

INTERACCIONES EFECTIVAS DE LARGO ALCANCE EN UNA RED EN LA APROXIMACIÓN SEMICLÁSICA[†]

LONG-RANGE EFFECTIVE INTERACTIONS IN A LATTICE IN THE SEMICLASSICAL APPROXIMATION

EVARISTO MAMANI^{††}, M. CALCINA-NOGALES, DIEGO SANJINÉS

Carrera de Física
Universidad Mayor de San Andrés
c. 27 Cota-Cota, Casilla de Correos 8635, La Paz, Bolivia
(Recibido 31 de agosto de 2016; aceptado 13 de enero de 2017)

RESUMEN

Consideramos el modelo semiclásico de enlace fuerte *extendido* con un hamiltoniano que comprende interacciones a primeros y a segundo vecinos para una partícula cargada que se traslada en una red (por el mecanismo de *hopping*) en presencia de un campo estático arbitrario y un campo uniforme rápidamente oscilante. La aplicación del método de Kapitza permite obtener un hamiltoniano efectivo independiente del tiempo con elementos de salto (*hopping*) que dependen de los campos externos estático y oscilante. Nuestros cálculos muestran que la aproximación semiclásica es bastante buena pues se obtiene, para un campo oscilante homogéneo, los mismos elementos de salto que se derivan del formalismo cuántico. Además, controlando el campo oscilante, podemos manipular las interacciones de tal forma de suprimir lo que serían las interacciones dominantes (a primeros vecinos) y dejar así como efectos observables aquellos debidos a lo que de otra manera serían las interacciones remanentes (con vecinos distantes).

Código(s) PACS: 42.50.Ct — 03.65.Sq — 72.10.Bg

Descriptores: Hamiltoniano efectivo — aproximación semiclásica — modelo de enlace fuerte

ABSTRACT

We consider the semiclassical model of an *extended* tight-binding Hamiltonian comprising nearest- and next-to-nearest neighbor interactions for a charged particle hopping in a lattice in the presence of a static arbitrary field and a rapidly oscillating uniform field. The application of Kapitza's method yields a time independent effective Hamiltonian with long range hopping elements that depend on the external static and oscillating fields. Our calculations show that the semiclassical approximation is quite reliable as it yields, for a homogeneous oscillating field, the same effective hopping elements as those derived within the quantum approach. Furthermore, by controlling the oscillating field, we can engineer the interactions so as to suppress the otherwise dominant interactions (nearest neighbors) and leave as observable effects those due to the otherwise remanent interactions (distant neighbors).

Subject headings: Effective Hamiltonian — semiclassical approximation — tight-binding model

1. INTRODUCCIÓN

El estudio de la dinámica electrónica en redes cristalinas de estado sólido adquirió recientemente un renovado interés en vista de la factibilidad de técnicas experimentales y la posibilidad de imitar (emular) dichos fenómenos dinámicos, por ejemplo, en arreglos de guías de onda ópticas (Dreisow et al.

2011; Marte & Stenholm 1997; Lenz 1999; Longhi et al. 2006; Longhi 2007, 2009; Longhi et al. 2010). De estos efectos, aquellos que resultan de la aplicación de un campo eléctrico externo AC homogéneo son relevantes para dilucidar fenómenos de transporte como, por ejemplo, localización dinámica, control coherente de tunelamiento, transiciones metal-aislante y dinámica de átomos en trampas (Dunlap & Kenkre 1986; Rahav et al. 2003; Bandyopadhyay & Dattagupta 2008). Si, además, los campos AC se consideran como perturbaciones de alta frecuencia, es posible entonces aplicar un método de promediación temporal (debido originalmente a P.

[†]Traducción autorizada de “Long-range effective interactions in a lattice in the semiclassical approximation”, E. Mamani, M. Calcina-Nogales and D. Sanjinés, *International Journal of Modern Physics B* **31** (2017) 1750116. DOI:10.1142/S0217979217501168

^{††}evaristomamanicarlo@gmail.com

L. Kapitza para el estudio del péndulo invertido (Kapitza 1951; Landau & Lifschitz 1985) a fin de obtener un hamiltoniano efectivo independiente del tiempo para una red de enlace fuerte. Nuestros resultados permiten manipular las constantes efectivas de tunelamiento en la red, lo que puede ser útil para imitar ciertos fenómenos del estado sólido (Itin & Neishtadt 2014; Itin & Katsnelson 2015). De hecho, fue en estos trabajos donde encontramos el efecto interesante de una interacción a segundos vecinos que surge por la acción conjunta de un campo uniforme rápidamente oscilante y un potencial estático cuadrático. Este resultado, que fue deducido en Itin & Neishtadt (2014) y Itin & Katsnelson (2015) aplicando la técnica de promediación temporal de Kapitza a un hamiltoniano de enlace fuerte, también se puede obtener de manera exacta usando el modelo semiclásico¹ (lo que hacemos, como un resultado colateral, en este trabajo), llegando así, de una forma más simple y expedita, a las mismas conclusiones que aquellas que se deducen estrictamente con el formalismo cuántico, específicamente, en el tratamiento de los efectos dinámicos combinados sobre una partícula cargada (electrón) por la acción de campos eléctricos externos arbitrarios dependientes del tiempo y de la posición.

El propósito de nuestro trabajo es aplicar el modelo semiclásico a una red *extendida* de enlace fuerte y, además de confirmar fenómenos conocidos, deducir nuevos efectos que sugieren la posibilidad de obtener (“diseñar”) hamiltonianos efectivos usando campos perturbativos de alta frecuencia. A fin de contrastar y verificar nuestros resultados nos referiremos a Martínez et al. (2014) donde el método de Kapitza se usa para calcular un potencial efectivo independiente del tiempo debido a un campo rápidamente oscilante y a un campo estático arbitrario (en Martínez et al. (2014) se puede asimismo encontrar algunas referencias acerca de la aplicación del modelo semiclásico a redes de enlace fuerte). La idea de usar un hamiltoniano *extendido* de enlace fuerte que incorpore una interacción a segundos vecinos (o vecinos más distantes) se puede rastrear, por ejemplo, hasta el trabajo de Dunlap & Kenkre (1986), donde sus resultados acerca de la localización dinámica se extienden a interacciones de largo alcance a través de una energía cinética de la forma $2 \sum_n A_n \cos nap$, generalizando así la interacción usual a primeros vecinos dada por $2A \cos ap$. El concepto de “diseño de la banda” (*band engineering*) con interacciones de largo alcance fue investigado (de manera teórica y experimental) en redes fotónicas, por ejemplo en Dunlap & Kenkre (1986), donde se suprime aproximadamente la difracción de banda ancha en un haz de luz. Investigaciones recientes en sistemas laminados de grafeno muestran que los efectos correspondientes a los términos adicionales de un hamil-

toniano extendido se pueden considerar como mejoras a los resultados sin tales términos (Reich et al. 2002; Kundu 2011; Wright et al. 2009; Kadirko et al. 2013), aunque esas mejoras son pequeñas debido a la menor magnitud relativa de la interacción a segundos vecinos comparada con la interacción a primeros vecinos. Para obtener uno de los nuevos resultados de nuestro trabajo controlamos los parámetros del campo externo oscilante del tal forma que la interacción a primeros vecinos se suprime de manera efectiva dejando como interacción dominante la de segundos vecinos; el efecto observable es una “oscilación efectiva de Bloch”. De la misma forma, la interacción a terceros vecinos se vuelve dominante cuando las interacciones a primeros y a segundos vecinos se suprimen. Aunque estos resultados se restringen al caso en una dimensión, pensamos que su generalización a dos y tres dimensiones es posible, de tal forma de poderse aplicar en sistemas reales como por ejemplo el grafeno. De hecho, en Madison et al. (1998) se reportó la primera observación de supresión dinámica de la banda debida a un campo externo AC en una red óptica (en lugar de una red de estado sólido) donde el ancho de banda se reduce a cero y los estados de Bloch se localizan cuando la amplitud del campo obedece la misma condición que reportamos en este trabajo, aunque el colapso completo de la banda reportado en Madison et al. (1998) no fue posible en ese experimento debido a acoplamientos con vecinos distantes y la presencia de otras bandas.

Así, podemos resumir la metodología de nuestro trabajo como la aplicación de un procedimiento a dos modelos: el método de promediación temporal de Kapitza aplicado a un modelo de enlace fuerte *extendido* bajo la aproximación semiclásica. Organizamos nuestro trabajo de la siguiente manera: en la sección 2 deducimos la fórmula para el hamiltoniano efectivo aproximado hasta términos del orden de ω^{-2} de la frecuencia del campo externo; en la sección 3 proponemos un modelo de escenario para la ingeniería de interacciones con base en los resultados de la sección 2; en la sección 4 aplicamos el método pseudoespectral para resolver numéricamente la ecuación de Schrödinger y luego poder comparar los resultados semiclásicos con los cuánticos en el límite $\omega \rightarrow \infty$; en la sección 5 discutimos las principales conclusiones que se obtienen de la expresión para el hamiltoniano efectivo y de su aplicación a la ingeniería de interacciones; en la sección 6 mencionamos los aspectos concluyentes más relevantes y algunas perspectivas interesantes para eventuales trabajos futuros.

2. DEDUCCIÓN DEL HAMILTONIANO EFECTIVO

Consideremos el hamiltoniano *extendido* de enlace fuerte con interacciones a primeros y a segundos vecinos,

$$H(x, p) = -2A \cos ap - 2B \cos 2ap + U(x) + x f(\omega t), \quad (1)$$

donde a es la constante de red; por simplicidad tomemos los valores numéricos de las constantes físicas e y \hbar iguales a 1, asimismo supondremos que

¹ Una justificación concisa y pedagógica del modelo semiclásico aplicado a un potencial periódico general se puede encontrar, por ejemplo, en el cap. 12 de Ashcroft & Mermin (1976).

