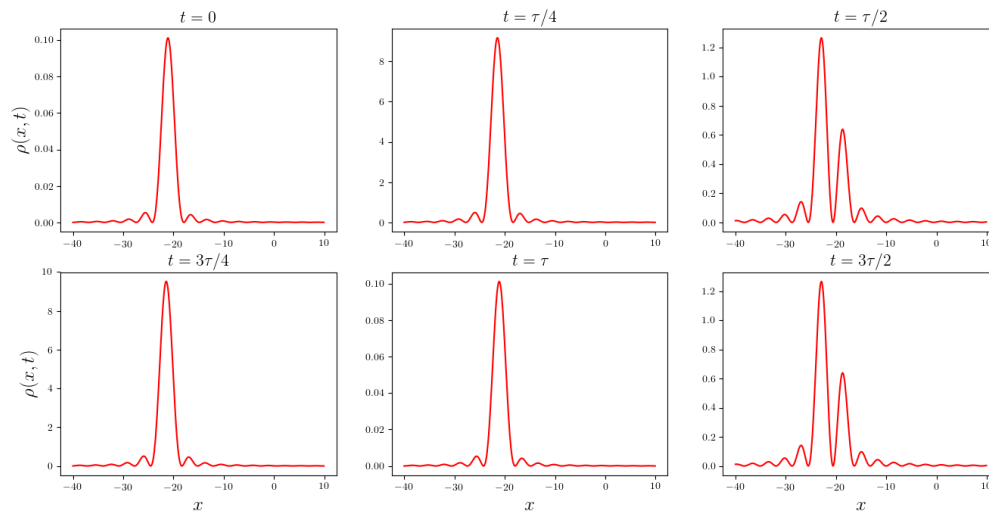
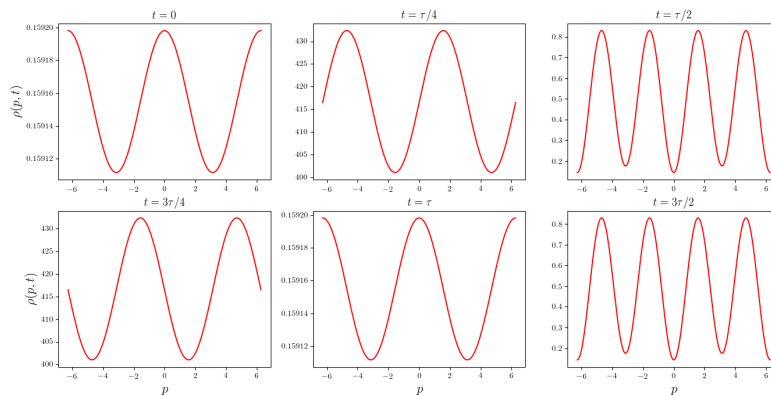
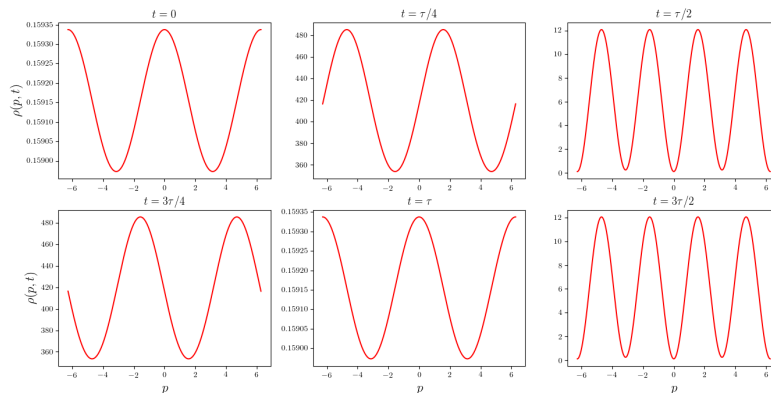
(a)  $\gamma = 0,1$  y  $E = 0,0834$ (b)  $\gamma = -0,1$  y  $E = -0,1153$ 

Figura 4.14: Comportamiento de la densidad de probabilidad en función de la posición al variar el signo de  $\gamma$ . Se ha elegido  $\epsilon = 0,8$ ,  $A = 100$ ,  $k = 1,8$  y  $\omega = 95$ .

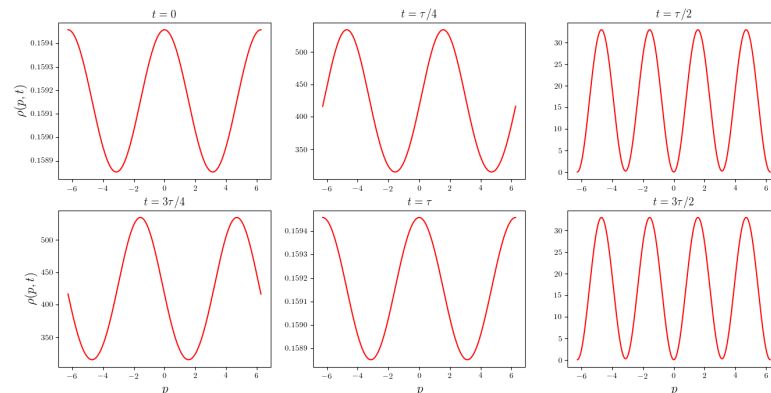
De las Figuras en 4.14, observamos que al cambiar el signo de la intensidad de la parte no homogénea del campo eléctrico se produce un pequeño cambio en la amplitud de la densidad de probabilidad. También observamos un cambio de dirección en el desplazamiento de la partícula, ya que cuando  $\gamma$  es positivo la partícula se desplaza hacia la derecha y cuando  $\gamma$  es negativo la partícula se desplaza a la izquierda. Por esto deducimos que la di-



(a)  $A = 13,80$  y  $E = 0,0124$



(b)  $A = 59,23$  y  $E = 1,191$



(c)  $A = 96,65$  y  $E = 0,1401$

Figura 4.15: Comportamiento de la densidad de probabilidad en función del momento al variar  $A$  y  $E$ . Se ha elegido  $\epsilon = 0,8$ ,  $\gamma = 0,2$ ,  $k = 1,8$  y  $\omega = 95$ .