$a = 1$ de aquí en adelante; $U(x)$ es el potencial que corresponde a un campo externo estático arbitrario y $f(\omega t)$ es un campo rápidamente oscilante con frecuencia $\omega \gg 1/T$, donde T es el periodo característico de oscilación de la partícula en ausencia del campo forzador $f(\omega t)$. A continuación usamos las ecuaciones de movimiento de Hamilton $\dot{x} = \partial H/\partial p$, $\dot{p} = -\partial H/\partial x$, de las que se obtiene las derivadas temporales de la posición y del momentum:

$$\dot{x}(t) = 2A \sin p + 4B \sin 2p, \quad (2)$$

$$\dot{p}(t) = -U'(x) - f(\omega t). \quad (3)$$

Usaremos la notación: $U'(x), U''(x), U^{(n)}(x)$, para las derivadas espaciales de $U(x)$. Apliquemos a continuación la transformación canónica entre los momentos, $(x, p) \rightarrow (x, y)$:

$$p(t) = y(t) - g(t) \quad (4)$$

donde se definió el “momentum desplazado” $y(t)$ junto con la derivada temporal $\dot{y}(t) \equiv f(\omega t)$. Esta transformación será conveniente para los propósitos que se explican después de (9). La sustitución de (4) en (2) y en (3) conduce al sistema de ecuaciones:

$$\dot{x} = 2A \sin(y - g) + 4B \sin 2(y - g), \quad (5)$$

$$\dot{y} = -U'(x). \quad (6)$$

Debido a la acción combinada de los campos estático y oscilatorio, la partícula realizará un movimiento rápido con pequeñas oscilaciones en torno a una trayectoria que varía lentamente. Se definen pues las coordenadas “lentas” $X(t), Y(t)$ y las coordenadas “rápidas” $\xi(\tau), \eta(\tau)$; éstas últimas se consideran perturbaciones de las primeras:

$$x(t) = X(t) + \xi(\tau), \quad (7)$$

$$y(t) = Y(t) + \eta(\tau), \quad (8)$$

donde $\tau \equiv \omega t$, de tal forma que el promedio temporal de $\xi(\tau)$ y $\eta(\tau)$ se anula en el intervalo temporal con periodo $2\pi/\omega$, mientras $X(t)$ y $Y(t)$ permanecen casi constantes en ese mismo intervalo, i.e., $\langle \xi \rangle = \langle \eta \rangle = 0$, $\langle X \rangle = X(t)$, $\langle Y \rangle = Y(t)$.

El conjunto de las transformaciones $(x, p) \rightarrow (x, y) \rightarrow (X, Y)$ dadas en (4), (7) y (8) es canónico ya que la estructura de las ecuaciones de Hamilton se preserva (Landau & Lifschitz 1985):

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \partial H(x, y; t)/\partial y, & \dot{y} &= -\partial H(x, y; t)/\partial x, \\ \dot{X} &= \partial H(X, Y)/\partial Y, & \dot{Y} &= -\partial H(X, Y)/\partial X; \end{aligned} \quad (9)$$

esto es así como una consecuencia de la invariancia de los corchetes de Poisson: $[p, x] = [y, x] = [Y, X] = 1$, lo que conduce a $H(x, y; t) = H(x, p; t) + \partial F(x, y; t)/\partial t$, y la promediación temporal que se usa como $\langle X \rangle = X(t)$, $\langle Y \rangle = Y(t)$, lo que nos lleva de $H(x, y; t)$ a $H(X, Y)$. La forma necesaria de la función generatriz es $F(x, y; t) = x(y - g)$ tal que $H(x, y; t) = -2A \cos(y - g) - 2B \cos 2(y - g) + U(x)$ junto con las condiciones

$\partial F/\partial x = p = y - g$ y $\partial F/\partial y = x$. El resultado es el desplazamiento de la dependencia temporal del término $x f(\omega t)$ en $H(x, p; t)$ hacia los argumentos de los operadores de energía cinética en $H(x, y; t)$, lo que resulta en una transformación conveniente a fin de obtener promedios temporales de manera eficiente. $H(X, Y)$ tiene ahora la forma de un hamiltoniano explícitamente independiente del tiempo que representa a una constante de movimiento y cuya construcción conducirá a la Eq. (42), que es el resultado central de este trabajo.

Comenzamos ahora el procedimiento de promediación temporal reemplazando (7) en (5), y (8) en (6):

$$\dot{X} + \omega \frac{d\xi}{d\tau} = 2A \sin(Y + \eta - g) + 4B \sin 2(Y + \eta - g), \quad (10)$$

$$\dot{Y} + \omega \frac{d\eta}{d\tau} = -U'(X + \xi), \quad (11)$$

donde $d/dt = \omega d/d\tau$. Luego obtenemos el promedio temporal de (10) y (11):

$$\dot{X} = 2A \langle \sin(Y + \eta - g) \rangle + 4B \langle \sin 2(Y + \eta - g) \rangle, \quad (12)$$

$$\dot{Y} = -\langle U'(X + \xi) \rangle. \quad (13)$$

Las ecuaciones (12) y (13) son las ecuaciones de movimiento efectivas que corresponden a las partes lentas de las coordenadas $x(t), y(t)$, respectivamente. De manera similar, las ecuaciones de movimiento efectivas que corresponden a las partes rápidas de las coordenadas $x(t), y(t)$, se obtienen restando (12) de (10), y restando (13) de (11):

$$\begin{aligned} \omega \frac{d\xi}{d\tau} &= 2A [\sin(Y + \eta - g) - \langle \sin(y + \eta - g) \rangle] \\ &\quad + 4B [\sin 2(Y + \eta - g) - \langle \sin 2(y + \eta - g) \rangle], \end{aligned} \quad (14)$$

$$\omega \frac{d\eta}{d\tau} = -U'(X + \xi) + \langle U'(X + \xi) \rangle. \quad (15)$$

Para resolver el sistema (14)-(15) para las coordenadas rápidas definimos: t como el “tiempo lento”, $\tau \equiv \omega t$ como el “tiempo rápido” y $\epsilon \equiv t/\tau = 1/\omega$ como el parámetro de pequeñez tal que $\epsilon \rightarrow 0$ cuando $\omega \rightarrow \infty$. Ahora realizamos la expansión de $\xi(\tau)$ y $\eta(\tau)$ en potencias de ϵ :

$$\xi(\tau) = \sum_{i=0}^{\infty} \epsilon^i \xi_i(\tau), \quad \eta(\tau) = \sum_{i=0}^{\infty} \epsilon^i \eta_i(\tau). \quad (16)$$

Sustituyendo (16) en (14) y en (15) hasta ϵ^2 , obtenemos:

$$\begin{aligned}
 & \frac{d\xi_0}{d\tau} + \epsilon \frac{d\xi_1}{d\tau} + \epsilon^2 \frac{d\xi_2}{d\tau} \\
 &= 2A\epsilon [\text{sen}(Y + \eta_0 + \epsilon\eta_1 + \epsilon^2\eta_2 - g) \\
 & \quad - \langle \text{sen}(Y + \eta_0 + \epsilon\eta_1 + \epsilon^2\eta_2 - g) \rangle] \\
 &+ 4B\epsilon [\text{sen} 2(Y + \eta_0 + \epsilon\eta_1 + \epsilon^2\eta_2 - g) \\
 & \quad - \langle \text{sen} 2(Y + \eta_0 + \epsilon\eta_1 + \epsilon^2\eta_2 - g) \rangle], \quad (17)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{d\eta_0}{d\tau} + \epsilon \frac{d\eta_1}{d\tau} + \epsilon^2 \frac{d\eta_2}{d\tau} &= -\epsilon [U'(X + \xi_0 + \epsilon\xi_1 + \epsilon^2\xi_2) \\
 & \quad - \langle U'(X + \xi_0 + \epsilon\xi_1 + \epsilon^2\xi_2) \rangle]. \quad (18)
 \end{aligned}$$

Expandimos también hasta ϵ^2 las funciones $\text{sen}(\cdot)$ y $U'(\cdot)$ en el lado derecho de (17) y (18):

$$\begin{aligned}
 & \text{sen}(Y + \eta_0 + \epsilon\eta_1 + \epsilon^2\eta_2 - g) \\
 &= \text{sen}(Y + \eta_0 - g) + \epsilon\eta_1 \cos(Y + \eta_0 - g) \\
 &+ \epsilon^2 \left[\eta_2 \cos(Y + \eta_0 - g) - \frac{1}{2}\eta_1^2 \text{sen}(Y + \eta_0 - g) \right], \quad (19)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & U'(X + \xi_0 + \epsilon\xi_1 + \epsilon^2\xi_2) \\
 &= U'(X + \xi_0) + \epsilon\xi_1 U''(X + \xi_0) \\
 &+ \epsilon^2 \left(\xi_2 U''(X + \xi_0) + \frac{1}{2}\xi_1^2 U^{(3)}(X + \xi_0) \right). \quad (20)
 \end{aligned}$$

La sustitución de (19) en (17) y de (20) en (18), y la comparación de los términos en los mismos órdenes de potencias de ϵ , conducen a la siguientes relaciones: para ϵ^0 ,

$$\frac{d\xi_0}{d\tau} = \frac{d\eta_0}{d\tau} = 0, \quad (21)$$

con la solución $\xi_0 = \eta_0 = 0$ elegida de tal forma que los promedios temporales de $\xi(\tau)$ y $\eta(\tau)$ se eliminen. Para ϵ^1 tenemos:

$$\begin{aligned}
 \frac{d\xi_1}{d\tau} &= 2A [\text{sen}(Y - g) - \langle \text{sen}(Y - g) \rangle] \\
 & \quad + 4B [\text{sen} 2(Y - g) - \langle \text{sen} 2(Y - g) \rangle], \\
 \frac{d\eta_1}{d\tau} &= -U'(X) + \langle U'(X) \rangle = 0, \quad (22)
 \end{aligned}$$

con la solución $\eta_1 = 0$ para la última ecuación. Para ϵ^2 tenemos:

$$\begin{aligned}
 \frac{d\xi_2}{d\tau} &= 0, \\
 \frac{d\eta_2}{d\tau} &= -\xi_1 U''(X) + \langle \xi_1 U''(X) \rangle = -\xi_1 U''(X). \quad (23)
 \end{aligned}$$

con la solución $\xi_2 = 0$ para la primera ecuación. Nótese que para $\xi(\tau)$ y $\eta(\tau)$ dadas en (16) a fin de obtener un promedio temporal nulo es necesario que $\langle \xi_i \rangle = 0$ y $\langle \eta_i \rangle = 0$ para todos los enteros positivos i .

Con estos resultados y aquellos de las ecuaciones (12), (13), (19) y (20), las ecuaciones de movimiento “efectivas” para las coordenadas lentas de posición $X(t)$ y del momentum desplazado $Y(t)$ son:

$$\begin{aligned}
 \dot{X} &= 2A [\langle \text{sen}(Y - g) \rangle + \epsilon^2 \langle \eta_2 \cos(Y - g) \rangle] \\
 & \quad + 4B [\langle \text{sen} 2(Y - g) \rangle + 2\epsilon^2 \langle \eta_2 \cos 2(Y - g) \rangle], \quad (24)
 \end{aligned}$$

$$\dot{Y} = - \left[U'(X) + \frac{1}{2}\epsilon^2 \langle \xi_1^2 \rangle U^{(3)}(X) \right]. \quad (25)$$

Ya que debemos integrar las ecuaciones para $X(t)$ y $Y(t)$ a fin de calcular el hamiltoniano efectivo $H(X, Y)$, necesitamos entonces calcular las expresiones para los promedios temporales en $X(t)$. Para ese propósito expresemos las siguientes funciones en forma de variable compleja:

$$\begin{aligned}
 \text{sen}(Y - g) &= \frac{1}{2i} [e^{iY} e^{-ig} - e^{-iY} e^{ig}] \\
 &= \frac{1}{2i} \sum_n [e^{iY} F_n^* e^{-in\tau} - e^{-iY} F_n e^{in\tau}], \\
 \text{sen} 2(Y - g) &= \frac{1}{2i} [e^{i2Y} e^{-i2g} - e^{-i2Y} e^{i2g}] \\
 &= \frac{1}{2i} \sum_{n,m} [e^{i2Y} F_n^* F_m^* e^{-i(n+m)\tau} \\
 & \quad - e^{-i2Y} F_n F_m e^{i(n+m)\tau}], \quad (26)
 \end{aligned}$$

donde definimos

$$F(t) \equiv e^{ig} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} F_n e^{in\tau}; \quad (27)$$

la expansión de Fourier de $F(t)$ es posible ya que $g(t) = \int f(\omega t) dt$ es periódica para el campo real y periódico $f(\omega t) = \sum f_n \exp(in\omega t)$ (con $f_n^* = f_{-n} = f_n$ y $f_0 = 0$), así que $F(t)$ también es periódica. Vale la pena dilucidar la relación entre los coeficientes de Fourier F_n y f_n , ya que se usarán después. De las definiciones dadas anteriormente tenemos que

$$\begin{aligned}
 \sum_n F_n e^{in\omega t} &= \exp \left(\frac{1}{\omega} \sum_{n \neq 0} \frac{f_n}{n} e^{in\omega t} \right) \cong 1 + \frac{1}{\omega} \sum_{p \neq 0} \frac{f_p}{p} e^{ip\omega t} \\
 & \quad + \frac{1}{2\omega^2} \sum_{(q,r) \neq 0} \frac{f_q f_r}{qr} e^{i(q+r)\omega t}, \quad (28)
 \end{aligned}$$

que se aproximó para $\omega \rightarrow \infty$. Ahora multiplicamos cada término en (28) por $(1/T) \exp(-im\omega t)$ e integramos en t en el intervalo $(0, T)$, as que se generan los trminos con la forma de

$$\frac{1}{T} \int_0^T e^{i(n \pm m)\omega t} dt \equiv \langle \exp i(n \pm m)\tau \rangle = \delta_{n, \pm m}. \quad (29)$$

Así resulta que

$$F_m \cong \delta_{m,0} + \frac{1}{\omega} \sum_{p \neq 0} \frac{f_p}{p} \delta_{p,m} + \frac{1}{2\omega^2} \sum_{(q,r) \neq 0} \frac{f_q f_r}{qr} \delta_{q+r,m}, \quad (30)$$

donde $F_n^* = F_n$. Para $m = 0$ obtenemos de (30):

$$F_0 \cong 1 + \frac{1}{2\omega^2} \sum_{q \neq 0} \frac{f_q f_{-q}}{q(-q)} = 1 - \frac{1}{2\omega^2} \sum_{q \neq 0} \frac{f_q^2}{q^2}. \quad (31)$$

Este resultado ser de utilidad posteriormente.

Ahora continuamos calculando los promedios temporales en (26) para lo que usamos (29):

$$\begin{aligned} \langle \text{sen}(Y - g) \rangle &= \frac{1}{2i} [e^{iY} F_0^* - e^{-iY} F_0], \\ \langle \text{sen } 2(Y - g) \rangle &= \frac{1}{2i} \sum_n [e^{i2Y} F_n^* F_{-n}^* - e^{-i2Y} F_n F_{-n}]. \end{aligned} \quad (32)$$

Sustituyendo (26) y (32) en la primera ecuación en (22) se obtiene una expresión para ξ_1 que está lista para ser integrada:

$$\begin{aligned} \frac{d\xi_1}{d\tau} &= \frac{A}{i} \sum_{n \neq 0} [e^{iY} F_n^* e^{-in\tau} - e^{-iY} F_n e^{in\tau}] \\ &+ \frac{2B}{i} \sum_{n,m+n \neq 0} \left[e^{i2Y} F_n^* F_m^* e^{-i(n+m)\tau} \right. \\ &\left. - e^{-i2Y} F_n F_m e^{i(n+m)\tau} \right], \end{aligned} \quad (33)$$

que conduce a:

$$\begin{aligned} \xi_1 &= A \sum_{n \neq 0} \frac{1}{n} [e^{iY} F_n^* e^{-in\tau} + e^{-iY} F_n e^{in\tau}] \\ &+ 2B \sum_{n,m+n \neq 0} \frac{1}{(n+m)} [e^{i2Y} F_n^* F_m^* e^{-i(n+m)\tau} \\ &+ e^{-i2Y} F_n F_m e^{i(n+m)\tau}]. \end{aligned} \quad (34)$$

Este valor de ξ_1 se sustituye ahora en la segunda ecuación en (23) y luego integramos la ecuación que resulta para η_2 :

$$\begin{aligned} \eta_2 &= \frac{AU''(X)}{i} \sum_{n \neq 0} \frac{1}{n^2} [e^{iY} F_n^* e^{-in\tau} - e^{-iY} F_n e^{in\tau}] \\ &+ \frac{2BU''(X)}{i} \sum_{n,m+n \neq 0} \frac{1}{(n+m)^2} [e^{i2Y} F_n^* F_m^* e^{-i(n+m)\tau} \\ &- e^{-i2Y} F_n F_m e^{i(n+m)\tau}]. \end{aligned} \quad (35)$$

Con esta expresión para η_2 , procedemos ahora de manera similar a calcular los demás promedios temporales de $X(t)$ en (24). Los resultados son:

$$\begin{aligned} &\langle \eta_2 \cos(Y - g) \rangle \\ &= \frac{AU''(X)}{2i} \sum_{n \neq 0} \frac{1}{n^2} [e^{2iY} F_n^* F_{-n}^* - e^{-2iY} F_n F_{-n}] \\ &+ \frac{BU''(X)}{i} \sum_{n,m+n \neq 0} \frac{1}{(n+m)^2} [e^{i3Y} F_n^* F_m^* F_{-n-m}^* \\ &+ e^{iY} F_n^* F_m^* F_{n+m} - e^{-iY} F_n F_m F_{n+m} \\ &- e^{-i3Y} F_n F_m F_{-n-m}], \end{aligned} \quad (36)$$

$$\begin{aligned} \langle \eta_2 \cos 2(Y - g) \rangle &= \frac{AU''(X)}{2i} \sum_{m,n \neq 0} \frac{1}{n^2} [e^{i3Y} F_n^* F_m^* F_{-n-m}^* \\ &+ e^{-iY} F_n^* F_m F_{n-m} - e^{iY} F_n F_m^* F_{n-m} \\ &- e^{-i3Y} F_n F_m F_{-n-m}] \\ &+ \frac{BU''(X)}{i} \sum_{r,n,m+n \neq 0} \frac{1}{(n+m)^2} [e^{i4Y} F_n^* F_m^* F_r^* F_{-n-m-r}^* \\ &+ F_n^* F_m^* F_r F_{n+m-r} - F_n F_m F_r F_{n+m-r} \\ &- e^{-i4Y} F_n F_m F_r F_{-n-m-r}]. \end{aligned} \quad (37)$$