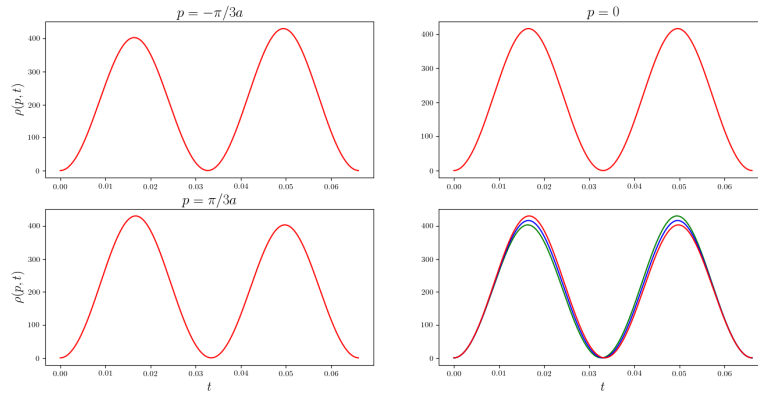
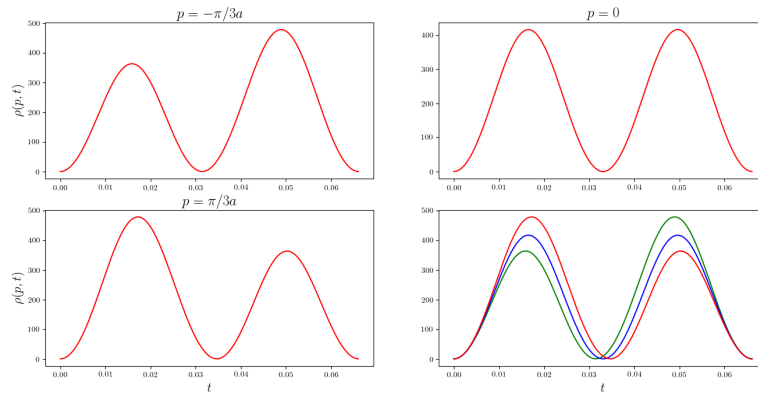
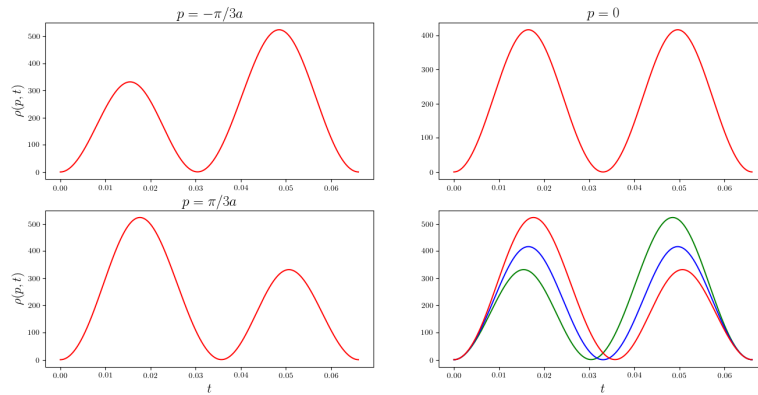
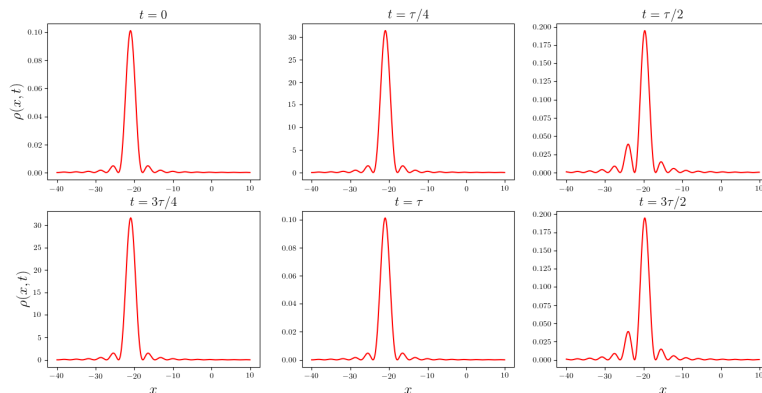
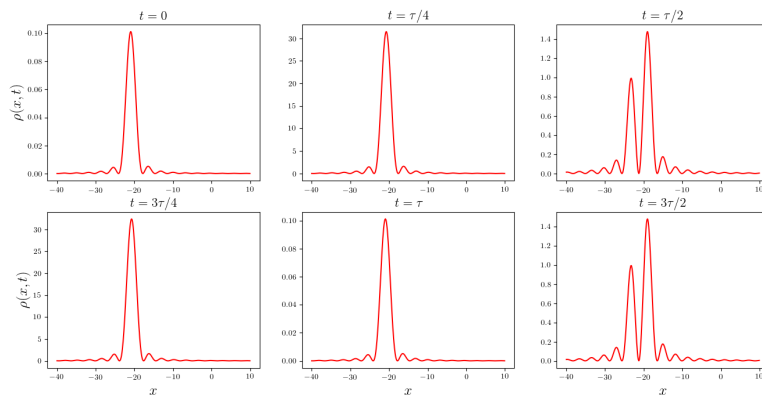
(a)  $A = 13,80$  y  $E = 0,0124$ (b)  $A = 58,18$  y  $E = 0,0762$ (c)  $A = 96,65$  y  $E = 0,1401$ 

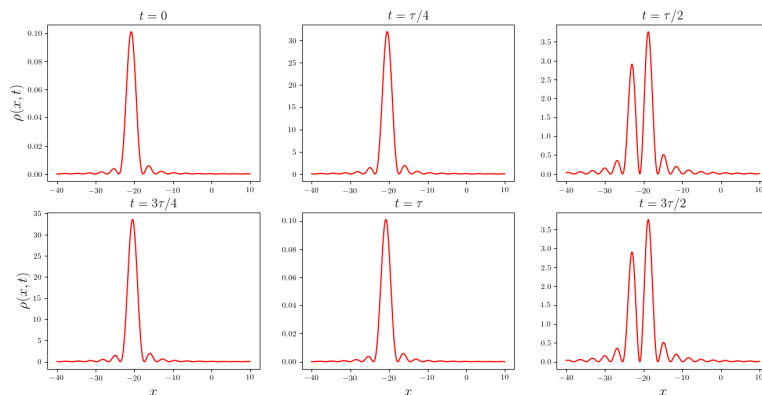
Figura 4.16: Comportamiento de la densidad de probabilidad en función del tiempo al variar  $A$  y  $E$ . Se ha elegido  $\epsilon = 0,8$ ,  $\gamma = 0,2$ ,  $k = 1,8$  y  $\omega = 95$ .



(a)  $A = 13,80$  y  $E = 0,0124$



(b)  $A = 58,18$  y  $E = 0,0762$



(c)  $A = 96,65$  y  $E = 0,1401$

Figura 4.17: Comportamiento de la densidad de probabilidad en función de la posición al variar  $A$  y  $E$ . Se ha elegido  $\epsilon = 0,8$  ,  $\gamma = 0,2$  ,  $k = 1,8$  y  $\omega = 95$ .

rección del movimiento de la partícula en el espacio la proporciona el cambio de signo de  $\gamma$ .

Al estudiar la densidad de probabilidad en función del tiempo, no observamos ningún efecto al variar el signo de las intensidades  $\epsilon$  y  $\gamma$ .

Por otro lado, estudiamos como se comporta la densidad de probabilidad cuando variamos el parámetro de energía cinética  $A$  y los valores de energía en una banda de energía.

De la secuencia de las Figuras en 4.15, observamos que a medida que le inyectamos energía al sistema, la amplitud de la densidad de probabilidad aumenta grandemente. Por otra parte, tenemos que al estudiar el comportamiento de la densidad de probabilidad en función del tiempo, observamos que la asimetría temporal de la densidad de probabilidad con respecto al momento se acentúa a medida que  $A$  y  $E$  aumentan.

Por otra parte, de la Figura 4.17, observamos que para  $A$  pequeña la partícula tiene sólo un sitio fuertemente probable donde encontrarse, a medida que aumentamos el parámetro  $A$ , la partícula pasa a tener dos sitios fuertemente probables donde encontrarse, siendo uno más probable que otro.

### 4.3.2. Valores Medios

Una de las predicciones más importante que se obtiene a partir del Hamiltoniano de tight-binding es *el fenómeno de localización dinámica*. Cuando el desplazamiento cuadrático medio permanece acotado a medida que el tiempo transcurre, se dice que la partícula o paquete de ondas está localizado [43]. Las condiciones para que esto ocurra depende de la forma particular que tenga el campo eléctrico presente en el sistema.

Por otro lado, estudiamos el valor medio de los observable  $X$  y  $P$ , con la intención de observar el comportamiento oscilatorio de los valores medios de dichos observables, así como indagar si el sistema exhibe localización dinámica.

De la Figura 4.18, observamos que la partícula eventualmente está oscilando entre dos puntos de la red, tal como se observa en la densidad de probabilidad en función de la posición. Además, se puede apreciar que el movimiento que sigue la partícula es periódico con período  $\tau$ , la partícula mantiene este movimiento entre las dos oscilaciones superpuestas. Otra observación de suma importancia, es que el movimiento de la partícula se mantiene



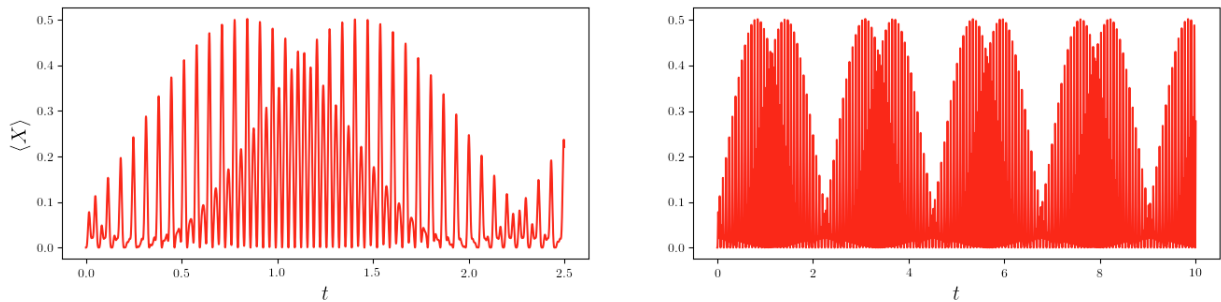
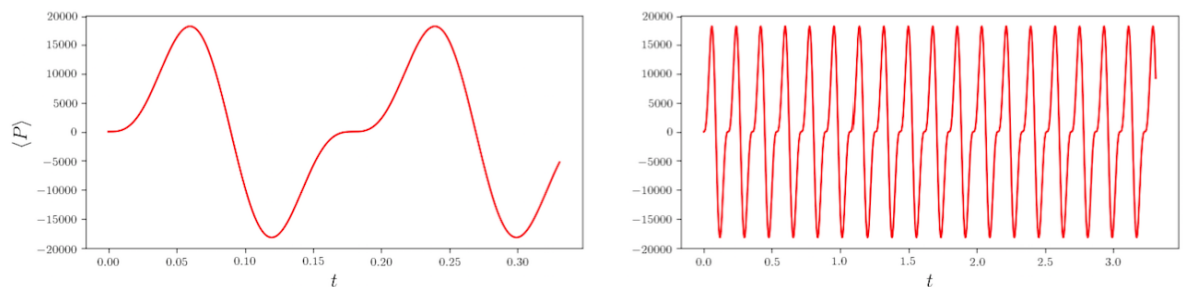
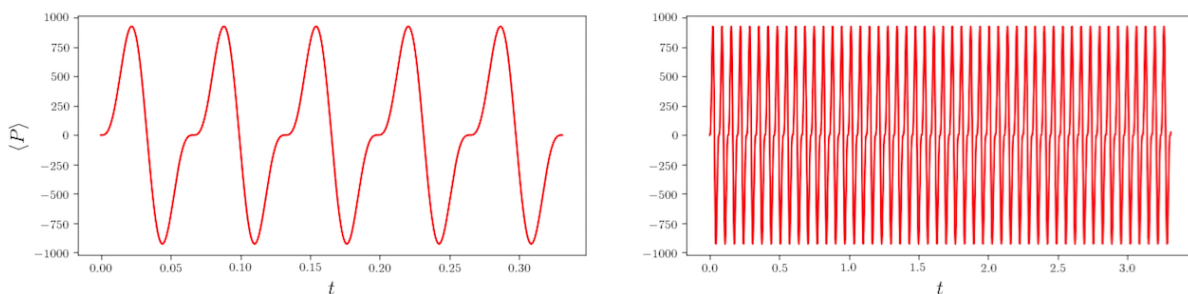