Con estos promedios temporales, y recordando que $F_n = F_n^*$, la expresión para \dot{X} en (24) resulta:

$$\begin{aligned} \dot{X} &= 2 \left[AF_0 - \frac{2ABU''(X)}{\omega^2} \sum_{n \neq 0} \frac{F_n G_n}{n^2} \right] \text{sen } Y \\ &+ 4 \left[BG_0 + \frac{A^2 U''(X)}{2\omega^2} \sum_{n \neq 0} \frac{F_n F_{-n}}{n^2} \right] \text{sen } 2Y \\ &+ 6 \left[\frac{2ABU''(X)}{\omega^2} \sum_{n \neq 0} \frac{G_n F_{-n}}{n^2} \right] \text{sen } 3Y \\ &+ 8 \left[\frac{2B^2 U''(X)}{\omega^2} \sum_{n \neq 0} \frac{G_n G_{-n}}{n^2} \right] \text{sen } 4Y, \end{aligned} \quad (38)$$

donde definimos $G_m \equiv \sum_n F_n F_{m-n}$. A continuación calculamos la ecuación "efectiva" de movimiento (25) para el momento desplazado lento $Y(t)$, donde el único promedio temporal que se necesita es $\langle \xi_1^2 \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \xi_1^2 \rangle &= \sum_{n \neq 0} \frac{1}{n^2} [2A^2 (F_n F_n - F_n F_{-n} \cos 2Y) \\ &+ 8AB (F_n G_n \cos Y - F_n G_{-n} \cos 3Y) \\ &+ 8B^2 (G_n G_n - G_n G_{-n} \cos 4Y)], \end{aligned} \quad (39)$$

lo que conduce a

$$\begin{aligned} \dot{Y} = & -U'(X) - \sum_{n \neq 0} \frac{1}{n^2 \omega^2} \left[U^{(3)}(X) (A^2 F_n F_n \right. \\ & + 4B^2 G_n G_n) + 4ABU^{(3)}(X) F_n G_n \cos Y \\ & - A^2 U^{(3)}(X) F_n F_{-n} \cos 2Y \\ & - 4ABU^{(3)}(X) F_n G_{-n} \cos 3Y \\ & \left. - 4B^2 U^{(3)}(X) G_n G_{-n} \cos 4Y \right]. \end{aligned} \quad (40)$$

A fin de calcular el hamiltoniano efectivo $H(X, Y)$ que debe representar la conservación de la energía total, notemos que podemos construir esa función constante en las coordenadas lentas X, Y a partir de las relaciones (38) y (40) que calculamos antes: $\dot{X}/\dot{Y} = dX/dY$, de donde se obtiene $-\dot{Y}dX + \dot{X}dY = 0$, y que conduce a una ecuación diferencial exacta si $-\partial\dot{Y}/\partial Y = \partial\dot{X}/\partial X$; en efecto, esta condición se cumple, como se verifica a continuación:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial\dot{Y}}{\partial Y} = \frac{\partial\dot{X}}{\partial X} \\ = \sum_{n \neq 0} \frac{1}{n^2 \omega^2} \left[-4ABU^{(3)}(X) F_n G_n \sin Y \right. \\ + 2A^2 U^{(3)}(X) F_n F_{-n} \sin 2Y \\ + 12ABU^{(3)}(X) G_n F_{-n} \sin 3Y \\ \left. + 16B^2 U^{(3)}(X) G_n G_{-n} \sin 4Y \right]. \end{aligned} \quad (41)$$

En este caso, $dH(X, Y) = 0$ para la función constante $H(X, Y)$ que se calcula a partir de la teoría de ecuaciones diferenciales como $H(X, Y) = -\int \dot{Y}dX + \int (\dot{X} + \partial/\partial Y \int \dot{Y}dX) dY$; de (38) y (40) este cálculo es directo y conduce finalmente al hamiltoniano efectivo:

$$\begin{aligned} H(X, Y) = & -2\tilde{A}(X) \cos Y - 2\tilde{B}(X) \cos 2Y \\ & - 2\tilde{C}(X) \cos 3Y - 2\tilde{D}(X) \cos 4Y \\ & + U(X) + \Phi(X), \end{aligned} \quad (42)$$

donde:

$$\begin{aligned} \tilde{A}(X) & \equiv AF_0 - \frac{2ABU''(X)}{\omega^2} \sum_{n \neq 0} \frac{F_n G_n}{n^2}, \\ \tilde{B}(X) & \equiv BG_0 + \frac{A^2 U''(X)}{2\omega^2} \sum_{n \neq 0} \frac{F_n F_{-n}}{n^2}, \\ \tilde{C}(X) & \equiv \frac{2ABU''(X)}{\omega^2} \sum_{n \neq 0} \frac{F_n G_{-n}}{n^2}, \\ \tilde{D}(X) & \equiv \frac{2B^2 U''(X)}{\omega^2} \sum_{n \neq 0} \frac{G_n G_{-n}}{n^2}, \\ \Phi(X) & \equiv \frac{U''(X)}{\omega^2} \left(A^2 \sum_{n \neq 0} \frac{F_n^2}{n^2} + 4B^2 \sum_{n \neq 0} \frac{G_n^2}{n^2} \right). \end{aligned} \quad (43)$$

En esta expresión observamos los términos $\tilde{A}(X)$, $\tilde{B}(X)$, $\tilde{C}(X)$ y $\tilde{D}(X)$, cuya dependencia funcional en X no supone un significado físico particular en la teoría de transporte de enlace fuerte; sin embargo, ya sea para un potencial estático parabólico ($U(X) = kX^2/2$) o lineal ($U(X) = \alpha X$), esos términos son elementos de *hopping* modificados o “reparametrizados”, \tilde{A}, \tilde{B} , tales que $\tilde{A} \rightarrow A$ y $\tilde{B} \rightarrow B$ cuando $\omega \rightarrow \infty$, y aparecen nuevos términos o elementos de *hopping* “inducidos”, \tilde{C}, \tilde{D} , tales que $\tilde{C} \rightarrow 0$ y $\tilde{D} \rightarrow 0$ cuando $\omega \rightarrow \infty$.

Los elementos de *hopping* efectivos en (43) se pueden reescribir de manera simplificada definiendo las cantidades adimensionales

$$\begin{aligned} \hat{A} & \equiv \tilde{A}/A = F_0 - \nu \sum_{n \neq 0} \frac{F_n G_n}{n^2}, \\ \hat{B} & \equiv \tilde{B}/A = \mu G_0 + \frac{\nu}{8\mu} \sum_{n \neq 0} \frac{F_n F_{-n}}{n^2}, \\ \hat{C} & \equiv \tilde{C}/A = \frac{\nu}{2} \sum_{n \neq 0} \frac{F_n G_{-n}}{n^2}, \\ \hat{D} & \equiv \tilde{D}/A = \frac{\mu\nu}{2} \sum_{n \neq 0} \frac{G_n G_{-n}}{n^2}, \end{aligned} \quad (44)$$

junto con los parámetros de pequeñez $\mu \equiv B/A$ (para $A > B$) y $\nu \equiv 4BU''(X)\omega^{-2}$ (para $\omega \rightarrow \infty$). El término $\Phi(X)$ en (42) es una constante aditiva inmaterial que no conlleva algún efecto físico observable (para los potenciales estáticos parabólico o lineal) y puede ser ignorado de aquí en adelante.

3. INGENIERÍA DE INTERACCIONES

Consideremos a continuación el caso de un campo externo oscilante de la forma $f(\tau) = 2f_1 \cos \tau + 2f_2 \cos 2\tau$. Los coeficientes de Fourier correspondientes para la función periódica $F(t)$ definida en (27) son $F_n = \sum_r J_{n-2r} \bar{J}_r$ (donde $J_m \equiv J_m(2f_1/\omega)$ y $\bar{J}_m \equiv J_m(f_2/\omega)$). Los elementos de *hopping* efectivos adimensionales que resultan son

$$\begin{aligned}
\hat{A} &= \sum_n J_{2n} \tilde{J}_n \\
&\quad - \nu \sum_{n \neq 0} \sum_{m,r,s,t} n^{-2} J_{n-2m} J_{r-2s} J_{n-r-2t} \tilde{J}_m \tilde{J}_s \tilde{J}_t, \\
\hat{B} &= \mu \sum_{n,m,r} J_{n-2m} J_{-n-2r} \tilde{J}_m \tilde{J}_r \\
&\quad + \frac{\nu}{8\mu} \sum_{n \neq 0} \sum_{m,r} n^{-2} J_{n-2m} J_{-n-2r} \tilde{J}_m \tilde{J}_r, \\
\hat{C} &= \frac{\nu}{2} \sum_{n \neq 0} \sum_{m,r,s,t} n^{-2} J_{n-2m} J_{r-2s} J_{-n-r-2t} \tilde{J}_m \tilde{J}_s \tilde{J}_t, \\
\hat{D} &= \frac{\mu\nu}{2} \sum_{n \neq 0} \sum_{m,r,s,t,u,v} n^{-2} J_{m-2s} J_{n-m-2t} J_{r-2u} \\
&\quad \times J_{-n-r-2v} \tilde{J}_s \tilde{J}_t \tilde{J}_u \tilde{J}_v. \tag{45}
\end{aligned}$$

Controlando las intensidades $2f_1$ y $2f_2$ del campo externo $f(\tau)$ en las funciones de Bessel en (45) es posible suprimir los valores de \hat{A} o \hat{B} (ya sea de manera simultanea o por separado) así como \hat{C} o \hat{D} . Esto se muestra de manera esquemática en la Fig.1: (a) caso de $\hat{A} = 0$ (curva sólida) y $\hat{B} = 0$ (curva segmentada), (b) caso de $\hat{C} = 0$ (curva sólida) y $\hat{D} = 0$ (curva segmentada). Para el caso de $B = 0$ en (45) sólo quedan los elementos efectivos adimensionales de *hopping* reparametrizado \hat{A} e inducido \hat{B} : $\hat{A} = \sum_n J_{2n} \tilde{J}_n$, $\hat{B} = (\nu/(8\mu)) \sum_{n \neq 0} \sum_{m,r} n^{-2} J_{n-2m} J_{-n-2r} \tilde{J}_m \tilde{J}_r$; la Fig.1(c) muestra los casos de $\hat{A} = 0$ (curva sólida) y $\hat{B} = 0$ (curva segmentada). Esta figura coincide *exactamente* con la que reportan Itin & Katsnelson (2015) que fue obtenida con el formalismo cuántico. Para el caso del campo externo con la forma más simple $f(\tau) = 2f_1 \cos \tau$, los elementos de *hopping* efectivos en (45) se simplifican como:

$$\begin{aligned}
\hat{A} &= J_0 - \nu \sum_{n \neq 0} n^{-2} J_n \tilde{J}_n, \\
\hat{B} &= \mu \tilde{J}_0 + \frac{\nu}{8\mu} \sum_{n \neq 0} n^{-2} J_n J_{-n}, \\
\hat{C} &= \frac{\nu}{2} \sum_{n \neq 0} n^{-2} J_n \tilde{J}_{-n}, \\
\hat{D} &= \frac{\mu\nu}{2} \sum_{n \neq 0} n^{-2} \tilde{J}_n \tilde{J}_{-n}, \tag{46}
\end{aligned}$$

donde las funciones de doble argumento $\tilde{J}_n \equiv J_n(4f_1/\omega)$ se obtuvieron aplicando la fórmula de duplicación para funciones de Bessel, $\sum_k J_k(\xi) J_{n-k}(\xi) = J_n(2\xi) \equiv \tilde{J}_n$, a las expresiones $G_m \equiv \sum_n F_n F_{n-m}$ en (43).