Figura 4.18: El Valor Medio de  $X$  en función del tiempo. Se ha elegido  $\gamma = 0,2$  ,  $\epsilon = 0,8$  ,  $A = 100$ ,  $k = 1,8$  ,  $\omega = 95$  y  $E = 0,1401$

acotado en el tiempo; es decir, hay localización dinámica. Por esta razón, podemos deducir que los términos perturbativos no afectan la localización dinámica, pese a su dependencia con la posición y a la alta frecuencia.



(a)  $\omega = 35$



(b)  $\omega = 95$

Figura 4.19: El valor medio de  $P$  en función del tiempo. Se ha elegido  $\gamma = 0,2$  ,  $\epsilon = 0,8$  ,  $A = 100$ ,  $k = 1,8$  ,  $\omega = 95$  y  $E = 0,1401$

El comportamiento del valor medio de  $P$ , es oscilatorio y acotado al igual que en el caso anterior. De la Figura 4.19, observamos como cambia el período de  $\langle P \rangle$  a medida que aumentamos la frecuencia de la forzadora, de la secuencia de figuras, observamos que a medida que aumentamos  $\omega$ , aumenta la frecuencia de la respuesta del sistema. Esto se observa mejor en la Figura 4.20, donde graficamos el período al cual responde el sistema a medida que variamos  $\tau = 2\pi/\omega$ ; de esta gráfica deducimos que el período al cual responde el sistema, es el período de la forzadora, lo que confirma que el sistema es no adiabático. Dado que  $\tau \ll \tau_B$  no observamos oscilaciones de Bloch.

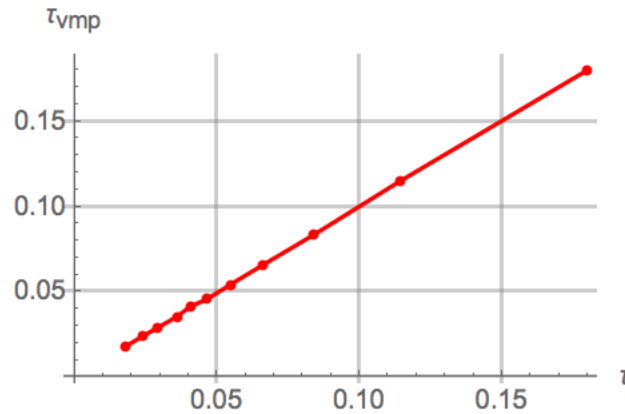


Figura 4.20: El período del valor medio de  $P$  en función de  $\tau$ .

Otro comportamiento de suma importancia que observamos del valor medio de  $P$  en la secuencia de Figuras en 4.19, es que a medida que aumentamos la frecuencia de la forzadora disminuye la amplitud del valor medio de  $P$ . Esto se observa mejor en la Figura 4.21, donde graficamos como varía la amplitud del valor medio de  $P$  a medida que aumentamos  $\omega$ , de esta gráfica deducimos que para  $\omega > 250$  el sistema no responde, y en consecuencia la partícula deja de oscilar.

Como planteamos al inicio de este capítulo, queremos estudiar como el modelo del oscilador armónico cuántico es afectado al estar bajo la acción de un campo eléctrico no homogéneo y rápidamente oscilante en el tiempo.

Al estudiar el Hamiltoniano que describe este sistema por medio del teorema de Floquet, observamos que la alta frecuencia produce una selección de auto-estados del sistema y también produce degeneración, ya que para un valor de energía dado hay  $\nu$  estados posibles. También observamos que la no homogeneidad del campo eléctrico produce la

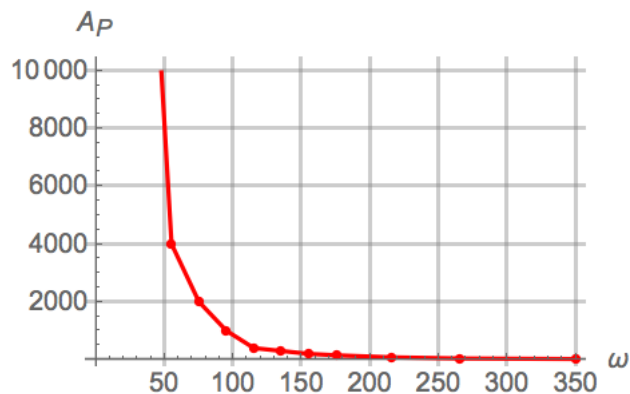


Figura 4.21: La amplitud del valor medio de  $P$  en función de  $\omega$ .

aparición de dos nuevos estados.

Por otro lado, al estudiar el operador de micromovimiento deducimos que nuestro sistema es no adiabático, debido a que la evolución del sistema no es unitaria. Esto también se observa por medio del tiempo de repuesta del sistema, el período de la forzadora, ya que este es mucho menor al tiempo característico de sistema, cuando pasa esto decimos que el sistema es no adiabático.

Al estudiar la densidad de probabilidad, observamos que esta es asimétrica temporalmente respecto al momento. También deducimos que la dirección del campo eléctrico no homogéneo y rápidamente oscilante en el tiempo la proporciona el signo de  $\epsilon$  y  $\gamma$ ; y la dirección del movimiento de la partícula en el espacio la proporciona el signo de  $\gamma$ . Además, deducimos que el período con el cual responde el sistema es el período de la forzadora. Al estudiar la densidad de probabilidad en función de la posición observamos que la partícula tiene mayor probabilidad de encontrarse en la región  $(-30, -20)$  (unidades de distancia) y en el caso de  $t = \frac{(2n-1)\tau}{2}$  la partícula tiene dos sitios fuertemente probables donde encontrarse. También deducimos mediante la amplitud de la densidad de probabilidad, que a medida que aumentamos el tiempo la partícula se desplaza de forma oscilatoria, con período  $\tau$ ; este desplazamiento se debe al campo eléctrico no homogéneo y rápidamente oscilante en el tiempo. Este comportamiento se confirma con el valor medio de  $X$ , como se ve en la Figura 4.18. En esta gráfica observamos que la partícula eventualmente se encuentra oscilando entre dos puntos de la red, siendo uno más probable que otro. También observamos que el movimiento de la partícula se mantiene acotado en el tiempo, por lo que deducimos que hay localización dinámica, a pesar de que el Hamiltoniano del sistema

depende de la posición y está sometido a altas frecuencias.

Otra observación de suma importancia, es que a medida que aumentamos la frecuencia de la forzadora disminuye la amplitud del valor medio de  $P$ , por lo que se deduce que hay un umbral en la frecuencia para el cual el sistema no responde.

---



## CONCLUSIONES.

- En el Capítulo 4, presentamos un estudio exhaustivo sobre la dinámica que sigue el sistema oscilador armónico cuántico en una red unidimensional en presencia de un campo eléctrico no homogéneo y rápidamente oscilante en el tiempo. Primero, hallamos las soluciones del Hamiltoniano que describe el sistema mediante la teoría de Floquet, donde deducimos que a altas frecuencias la constante de hopping (salto) deja de ser una constante, y pasa a ser una función que depende de la posición y del momento de la partícula, debido a la presencia de la alta frecuencia y la inhomogeneidad del campo eléctrico actuantes sobre el mencionado oscilador. Además, observamos que la alta frecuencia produce una selección de auto-estados del sistema y también produce degeneración, ya que para un valor de energía dado hay  $\nu$  ( $\nu \in \mathbb{Z}$ ) estados posibles. También observamos que la no homogeneidad del campo eléctrico no homogéneo y rápidamente oscilante en el tiempo produce la aparición de dos nuevos estados, en comparación al campo eléctrico homogéneo y rápidamente oscilante en el tiempo.
  - En la Sección 4.1, presentamos los cálculos de las autofunciones y del espectro de energía. Al estudiar el comportamiento del espectro de energía en función del parámetro de energía cinética observamos que a medida que aumentamos dicho parámetro, aumenta la separación entre las bandas. Por otra parte, al estudiar el comportamiento del espectro de energía en función de la intensidad de la parte homogénea del campo eléctrico, observamos que tanto la banda superior como la inferior se comportan como una recta con pendiente positiva, predominando así el efecto del potencial lineal. Sin embargo, las bandas intermedias siguen un comportamiento parabólico, predominando así el potencial parabólico. En el espectro de energía en función de la intensidad del campo eléctrico homogéneo, observamos que a diferencia del caso del campo eléctrico homogéneo y rápidamente en el tiempo, las bandas no están acotadas. Un comportamiento similar lo obtenemos al estudiar como actúa las bandas de energías respecto a la intensidad de la parte no homogénea
-

del campo eléctrico.

- En la Sección 4.2, presentamos la expresión para el operador de micromovimiento y la función de onda; del operador de micromovimiento deducimos que nuestro sistema es no adiabático, debido a que la evolución del sistema no es unitaria. Esto también se observa mediante el tiempo de repuesta del sistema, para nuestro caso el sistema responde con el período de la forzadora, el cual es mucho menor que el tiempo característico del sistema; cuando pasa esto decimos que el sistema es no adiabático.
  - En la Sección 4.3, presentamos un análisis de forma numérica de la densidad de probabilidad y de los valores medios de los operadores posición y momentum. Vemos que la densidad de probabilidad en función del momento es asimétrica. También deducimos que la dirección del campo eléctrico no homogéneo y rápidamente oscilante en el tiempo la proporciona el signo de  $\epsilon$  y  $\gamma$ . Por otra parte, al estudiar la densidad de probabilidad en función de la posición, observamos que la dirección del movimiento de la partícula en el espacio la proporciona el signo de  $\gamma$ .
  - Finalmente, al estudiar la densidad de probabilidad en función de la posición observamos que la partícula tiene mayor probabilidad de encontrarse en la región  $(-30, -20)$  y en el caso de  $t = \frac{(2n-1)\tau}{2}$  la partícula tiene dos sitios fuertemente probables donde encontrarse. También deducimos mediante la amplitud de la densidad de probabilidad, que a medida que aumentamos el tiempo la partícula se desplaza de forma oscilatoria, con período  $\tau$ . Este comportamiento se confirma con el valor medio de  $X$ , como se ve en la Figura 4.18. En esta gráfica observamos que la partícula eventualmente se encuentra oscilando entre dos puntos de la red. También observamos que el movimiento de la partícula se mantiene acotado en el tiempo, por lo que deducimos que hay localización dinámica, a pesar de que el Hamiltoniano del sistema depende de la posición y está sometido a altas frecuencias. Otra observación de suma importancia, es que a medida que aumentamos la frecuencia de la forzadora disminuye la amplitud del valor medio de  $P$ , por lo que se deduce que hay un umbral en la frecuencia para el cual el sistema no responde.
-

# Apéndice A

## Cálculos de los conmutadores.

- Cálculo del conmutador  $[\cos(ap), V_2(x)]$  en la representación de los momentos, viene dado por

$$\begin{aligned} [\cos(ap), V_2(x)]f(p) &= \left[ \cos(ap), \left( \epsilon x - \frac{\gamma}{3} x^3 \right) \right] f(p) \\ &= i\epsilon \left[ \cos(ap), \frac{d}{dp} \right] f(p) + i\frac{\gamma}{3} \left[ \cos(ap), \frac{d^3}{dp^3} \right] f(p) \\ &= \left( ia\epsilon \sin(ap) + ia\frac{\gamma}{3} \left( 3a \cos(ap) \frac{d}{dp} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - a^2 \sin(ap) + 3 \sin(ap) \frac{d^2}{dp^2} \right) \right) f(p) \end{aligned}$$