En la Fig.2 observamos la dependencia de los elementos de *hopping* en (46) en la intensidad $2f_1$ del campo; en particular, observamos la supresión de los elementos de *hopping*, aunque no de manera simultánea, para valores específicos de $2f_1$. De hecho, los ceros de $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \hat{D}$ en la Fig.2 corresponden a

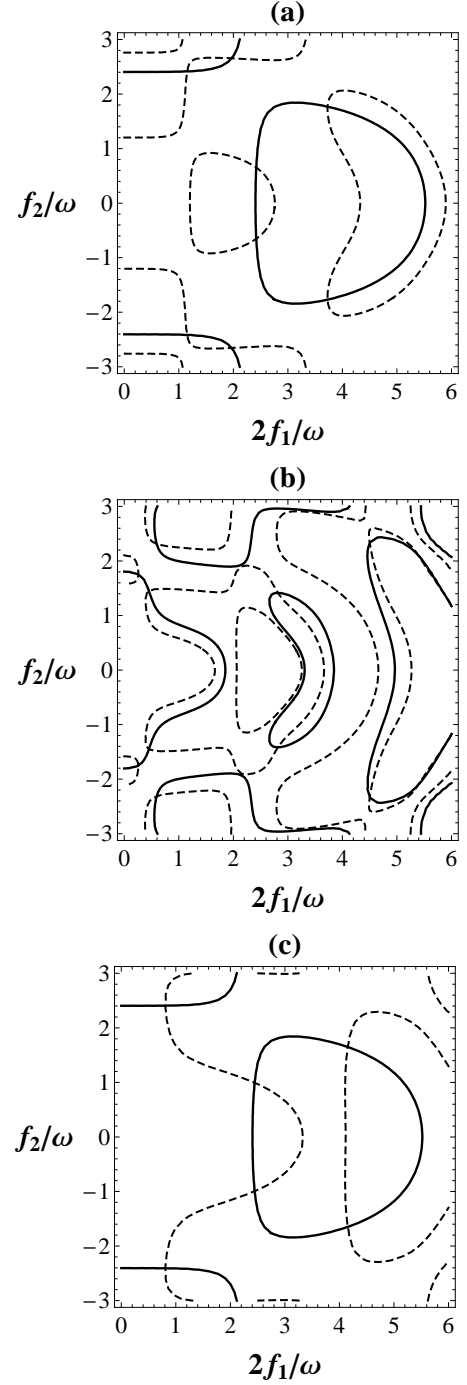


FIG. 1.— Regiones de supresión de los elementos de *hopping* adimensionales efectivos para los parámetros f_1 y f_2 del campo externo forzador $f(\tau) = 2f_1 \cos \tau + 2f_2 \cos 2\tau$: (a) $\hat{A} = 0$ (curva sólida) y $\hat{B} = 0$ (curva segmentada); (b) $\hat{C} = 0$ (curva sólida) y $\hat{D} = 0$ (curva segmentada); (c) $\hat{A} = 0$ (curva sólida) y $\hat{B} = 0$ (curva segmentada) para el caso de $B = 0$ en el hamiltoniano extendido (1).

las intersecciones de ambas curvas, sólida y segmentada, con la línea horizontal $f_2 = 0$ en la Fig.1. Para el caso de $B = 0$, los únicos elementos de *hopping* efectivos adimensionales reparametrizados e inducidos son $\hat{A} = J_0$ y $\hat{B} = (\nu/(8\mu)) \sum_{n \neq 0} n^{-2} J_n J_{-n}$, cuya dependencia en $2f_1$ se grafica en la Fig.3.

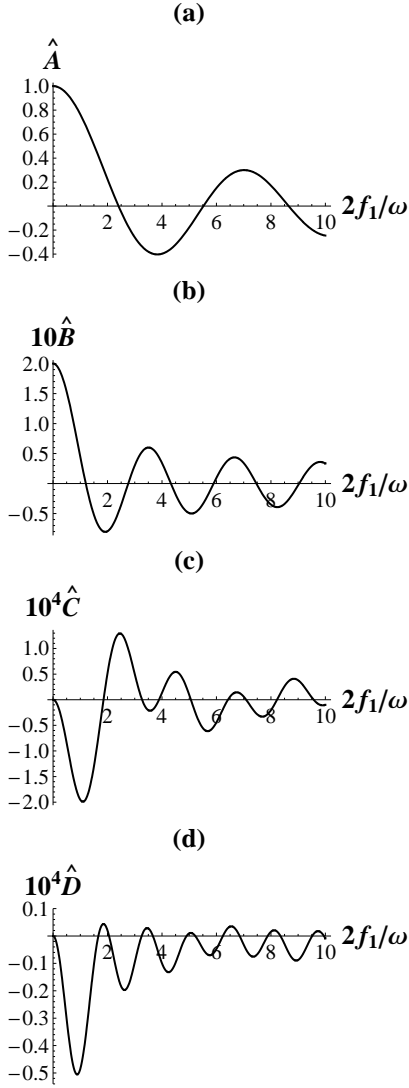


FIG. 2.— Variación de los elementos de *hopping* efectivos adimensionales \hat{A} , \hat{B} , \hat{C} , \hat{D} para el parámetro $2f_1$ del campo forzador externo $f(\tau) = 2f_1 \cos \tau$.

En la Fig.4 diseñamos 14 gráficos que proveen una ayuda visual para la “ingeniería de interacciones” descrita en esta sección. La Fig.4(a) representa todos los elementos de *hopping* considerados en nuestro trabajo: A , B en el hamiltonian extendido (1) y \tilde{A} , \tilde{B} , \tilde{C} , \tilde{D} en el hamiltonian efectivo (42). El modelo de red de la Fig.4 consiste de 5 átomos donde el átomo del extremo izquierdo está localizado en el sitio $n = 0$. En la mitad superior de la red están representados A , B por las trayectorias que conectan $n = 0$ con los sitios $n = 1, 2$, respectivamente, mientras que en la mitad inferior de la red están representados \tilde{A} , \tilde{B} , \tilde{C} , \tilde{D} por las trayectorias que conectan $n = 0$ con los sitios $n = 1, 2, 3, 4$, respectivamente. Así, podemos establecer la siguiente lista de correspondencias:

- Fig.1 \rightarrow Fig.4(a),
- Fig.1(a)-curva slida \rightarrow Fig.4(b),
- Fig.1(a)-curva segmentada \rightarrow Fig.4(c),
- Fig.1(a)-puntos de intersección \rightarrow Fig.4(d),
- Fig.1(b)-curva slida \rightarrow Fig.4(e),

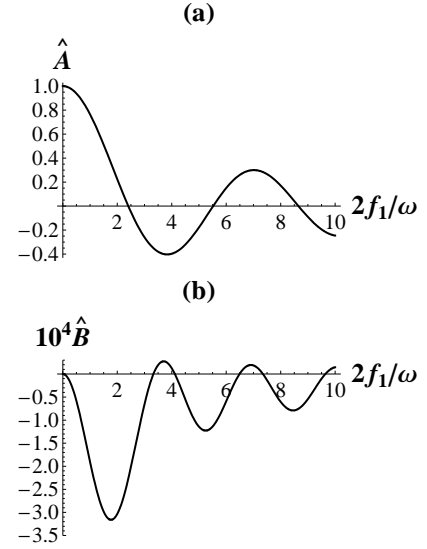


FIG. 3.— Variación de los elementos de *hopping* efectivos adimensionales \hat{A} , \hat{B} para el parámetro $2f_1$ del campo externo forzador $f(\tau) = 2f_1 \cos \tau$ para el caso de $B = 0$ en el hamiltoniano extendido (1).

- Fig.1(b)-curva segmentada \rightarrow Fig.4(f),
- Fig.1(b)-puntos de intersección \rightarrow Fig.4(g),
- Fig.1(c) \rightarrow Fig.4(k),
- Fig.1(c)-curva slida \rightarrow Fig.4(l),
- Fig.1(c)-curva segmentada \rightarrow Fig.4(m),
- Fig.2 \rightarrow Fig.4(a),
- Fig.2-puntos de cruce con el eje horizontal \rightarrow Fig.4(b, c, e, f),
- Fig.3 \rightarrow Fig.4(k),
- Fig.3(a)-puntos de cruce con el eje horizontal \rightarrow Fig.4(l),
- Fig.3(b)-puntos de cruce con el eje horizontal \rightarrow Fig.4(m).