Así,

$$[\cos(ap), V_2(x)] = ia \left( \left( \epsilon - \frac{\gamma}{3} a^2 \right) \sin(ap) + i\gamma a \cos(ap)x - \gamma \sin(ap)x^2 \right) \quad (\text{A.1})$$

- Cálculo del conmutador  $[\cos(ap), [\cos(ap), V_2(x)]]$ .
-



En la representación de los momentos, tenemos

$$\begin{aligned}
[\cos(ap), [\cos(ap), V_2(x)]]f(p) &= ia \left( \left( \epsilon - \frac{\gamma}{3}a^2 \right) [\cos(ap), \sin(ap)]f(p) \right. \\
&\quad \left. + \gamma a \cos(ap) \left[ \cos(ap), \frac{d}{dp} \right] f(p) + \gamma \sin(ap) \left[ \cos(ap), \frac{d^2}{dp^2} \right] f(p) \right) \\
&= ia^2 \gamma \left( 2a \sin(ap) \cos(ap) + 2 \sin^2(ap) \frac{d}{dp} \right) f(p)
\end{aligned}$$

Así,

$$[\cos(ap), [\cos(ap), V_2(x)]] = 2ia^2 \gamma \left( a \sin(ap) \cos(ap) + i \sin^2(ap) x \right) \quad (\text{A.2})$$

- Cálculo del conmutador  $[V_1(x), [\cos(ap), V_2(x)]]$ .

En la representación de los momentos, tenemos

$$\begin{aligned}
[V_1(x), [\cos(ap), V_2(x)]]f(p) &= -\frac{ika}{2} \left[ \frac{d^2}{dp^2}, \left( \left( \epsilon - \frac{\gamma}{3}a^2 \right) \sin(ap) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \gamma a \cos(ap) \frac{d}{dp} + \gamma \sin(ap) \frac{d^2}{dp^2} \right) \right] f(p) \\
&= -\frac{ika}{2} \left( \left( \epsilon - \frac{\gamma}{3}a^2 \right) \left[ \frac{d^2}{dp^2}, \sin(ap) \right] f(p) \right. \\
&\quad \left. + \gamma a \left[ \frac{d^2}{dp^2}, \cos(ap) \right] \frac{d}{dp} f(p) + \gamma \left[ \frac{d^2}{dp^2}, \sin(ap) \right] \frac{d^2}{dp^2} f(p) \right) \\
&= -\frac{ika}{2} \left( a \left( \frac{\gamma}{3}a^2 - \epsilon \right) \sin(ap) + \left( 2\epsilon - \frac{5\gamma}{3}a^2 \right) \cos(ap) \frac{d}{dp} \right. \\
&\quad \left. - 3\gamma a \sin(ap) \frac{d^2}{dp^2} + 2\gamma \cos(ap) \frac{d^3}{dp^3} \right) f(p)
\end{aligned}$$

Así,

$$\begin{aligned}
[V_1(x), [\cos(ap), V_2(x)]] &= -\frac{ika}{2} \left( a \left( \frac{\gamma}{3} a^2 - \epsilon \right) \sin(ap) + i \left( 2\epsilon - \frac{5\gamma}{3} a^2 \right) \cos(ap)x \right. \\
&\quad \left. + 3\gamma a \sin(ap)x^2 - 2i\gamma \cos(ap)x^3 \right)
\end{aligned} \tag{A.3}$$

- Cálculo del conmutador  $[V_2(x), [\cos(ap), V_2(x)]]$ .

En la representación de los momentos, tenemos

$$\begin{aligned}
[V_2(x), [\cos(ap), V_2(x)]]f(p) &= ia \left[ \left( \epsilon x - \frac{\gamma}{3} x^3 \right), \left( \left( \epsilon - \frac{\gamma}{3} a^2 \right) \sin(ap) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \gamma a \cos(ap) \frac{d}{dp} + \gamma \sin(ap) \frac{d^2}{dp^2} \right) \right] f(p) \\
&= -a \left( \epsilon \left( \epsilon - \frac{\gamma}{3} a^2 \right) \left[ \frac{d}{dp}, \sin(ap) \right] f(p) \right. \\
&\quad \left. + \frac{\gamma}{3} \left( \epsilon - \frac{\gamma}{3} a^2 \right) \left[ \frac{d^3}{dp^3}, \sin(ap) \right] f(p) + \epsilon \gamma a \left[ \frac{d}{dp}, \cos(ap) \right] \frac{d}{dp} f(p) \right. \\
&\quad \left. + \epsilon \gamma \left[ \frac{d}{dp}, \sin(ap) \right] \frac{d^2}{dp^2} f(p) \right) \\
&= -\epsilon a^2 \left( \left( \epsilon - \frac{2\gamma}{3} a^2 \right) \cos(ap) \right. \\
&\quad \left. - 2\gamma a \sin(ap) \frac{d}{dp} + 2\gamma \cos(ap) \frac{d^2}{dp^2} \right)
\end{aligned}$$

Así,

$$\begin{aligned} [V_2(x), [\cos(ap), V_2(x)]] = & -\epsilon a^2 \left( \left( \epsilon - \frac{2\gamma}{3} a^2 \right) \cos(ap) \right. \\ & \left. - 2i\gamma a \sin(ap)x - 2\gamma \cos(ap)x^2 \right) \end{aligned} \tag{A.4}$$

---

# Apéndice B

## Método para eliminar la primera derivada.

Mediante el método de la eliminación de la primera derivada en una ecuación diferencial de 2do orden, transformamos una ecuación diferencial ordinaria de su forma estándar

$$\varphi''(p) + N(p)\varphi'(p) + Q(p)\varphi(p) = 0 \quad (\text{B.1})$$

a una forma normal, mediante la transformación

$$\varphi(p) = u(p)v(p) , \quad (\text{B.2})$$

donde

$$\frac{d\varphi(p)}{dp} = v(p)u'(p) + u(p)v'(p)$$

$$\frac{d^2\varphi(p)}{dp^2} = v(p)u''(p) + 2u'(p)v'(p) + u(p)v''(p) .$$

Al sustituir las derivadas anteriores en la ecuación diferencial (B.1), tenemos que

$$u(p)(N(p)v'(p) + Q(p)v(p) + v''(p)) + u'(p)(N(p)v(p) + 2v'(p)) + v(p)u''(p) = 0$$