El caso más sencillo y no trivial para el que podemos probar nuestros resultados y que tiene un significado intuitivo para la ingeniería de interacciones es la “oscilación efectiva de Bloch”, que corresponde a la combinación de un campo externo estático lineal $U(X) = \alpha X$ y un campo forzador $f(\tau) = 2f_1 \cos(\tau)$. En este caso se obtiene los elementos de *hopping* $\hat{A} = J_0$ y $\hat{B} = \mu \sum_n J_n J_{-n}$ en (45) (con $\nu = 0$), y de aquí el hamiltoniano efectivo $H(X, Y) = -2AJ_0(2f_1/\omega) \cos Y - 2BJ_0(4f_1/\omega) \cos 2Y + \alpha X$ en (42). Las ecuaciones de movimiento (38) y (40) para X y Y son

$$\begin{aligned} \dot{X} &= 2AJ_0(2f_1/\omega) \sin Y + 4BJ_0(4f_1/\omega) \sin 2Y, \\ \dot{Y} &= -\alpha, \end{aligned} \quad (47)$$

cuya solución es

$$\begin{aligned} X(t) &= \frac{2A}{\alpha} J_0(2f_1/\omega) [\cos(\omega_B t) - 1] \\ &\quad + \frac{2B}{\alpha} J_0(4f_1/\omega) [\cos(2\omega_B t) - 1], \end{aligned} \quad (48)$$

para las condiciones iniciales $X(0) = Y(0) = 0$ y con $\omega_B = 2\pi/\tau_B \equiv |\alpha|$ la frecuencia usual de la

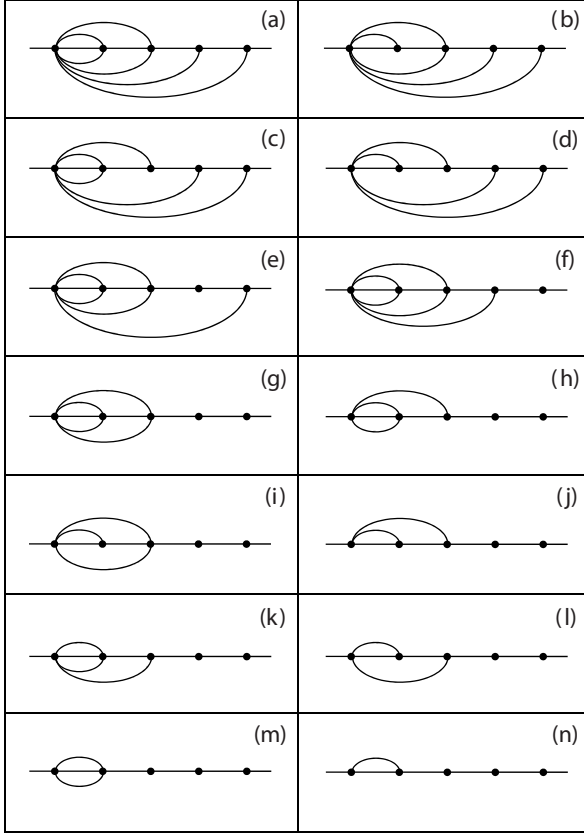


FIG. 4.— Gráficos para el esquema de “ingeniería de interacciones” (descrito en la sección 3) para un modelo de red de 5 átomos (el átomo del extremo izquierdo está localizado en el sitio $n = 0$). En la mitad superior de la red se representan A, B por las trayectorias que conectan $n = 0$ con los sitios $n = 1, 2$, respectivamente, mientras que en la mitad inferior de la red se representan $\tilde{A}, \tilde{B}, \tilde{C}, \tilde{D}$ por las trayectorias que conectan $n = 0$ con los sitios $n = 1, 2, 3, 4$, respectivamente. El gráfico (a) representa todos los elementos de *hopping* considerados en este trabajo: A, B en el hamiltonian extendido (1), y $\tilde{A}, \tilde{B}, \tilde{C}, \tilde{D}$ en el hamiltoniano efectivo (42). Una lista de correspondencias con los resultados de nuestro trabajo se establece en la sección 3 donde el caso más relevante es el de la “oscilación efectiva de Bloch”: Fig.5-curva sólida \rightarrow gráfico (i), Fig.5-curva segmentada \rightarrow gráfico (h), Fig.5-curva de puntos y rayas \rightarrow gráfico (g).

oscilación de Bloch para el hamiltonian $H(X, Y) = -2A \cos Y + \alpha X$. La Fig.5 muestra el gráfico de $X(t)$ vs. $t/(4\tau_B)$ para los valores: (a) $2f_1/\omega = \hat{z}_1$ (curva sólida), (b) $2f_1/\omega = \hat{z}_1/2$ (curva segmentada) y (c) $2f_1/\omega = 2\hat{z}_1$ (curva de rayas y puntos); $\hat{z}_1 \cong 2.40483$ es la primera raíz de J_0 . En el caso (a) el primer término de $X(t)$ en (48) se anula y el segundo término describe una oscilación de Bloch efectiva con un elemento *hopping* reparametrizado $\tilde{B} = BJ_0(2\hat{z}_1) \cong -2.24 B$; en el caso (b) el segundo término de $X(t)$ en (48) se anula y el primer término describe una oscilación de Bloch efectiva con un elemento de *hopping* reparametrizado $\tilde{A} = AJ_0(\hat{z}_1/2) \cong 0.85 A$; en el caso (c) el movimiento resultante es una su-

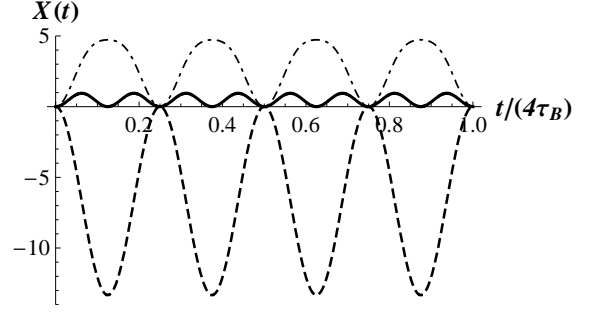


FIG. 5.— Efecto semiclásico de “oscilación efectiva de Bloch” mostrado en los ejes $X(t)$ vs. $t/(4\tau_B)$, para los siguientes valores del campo externo: (a) $2f_1/\omega = \hat{z}_1$ (curva sólida), lo que da lugar a una oscilación efectiva de Bloch con un elemento de *hopping* reparametrizado $\tilde{B} = BJ_0(2\hat{z}_1) \cong -2.24 B$ ($\hat{z}_1 \cong 2.40483$ es la primera raíz de J_0); (b) $2f_1/\omega = \hat{z}_1/2$ (curva segmentada), lo que da lugar a una oscilación efectiva de Bloch con un elemento de *hopping* reparametrizado $\tilde{A} = AJ_0(\hat{z}_1/2) \cong 0.85 A$; (c) $2f_1/\omega = 2\hat{z}_1$ (curva de puntos y segmentos), lo que da lugar a la superposición de los términos oscilatorios en (48). La partícula comienza a moverse en direcciones opuestas en los casos (a) y (b) debido al signo de la *masa efectiva* m^* . En efecto, en el caso (a), $m^* \cong -0.06/B$, mientras que en el caso (b), $m^* \cong 0.6/A$.

perposición de los términos oscilatorios de (48). El movimiento en sentidos opuestos de los casos (a) y (b) se puede relacionar con la definición de *masa efectiva* como $m^* = |\nabla_Y^2 \varepsilon(Y)|^{-1}$ para la energía $\varepsilon(Y)$ asociada al hamiltoniano efectivo $H(X, Y)$ (Ashcroft & Mermin 1976), que en este caso conduce a $m^* = 1/(2(\tilde{A} + 4\tilde{B}))$ para $Y = 0$. En efecto, en el caso (a), $m^* \cong -0.06/B$, mientras que en el caso (b), $m^* \cong 0.6/A$, en consecuencia, la partícula comienza a moverse en direcciones opuestas. Las correspondencias en este caso de la “oscilación de Bloch efectiva” son:

Fig.5-curva sólida \rightarrow Fig.4(i),

Fig.5-curva segmentada \rightarrow Fig.4(h),

Fig.5-curva de puntos y rayas \rightarrow Fig.4(g).

4. SIMULACIÓN NUMÉRICA CUÁNTICA

A continuación usaremos la fórmula iterativa de evolución temporal deducida a partir del algoritmo pseudo-espectral (Sanjinés & Gallinar 2001)

$$C_{\mathbf{R}'}^{p+1} = \sum_{\mathbf{R}} C_{\mathbf{R}}^p \exp[-i(\lambda + \lambda^2 \partial_t)(V_{\mathbf{R}}^p + V_{\mathbf{R}'}^p)] F_{\mathbf{R}-\mathbf{R}'} + O(\lambda^3) \quad (49)$$

(con $C_{\mathbf{R}}^p \equiv C_{\mathbf{R}}(t = p\Delta t)$, $\lambda \equiv \Delta t/2$) para los coeficientes de la expansión de la función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ que se expresa en la base de funciones de Wannier de una banda $\Phi(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ y que están centradas en torno al sitio de la red \mathbf{R} : $\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{R}} C_{\mathbf{R}}(t) \Phi(\mathbf{r} - \mathbf{R})$. Así, la solución de (49) simula la evolución del paquete de ondas electrónico en la red bajo la aproximación de una banda para el hamiltoniano de enlace fuerte $H = T(\mathbf{p}) + V(\mathbf{r}, t)$, donde el operador de energía cinética $T(\mathbf{p} = -i\hbar\nabla) = \sum_{m,n} A_{mn} \exp[i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n)]$ representa el salto (*hopping*) del electrón entre los sitios de la red m y n , con elemento de *hopping* A_{mn} ; la energía potencial $V(\mathbf{r}, t)$ corresponde a las fuerzas externas que actúan sobre el electrón y es diferente del potencial periódico cristalino. En (49) usamos las

definiciones: $V_{\mathbf{R}}^p \equiv V(\mathbf{R}, t = p\Delta t)$, $\partial_t V_{\mathbf{R}}^p \equiv (V_{\mathbf{R}}^{p+1} - V_{\mathbf{R}}^p)/\Delta t$, $F_{\mathbf{R}} \equiv (1/v^*) \int_{1-BZ} \exp[-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R} + 2\lambda T(\mathbf{k}))]$, donde la integral se evalúa en la primera zona de Brillouin ($1-BZ$) con volumen v^* .