Haciendo cero el término que acompaña a  $u'(p)$ , obtenemos la ecuación para determinar  $v(p)$ , esto es

$$N(p)v(p) + 2v'(p) = 0 \Rightarrow v(p) = e^{-\int \frac{N(p)}{2} dp} \quad (\text{B.3})$$

Además, obtenemos la ecuación diferencial para  $u(p)$ , la cual viene siendo la forma normal de la ecuación diferencial ordinaria (B.1)

---

$$u''(p) + q(p)u(p) = 0. \tag{B.4}$$

Para obtener  $q(p)$ , partimos de (B.3), donde deducimos que

$$v'(p) = -\frac{N(p)}{2}v(p)$$

$$v''(p) = -\frac{N'(p)}{2}v(p) + \frac{N^2(p)}{4}v(p),$$

esto conduce a

$$q(p) = -\frac{N'(p)}{2} - \frac{N^2(p)}{4} + Q(p) \tag{B.5}$$

Finalmente, obtenemos que la forma normal de la ecuación diferencial (B.1), viene dada por

$$u''(p) + q(p)u(p) = 0, \quad q(p) = -\frac{N'(p)}{2} - \frac{N^2(p)}{4} + Q(p).$$

---

# Apéndice C

## Determinante de Hill.

Para determinar las raíces del determinante de Hill seguiremos a F. M. Phelps en [42], donde se tiene que

$$\Delta(\nu) = \Delta_i(\nu) \prod_{n=-\infty}^{\infty} \frac{S_1 - (n + \nu)^2 a^2}{S_1 - n^2 a^2} . \quad (\text{C.1})$$

Podemos reescribir  $S_1 - (n + \nu)^2 a^2$  y  $S_1 - n^2 a^2$  de la siguiente forma

$$S_1 - (n + \nu)^2 a^2 = (S_1^{1/2} - (n + \nu)a)(S_1^{1/2} + (n + \nu)a) ,$$

$$S_1 - n^2 a^2 = -n^2 a^2 \left( 1 - \frac{S_1}{n^2 a^2} \right) .$$

Así,

$$\begin{aligned} \frac{S_1 - (n + \nu)^2 a^2}{S_1 - n^2 a^2} &= \frac{(S_1^{1/2} - (n + \nu)a)(S_1^{1/2} + (n + \nu)a)}{-n^2 a^2 \left( 1 - \frac{S_1}{n^2 a^2} \right)} \\ &= \frac{\left( 1 + \frac{\nu a - S_1^{1/2}}{na} \right) \left( 1 + \frac{\nu a + S_1^{1/2}}{na} \right)}{1 - \frac{S_1}{n^2 a^2}} \end{aligned}$$

---

lo que implica que,

$$\begin{aligned}
\prod_{n=-\infty}^{\infty} \frac{S_1 - (n + \nu)^2 a^2}{S_1 - n^2 a^2} &= \prod_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\left(1 + \frac{\nu a - S_1^{1/2}}{na}\right) \left(1 + \frac{\nu a + S_1^{1/2}}{na}\right)}{1 - \frac{S_1}{n^2 a^2}} \\
&= \frac{\prod_{n=1}^{\infty} \left(1 + \frac{\nu a - S_1^{1/2}}{na}\right) \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 + \frac{\nu a + S_1^{1/2}}{na}\right)}{\prod_{n=-\infty}^{\infty} \left(1 - \frac{S_1}{n^2 a^2}\right)} \\
&= \frac{\prod_{n=1}^{\infty} \left(1 + \frac{\nu a - S_1^{1/2}}{a n \pi}\right) \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 + \frac{\nu a + S_1^{1/2}}{a n \pi}\right)}{\prod_{n=-\infty}^{\infty} \left(1 - \frac{\left(\frac{S_1^{1/2}}{a}\right)^2}{n^2 \pi^2}\right)} \\
&= \frac{\sin\left(\frac{\nu a - S_1^{1/2}}{a} \pi\right) \sin\left(\frac{\nu a + S_1^{1/2}}{a} \pi\right)}{\sin^2\left(\frac{S_1^{1/2}}{a} \pi\right)} \frac{S_1}{\nu^2 a^2 - S_1} \\
\Rightarrow \prod_{n=-\infty}^{\infty} \frac{(S_1 - (n + \nu)^2 a^2) (S_1 + \nu^2 a^2)}{(S_1 - n^2 a^2) S_1} &= - \frac{\sin\left(\frac{\nu a - S_1^{1/2}}{a} \pi\right) \sin\left(\frac{\nu a + S_1^{1/2}}{a} \pi\right)}{\sin^2\left(\frac{S_1^{1/2}}{a} \pi\right)} \quad (\text{C.2})
\end{aligned}$$

Sustituyendo la ecuación (C.2) en la ecuación (C.1), obtenemos

$$\Delta(\nu) = -\Delta_i(\nu) \frac{\sin\left(\frac{\nu a - S_1^{1/2}}{a} \pi\right) \sin\left(\frac{\nu a + S_1^{1/2}}{a} \pi\right)}{\sin^2\left(\frac{S_1^{1/2}}{a} \pi\right)}$$

Después del tratamiento dado por F. M. Phelps en [42], se tiene que la ecuación para determinar las raíces del determinante de Hill es

$$\Delta(\nu) = \Delta(0) - \frac{\sin^2(\nu \pi)}{\sin^2\left(\frac{S_1^{1/2}}{a} \pi\right)} \quad (\text{C.3})$$