Consideremos a continuación el caso del hamiltoniano *extendido* (1) en una red unidimensional (constante de red $a = 1$) con interacciones a primeros y a segundos vecinos (los elementos de *hopping* correspondientes son $A = A_{n\pm 1, n}$, $B = A_{n\pm 2, n}$). A fin de estudiar la “oscilación de Bloch efectiva” descrita en la Sección 3, elijamos una energía potencial lineal $U(x) = \alpha x$ y un campo forzador armónico $f(\omega t) = 2f_1 \cos(\omega t)$ con $\alpha = 8\pi$ y $2f_1 = \omega \hat{z}_1$; la integral F_n para el sitio $R = n$ se evalúa numéricamente para $A = 125$, $B = A/5$ y $\Delta t = 10^{-6}$ (2).

Una vez calculados los coeficientes $C_n(t)$ procedemos a calcular el valor medio de la posición en unidades de la constante de red: $z(t) \equiv \sum_n n |C_n(t)|^2$. Cuando $\omega = 0$ obtenemos una especie de “oscilación extendida de Bloch” que se muestra en la Fig.6(a)-curva sólida y se compara con la oscilación de Bloch mostrada en la Fig.6(a)-curva segmentada (que se obtiene del hamiltoniano $H = -2A \cos p + \alpha x$) con periodo $\tau_B = 2\pi/\alpha$; en todos los casos de la Fig.6 se muestra $z(t)$ vs. $t/(4\tau_B)$ de tal forma que $0 < t/(4\tau_B) < 1$. La Fig.6(b) corresponde a $\omega = 20\omega_B$; el comportamiento dinámico de $z(t)$ an no muestra alguna característica de las predicciones válidas para $\omega \rightarrow \infty$. Las Fig.6(c, d) corresponden a $\omega = 400\omega_B$ y se pueden considerar dentro del rango de validez de $\omega \rightarrow \infty$, permitiendo así la comparación directa entre el valor medio cuántico de la posición $z(t)$ y la coordenada semiclásica de la posición lenta $X(t)$ en (48); en efecto, en la Fig.6(c) se muestra la “oscilación de Bloch efectiva” deducida del hamiltoniano efectivo $H(X, Y) = -2\tilde{A} \cos Y - 2\tilde{B} \cos 2Y + \alpha X$, donde $\tilde{A} = AJ_0(\hat{z}_1) = 0$ y $\tilde{B} = BJ_0(2\hat{z}_1) = -0.24B$. Esto significa que la banda asociada a la interacción a primeros vecinos se suprimió y sólo queda el efecto debido a la interacción a segundos vecinos a través del elemento reparametrizado $\tilde{B} < 0$ que corresponde a una masa efectiva negativa, provocando así el movimiento inicial en la dirección opuesta respecto a la oscilación de Bloch de la curva Fig.6(a)-segmentada; la línea horizontal segmentada representa el valor de referencia $z(0) = 0$. En la Fig.6(d) se tiene una especie de “oscilación de Bloch efectiva extendida” análoga al caso de la Fig.6(a)-curva sólida; los elementos efectivos de *hooping* reparametrizados son $\tilde{A} = AJ_0(2\hat{z}_1) =$

² Estos valores numéricos deben transformarse a las unidades físicas apropiadas (en SI) para propósitos de comparación. Ya que mediremos el tiempo físico en unidades de $4\tau_B$, entonces el tiempo y el elemento de *hopping* a primeros vecinos se transforman como $t \rightarrow t/(4\tau_B)$, $A \rightarrow A(4\tau_B/\hbar) = 125$, así, el ancho de banda que corresponde a la frecuencia típica de la oscilación de Bloch ω_B en el orden de terahertz resulta ser $4A = 0.013$ eV, que es consistente con los anchos de banda reportados en el rango de 1-100 meV en superredes de semiconductores (ver Bouchard & Luban (1995), por ejemplo). De manera similar, $\alpha \rightarrow \alpha(4a\tau_B/\hbar) = 8\pi$, $\omega \rightarrow \omega(4\tau_B)$, $2f_1 = \omega \hat{z}_1 \rightarrow 2f_1(4a\tau_B/\hbar) = \omega(4\tau_B)\hat{z}_1$ y $R = n \rightarrow R = na$.

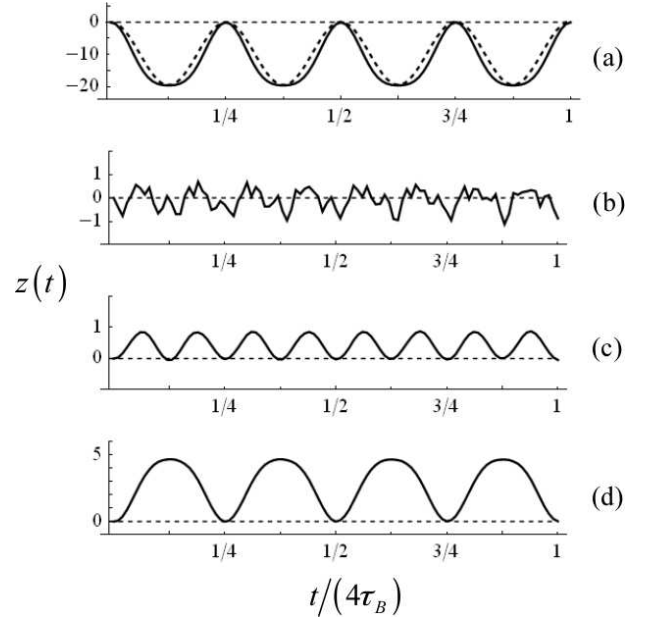


FIG. 6.— Simulación cuántica del efecto de “oscilación de Bloch efectiva” mostrado en los ejes $z(t)$ vs. $t/(4\tau_B)$ en el rango $0 < t/(4\tau_B) < 1$. (a) Caso de $\omega = 0$ que conduce a una oscilación de Bloch extendida (curva sólida) comparada con la oscilación de Bloch comn (curva segmentada), esta última correspondiente al hamiltoniano $H = -2A \cos p + \alpha x$ con periodo $\tau_B = 2\pi/\alpha$. (b) Caso de $\omega = 20\omega_B$ donde aún no se manifiesta alguna característica del límite $\omega \rightarrow \infty$. Los casos (c) y (d) corresponden a $\omega = 400\omega_B$, que ya se puede considerar dentro del rango de validez de $\omega \rightarrow \infty$. En el caso (c) se aprecia la “oscilación de Bloch efectiva” con una masa efectiva negativa. El caso (d) muestra una especie de “oscilación de Bloch efectiva extendida” donde la masa efectiva negativa que resulta se contrasta con el caso de (a)-curva sólida.

$-0.24A$ y $\tilde{B} = BJ_0(4\hat{z}_1) = -0.21B$, donde la masa efectiva negativa que resulta se puede contrastar con el caso de la Fig.6(a)-curva sólida.

5. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En este trabajo usamos un método inspirado en el método original desarrollado por Kapitza (1951) para calcular un hamiltoniano independiente del tiempo correspondiente al hamiltoniano *extendido* dado en (1). Este cálculo se realizó usando el modelo semiclásico dado por las ecuaciones de movimiento de Hamilton para las coordenadas de posición y momento. El resultado central de nuestro trabajo es la deducción de la expresión (42) para el hamiltoniano efectivo $H(X, Y)$ junto con el escenario para una “ingeniería de interacciones” propuesto en la sección 3, en particular, para la supresión controlada de la interacción a primeros vecinos que deja como efecto dominante la interacción a segundos vecinos (Fig.1a). Proponemos como un efecto observable deducido de tal ingeniería de interacciones una “oscilación efectiva de Bloch” con una masa efectiva resultante que es negativa para ciertos parámetros del campo forzador externo (Fig.5); la validez y consistencia de este fenómeno se confirmó teóricamente usando el formalismo cuántico (sección 4).

La validez del resultado para $H(X, Y)$ se puede comprobar sometiénolo a algunas pruebas;

suponemos por simplicidad un campo forzador de la forma $f(\tau) = 2f_1 \cos \tau$ pues, además, podemos así comparar nuestros resultados con los de otros trabajos. Una prueba trivial consiste de tomar el límite $\omega \rightarrow \infty$; en este caso podemos ver que los elementos de *hopping* \tilde{C} y \tilde{D} se eliminan, dando así por resultado el hamiltoniano (1) sin campo oscilatorio, como debe ser. Otra prueba consiste de tomar $B = 0$ en $H(X, Y)$ para obtener

$$H(X, Y) = -2\tilde{A} \cos Y - 2\tilde{B} \cos 2Y + U(X), \quad (50)$$

con elementos de *hopping* adimensionales $\hat{A} = J_0$, $\hat{B} = (\nu/(8\mu)) \sum_{n \neq 0} n^{-2} J_n J_{-n}$. Este resultado es interesante: el elemento de *hopping* inducido \tilde{B} da cuenta de la interacción a segundos vecinos que surge por el efecto combinado del campo rápidamente oscilante promediado y un potencial estático no-uniforme, que en este caso es parabólico: $U(X) = kX^2/2 \rightarrow \nu/(8\mu) = Ak/(2\omega^2)$. Tal efecto fue reportado recientemente en (Itin & Neishtadt 2014; Itin & Katsnelson 2015) donde los autores usaron la misma técnica de promediación temporal (como hicimos nosotros) aplicada a un hamiltoniano cuántico. Otra prueba consiste de elegir $A = 0$ en $H(X, Y)$, lo que conduce a

$$H(X, Y) = -2\tilde{B} \cos 2Y - 2\tilde{D} \cos 4Y + U(X), \quad (51)$$

con elementos de *hopping* adimensionales $\hat{B} = \tilde{J}_0$, $\hat{D} = (\mu\nu/2) \sum_{n \neq 0} n^{-2} \tilde{J}_n \tilde{J}_{-n}$. La comparación de los hamiltonianos efectivos dados por (50) y (51) muestra que (51) se puede obtener de (50) duplicando el valor de la constante de red, $a \rightarrow 2a$ (que elegimos como $a = 1$ en (1)); ésta es una consecuencia directa de la simetría traslacional de la red infinita.

Para la última prueba extendemos el orden de la expansión en serie en (16) de manera consistente hasta $\epsilon^4 = \omega^{-4}$; éste es ciertamente un ejercicio algebraico tedioso, aún para el caso particular de $B = 0$. El resultado es

$$\begin{aligned} \hat{A} &= J_0 - \frac{1}{2} \left(\frac{\nu}{4\mu} \right)^2 \sum_{(n,m) \neq 0} (nm)^{-2} (2 - (-1)^m) J_n J_m J_{n-m}, \\ \hat{B} &= \frac{\nu}{8\mu} \sum_{n \neq 0} n^{-2} J_n J_{-n}, \\ \hat{C} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\nu}{4\mu} \right)^2 \sum_{(n,m) \neq 0} (nm)^{-2} J_n J_{-m} J_{m-n}, \\ \hat{D} &= 0. \end{aligned} \quad (52)$$

Podemos verificar la consistencia de (46) y (52) haciendo $B = 0$ en (46) y descartando los términos del orden de ϵ^4 en (52); esto conduce a los resultados usuales: $\hat{A} = J_0$, $\hat{B} = \nu/(8\mu) \sum_{n \neq 0} n^{-2} J_n J_{-n}$, $\hat{C} = 0$ y $\hat{D} = 0$. Como un resultado colateral para este caso, y a manera de una comprobación cruzada de nuestros

resultados, deducimos de (38) y (40) las ecuaciones de movimiento para $X(t)$ y $Y(t)$:

$$\dot{X} = 2A \left(1 - \frac{1}{2} \sum_{n \neq 0} \frac{f_n^2}{n^2 \omega^2} \right) \sin Y, \quad \dot{Y} = -U'(X), \quad (53)$$

donde usamos el resultado dado en (31). Estas ecuaciones resultan ser iguales a las que reportan en Martínez et al. (2014), aunque sus resultados se obtuvieron sin invocar la transformación del “momentum desplazado” dada por (4).

En este trabajo consideramos expansiones perturbativas hasta órdenes de ϵ^2 y ϵ^4 a fin de obtener resultados consistentes. Una expansión sólo hasta el orden de ϵ sería insuficiente, por ejemplo, en (31) donde F_0 es el factor responsable del colapso de la banda a primeros vecinos en (43) cuando se cumple la condición de que $2f_1/\omega$ sea igual a una raíz de J_0 (régimen de localización dinámica). Como se puede verificar en (31), la expansión hasta ϵ da $F_0 = 1$ lo que es incorrecto pues la banda nunca colapsaría, revelando así la necesidad de expandir las series al menos hasta ϵ^2 para obtener resultados correctos. La insuficiencia de la expansión hasta ϵ también está referida en Longhi (2008) donde el formalismo cuántico también muestra la evidencia de resultados incorrectos para la dinámica de tunelamiento electrónico en arreglos de pozos múltiples.

6. CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS

En este trabajo se dedujo, dentro de la aproximación semiclásica, un hamiltoniano efectivo $H(X, Y)$ correspondiente a una partícula cargada que se mueve a saltos (*hopping*) en una red en presencia de un campo estático arbitrario y un campo uniforme rápidamente oscilante. Nuestros resultados comprenden aquellos reportados recientemente por Itin & Neishtadt (2014) y Itin & Katsnelson (2015), que fueron calculados usando el formalismo cuántico; nuestros resultados también comprenden aquellos reportados en Martínez et al. (2014) para las ecuaciones semiclásicas de movimiento que describen el movimiento lento de las coordenadas de posición y momentum desplazado, X y Y . Propusimos a manera de un resultado novedoso, la observación de un efecto de “oscilación efectiva de Bloch” que surge de la supresión controlada de la interacción a primeros vecinos y deja a la interacción a segundos vecinos como un efecto dominante asociado a una partícula de masa efectiva negativa para valores específicos del campo forzador. Debe mencionarse que en trabajos recientes (Reich et al. 2002; Kundu 2011; Wright et al. 2009; Kadirko et al. 2013) las interacciones de largo alcance en una red se consideran refinamientos perturbativos a la interacción dominante a primeros vecinos. De manera notable, y en completo acuerdo con nuestros resultados, en Madison et al. (1998) se reportó la observación de la *cuasi* supresión de la banda a primeros vecinos en una red óptica donde

la supresión completa no se logra alcanzar debido a acoplamientos con vecinos distantes y a la presencia de varias bandas.

Como perspectivas interesantes de nuestro trabajo podemos mencionar: (i) La posibilidad de extender nuestros resultados para incluir los de Martínez et al. (2014) hasta el orden de $O(\omega^{-4})$, y así probar las similitudes entre el régimen del continuo y el régimen discreto de la red, que en Martínez et al. (2014) son referidos como un asunto aún desconocido. (ii) Una extensión natural de nuestro trabajo es considerar un hamiltoniano *extendido* generalizado con una relación de dispersión de la forma $2\sum_n A_n \cos nap$, pues se sabe que la incorporación de interacciones de largo alcance en el hamiltoniano conduce a efectos interesantes como ser la supresión de los elementos efectivos de *hopping* para campos externos forzadores específicos. (iii) El estudio de la “ingeniería de interacciones” mediante el control de parámetros físicos tales como la forma del potencial estático $U(x)$ o la dependencia temporal del campo uniforme $f(\omega t)$ en (1); encontramos en nuestro trabajo que dentro de la aproximación de $O(\omega^{-2})$, la forma relevante del potencial estático debe ser lineal ($U(X) = \alpha X$) o parabólica ($U(X) = kX^2/2$); sin embargo, es posible que refi-

nando los resultados hasta el orden de $O(\omega^{-n})$ para $n > 2$, el potencial estático $U(X)$ pueda depender de potencias mayores de X . (iv) Se debe investigar otras formas de campos externos forzadores $f(\tau)$ con componentes de Fourier arbitrarias, en vista de que el campo con dos componentes $f(\tau) = 2f_1 \cos(\tau) + 2f_2 \cos(2\tau)$ considerado en este trabajo conduce a efectos físicos relevantes. (v) Sugerimos que un efecto físico observable en el contexto de la ingeniería de interacciones es la “oscilación de Bloch efectiva” (para un potencial estático lineal) donde el comportamiento dinámico de la posición semiclásica $X(t)$ y del correspondiente valor esperado cuántico $\langle x \rangle_t$ son idénticos; el grado de coincidencia numérica entre esas dos coordenadas dinámicas para campos estáticos arbitrarios es un tema interesante por investigar.

AGRADECIMIENTOS

Agradecemos sinceramente a: Dr. César Flores (IAI-UTA, Chile), Dr. Luis A. Martínez y Dr. Jean-Pierre Gallinar (USB, Venezuela) por las discusiones interesantes y estimulantes.

Conflicto de intereses

Los autores declaran que no hay conflicto de intereses con respecto a la publicación de éste documento.

REFERENCIAS

- Ashcroft N. & Mermin N. (1976), *Solid State Physics* (Holt, Rinehart and Winston)
- Bandyopadhyay M. & Dattagupta S. (2008), *Pramana J. Phys.*, **70**: 381
- Bouchard A. M. & Luban M. (1995), *Phys. Rev. B*, **52**: 5105
- Dreisow F., Bahat-Treidel O., Welt D. & Szameit A. (2011), *Opt. Lett.*, **36**: 2065
- Dunlap D. H. & Kenkre V. M. (1986), *Phys. Rev. B*, **34**: 3625
- Itin A. P. & Katsnelson M. I. (2015), *Phys. Rev. Lett.*, **115**: 075301
- Itin A. P. & Neishtadt A. (2014), *Phys. Lett. A*, **378**: 822
- Kadirko V., Ziegler K. & Kogan E. (2013), *Graphene*, **2**: 97
- Kapitza P. L. (1951), in *Collected Papers of P. L. Kapitza*, ed. D. ter Haar (Zh. Eksp. Teor. Fiz.), 588
- Kundu R. (2011), *Mod. Phys. Lett. B*, **25**: 163
- Landau L. D. & Lifschitz E. M. (1985), *Mecánica* (Reverté)
- Lenz G. (1999), *Phys. Rev. Lett.*, **83**: 963
- Longhi S. (2007), *Phys. Rev. B*, **76**: 195119
- (2008), *Phys. Rev. B*, **77**: 195326
- (2009), *Laser & Photon. Rev.*, **3**, 243
- Longhi S., Marangoni M., Lobino M., Ramponi R., Laporta P. Cianci, E. & Foglietti V. (2006), *Phys. Rev. Lett.*, **96**: 243901
- Longhi S., Dreisow F., Heinrich M., Pertsch T., Tünnermann A., Nolte S. & Szameit A. (2010) *Phys. Rev. A*, **82**: 053813
- Madison K. W., Fischer M. C., Diener R. B., Niu Q. & Raizen M. G. (1998), *Phys. Rev. Lett.*, **23**: 5093
- Marte M. & Stenholm S. (1997), *Phys. Rev. A*, **56**: 2940
- Martínez L. A., Sanjinés D. & Gallinar J.-P. (2014), *Int. J. Mod. Phys. B*, **28**: 1450173
- Rahav S., Gilary I. & Fishman S. (2003), *Phys. Rev. A*, **68**: 013820
- Reich S., Maultzsch J., Thomsen C. & Ordejón P. (2002), *Phys. Rev. B*, **66**: 035412
- Sanjinés D. & Gallinar J.-P. (2001), *Phys. Rev. B*, **64**: 054301
- Wright A. R., Liu F. & Zhang C. (2009), *Nanotechnology*, **20**(40): 405203