donde

$$S_1 \equiv \frac{2E}{k} + \frac{4A^2 a^2 \gamma \epsilon}{k^2 \omega^2}$$

# Bibliografía

- [1] Daniel C. Mattis. The few-body problem on a lattice. *Rev. Mod. Phys.*, 58, 1986.
  - [2] E. Chalbaud, J-P Gallinar, and G. Mata. The quantum harmonic oscillator on a lattice. *J. Phys. A*, 19, 1986.
  - [3] J-P Gallinar and E. Chalbaud. The quantum harmonic oscillator on a lattice in a constant force field and associated bloch oscillations. *Physical Review B*, 43, 1991.
  - [4] M. Bukov, L. D'Alessio, and A. Polkovnikov. Universal high-frequency behavior of periodically driven systems: from dynamical stabilization to floquet engineering. *Adv. Phys.*, 64, 2015.
  - [5] Y. Kayanuma and K. Saito. Coherent destruction of tunneling, dynamic localization, and the landau-zener formula. *Phys. Rev. A*, 77, 2008.
  - [6] L. D'Alessio and A. Polkovnikov. Many-body energy localization transition in periodically driven systems. *Ann. Physics*, 333, 2013.
  - [7] T. Prosen and E. Ilievski. Nonequilibrium phase transition in a periodically driven xy spin chain. *Phys. Rev. Lett.*, 107, 2011.
  - [8] V.M. Bastidas, C. Emary, B. Regler, and T. Brandes. Nonequilibrium quantum phase transitions in the dicke model. *Phys. Rev. Lett.*, 108, 2012.
  - [9] Jon H. Shirley. Solution of the schrödinger equation with a hamiltonian periodic in time. *Phys. Rev. B*, 138, 1965.
  - [10] Hideo Sambe. Steady states and quasienergies of a quantum-mechanical system in an oscillating field. *Phys. Rev. A*, 7, 1973.
  - [11] J. A Oteo S. Blanes, F. Casas and J. Ros. The magnus expansion and some of its applications. *Phys. Reports*, 470, 2009.
-



- [12] W. Magnus and S. Winkler. *Hill's Equation*. Wiley, 1966.
  - [13] Shang Yuan Ren. *Electronic States in Crystal of finite size*. Spring, 2006.
  - [14] Philip Pechukas and John C. Light. On the exponential form of time-displacement operators in quantum mechanics. *The Journal Chemical Physics*, 44, 1966.
  - [15] A.A. Cottey. Floquet theorem and band theory in one dimension. *American J of Physics*, 39, 1971.
  - [16] Tomotaka Kuwahara, Takashi Mori, and Keiji Saitoc. Floquet-magnus theory and generic transient dynamics in periodically driven many-body quantum systems. *Elsevier*, 367, 2016.
  - [17] S. Kohler, J. Lehmann, and P. Hänggi. Driven quantum transport on the nanoscale. *Phys. Rep.*, 406, 2005.
  - [18] J.D. Sau, T. Kitagawa, and B.I. Halperin. Conductance beyond the landauer limit and charge pumping in quantum wires. *Phys. Rev. B*, 85, 2012.
  - [19] Z. Gu, H.A. Fertig, D.P. Arovas, and A. Auerbach. Floquet spectrum and transport through an irradiated graphene ribbon. *Phys. Rev. Lett.*, 107, 2011.
  - [20] T. Kitagawa, T. Oka, A. Brataas, L. Fu, and E. Demler. Transport properties of nonequilibrium systems under the application of light: Photoinduced quantum hall insulators without landau levels. *Phys. Rev. B*, 84, 2011.
  - [21] G. Jotzu, M. Messer, R. Desbuquois, M. Lebrat, T. Uehlinger, D. Greif, and T. Esslinger. Experimental realization of the topological haldane model with ultracold fermions. *Nature*, 515, 2014.
  - [22] Pablo Matías Pérez Piskunow. *Efectos de la radiación en las propiedades eléctricas del grafeno*. Universidad Nacional de Córdoba, 2015.
  - [23] L. Jiang, T. Kitagawa, J. Alicea, A. R. Akhmerov, D. Pekker, G. Refael, J. I. Cirac, E. Demler, M. D. Lukin, and P. Zoller. Majorana fermions in equilibrium and in driven cold-atom quantum wires. *Phys. Rev. Lett.*, 106, 2011.
  - [24] A. Kundu and B. Seradjeh. Transport signatures of floquet majorana fermions in driven topological superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 111, 2013.
  - [25] M. M. Maricq. Application of average hamiltonian theory to the nmr of solids. *Phys. Rev. B*, 25, 1982.
-

- 
- [26] C. Kittel. *Introduction to Solid State Physics*. J. Wiley Inc, N. Y., 2005.
- [27] M.A. Omar. *Elementary Solid State Physics*. Addison-Wesley Publishing Company, Inc., 1993.
- [28] J. M. Ziman. *Principles of the Theory of Solids*. Cambridge Press, London, 1972.
- [29] Walter A. Harrison. *Solid State Physics*. Dover, 1979.
- [30] H. E. Hall. *Solid State Physics*. Wiley, 1974.
- [31] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin. *Solid State Physics*. Holt, Rinehart and Winston, N. Y., 1976.
- [32] J. Kohanoff. *Electronic structure calculations for solids and molecules: Theory and Computational Methods*. Cambridge University Press, 2006.
- [33] A. Bruno-Alfonso and D. R. Nacbar. Wannier functions of isolated bands in one-dimensional crystals. *Physical Review B*, 75, 2007.
- [34] J. C. Slater and G. F. Koster. Simplified lcao method for the periodic potential problem. *Phys. Rev.*, 94, 1954.
- [35] T Hartmann, H J Korsch F Keck, and S Mossmann. Dynamics of bloch oscillations. *New Journal of Physics*, 6, 2004.
- [36] Philip Hofmann. *Solid State Physics - An Introduction*. Weinheim, Germany : Wiley-VCH, 2015.
- [37] Tosio Kato. On the adiabatic theorem of quantum mechanics. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 1950.
- [38] Luis A. González D. *Evolución dinámica de sistemas cuantizados*. IVIC.
- [39] Rainer Dick. *Advanced Quantum Mechanics: Materials and Photons*. Springer, 2012.
- [40] José A. Oller. *Mecánica Cuántica*. Murcia.
- [41] J. A Oteo F. Casas and J. Ros. Floquet theory: exponential perturbative treatment. *Phys. Reports*, 470, 2009.
- [42] F. M. Phelps and J. H. Hunter. An analytical solution of the inverted pendulum. *AAPT*, 1964.
-

- [43] D. H. Dunlap and V. M. Kenkre. Dynamic localization of charged particle moving under the influence of an electric field. *Physical Review B*, 34, 1986.
-