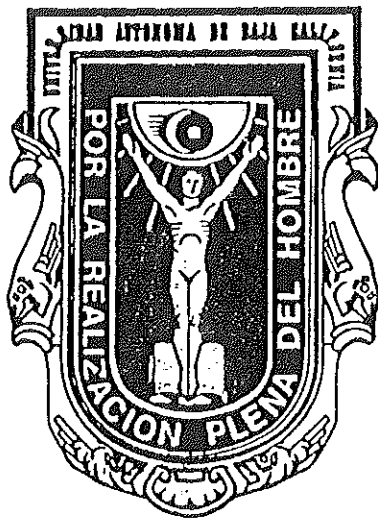


UNIVERSIDAD AUTONOMA DE BAJA CALIFORNIA

ESCUELA SUPERIOR DE CIENCIAS

CARRERA DE FISICO



ESTUDIOS ACERCA DE LAS ESCALERAS DE STARK

TESIS PROFESIONAL

QUE COMO REQUISITO PARCIAL PARA OBTENER EL TITULO DE

FISICO

PRESENTA:

JORGE ALBERTO VILLAVICENCIO AGUILAR.

UNIVERSIDAD AUTONOMA DE BAJA CALIFORNIA.

ESCUELA SUPERIOR DE CIENCIAS.

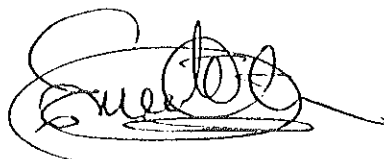
ESTUDIOS ACERCA DE LAS ESCALERAS DE STARK.

TESIS PROFESIONAL

QUE PRESENTA:

JORGE ALBERTO VILLAVICENCIO AGUILAR

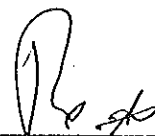
APROBADO POR:



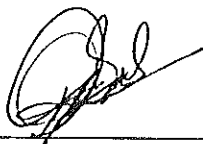
DR. ERNESTO COTA ARAIZA.
PRESIDENTE DEL JURADO



DR. LEONEL COTA ARAIZA.
SINODAL



DR. JOSE ALBERTO RUBIO M.
SINODAL



DR. D. HOMERO GALVAN.
SINODAL



DR. DR. JESUS MA. SIQUEIROS B.
SECRETARIO

A mis padres, Jorge y Julia Villavicencio.

A Julissa

A la memoria de Eulalia.

Agradezco las facilidades prestadas por el IFUNAM y el CICESE para la realización de este trabajo, así como el apoyo brindado por CONACYT mediante el programa de becas-crédito de licenciatura.

Expreso mi sincero aprecio a Ernesto Cota A. por haber dirigido ésta tesis, y por su generosa ayuda y apoyo durante mi formación profesional.

Es una gran satisfacción expresar mi agradecimiento a Roberto Romo M. por sus constructivas discusiones durante el desarrollo de este trabajo.

Ramón, José Luis y Yoly, gracias por su amistad.

RESUMEN.

En el presente trabajo se realiza un estudio bibliográfico acerca del problema del movimiento de un electrón en un potencial periódico en presencia de un campo eléctrico homogéneo, lo que resulta en una estructura periódica en el espectro de niveles de energía del electrón, conocida como Escaleras de Stark. Se discute la existencia de las escaleras de Stark mediante el formalismo de Hamiltonianos Equivalentes, considerado como el enfoque antiguo del problema, para concluir con el enfoque actual que es la interpretación de estas como resonancias, estudiando además la posibilidad de observarlas experimentalmente en heteroestructuras.

Finalmente, se presentan resultados obtenidos numéricamente a partir de un modelo unidimensional de potenciales delta.

ABSTRACT.

In the present work we review the problem of the motion of an electron in a periodic potential in the presence of a homogeneous electric field, which results in a periodic structure in the electron energy spectrum, known as Stark ladders. The existence of Stark ladders is discussed by means of effective Hamiltonian theories, considered as the old approach of the problem, and concluding with the modern approach which interprets them as resonant states, studying in addition the possibility of experimentally observing them in heterostructures.

Finally we present numerical results based on a one-dimensional model of delta function potentials.

INDICE.

Capítulo I.- Introducción.....	1
Capítulo II.- Conceptos Básicos.	
§2.1.-Consecuencias de la invariancia traslacional en cristales.....	5
§2.2.-Representación de Wannier.....	7
§2.3.-Teoría de Hamiltonianos equivalentes.....	12
Capítulo III.-Escaleras de Stark en Cristales.	
§3.1.-La aproximación cuasiclásica.....	19
§3.2.-Escaleras de Stark en la representación de Wannier.....	23
a.-El Hamiltoniano Efectivo.....	24
b.-Escaleras de Stark.....	26
Capítulo IV.- Interpretación Actual de las Escaleras de Stark.	
§4.1.-Escaleras de Stark como estados metaestables.....	30
§4.2.-Escaleras de Stark en superredes.....	35
a.-Minibandas de energía en la aproximación de Amarre Fuerte.....	37
b.-Escaleras de Stark en la aproximación de una banda.....	40
c.-Localización espacial de las funciones de onda.....	44
§4.3.-Evidencias Experimentales sobre la existencia de las escaleras de Stark.....	47
Capítulo V.- Cálculo Numérico.....	54
Capítulo VI.- Conclusiones.....	67
Bibliografía.-.....	69

Apéndices.

A.-Escaleras de Stark en la representación G.M.R.....	71
B.-Operación de x sobre las funciones de Wannier.....	76
C.-Evolución temporal de las funciones de Bloch.....	78

CAPITULO I.

INTRODUCCION.

Desde que el formalismo de la mecánica cuántica fué introducido para describir la dinámica de electrones en sólidos, el problema de electrones de Bloch en presencia de un campo eléctrico homogéneo ha resultado extremadamente difícil de tratar. El estudio de las propiedades de la ecuación de Schrödinger para este tipo de sistemas se puede remontar hasta la década de los treinta con las aportaciones de Bloch^[1], C.Zenner^[2] y W.V.Houston^[3]. En 1949 Slater^[4] utilizando teoría de representaciones y basado en los resultados de Wannier^[5] introduce el concepto de Hamiltonianos efectivos para estudiar el movimiento de electrones en presencia de perturbaciones externas, estableciendo las bases para estudios posteriores de este problema. Dentro de este contexto en la década de los años sesenta, G.H.Wannier^[5-8] argumenta que para el problema de un electrón moviéndose en un potencial periódico de la red cristalina ($V(x)=V(x+a)$) en presencia de un campo eléctrico \mathcal{E} y utilizando la aproximación de una banda, el cuasicontínuo de estados que forman la banda de energía (en ausencia de \mathcal{E}), se reemplaza por una serie de niveles de energía separados por $\Delta E=e\mathcal{E}a$ al aplicarse el campo eléctrico, resultado conocido como las escaleras de Stark.

Estos resultados fueron obtenidos simultáneamente por E.O.Kane⁽⁹⁾ en la representación C.M.R. (Crystal Momentum Representation). La existencia de esta estructura en el espectro de niveles de energía se vió inmersa en una controvertida discusión entre J.Zak^(10, 11) y G.H. Wannier^(12,13) finalizando hasta en 1983 con los estudios numéricos efectuados por Bentosela *et al.*⁽¹⁴⁾ quien demostró que los resultados obtenidos originalmente por Wannier eran esencialmente correctos. El estudio de las escaleras de Stark dentro de la teoría de representaciones se puede considerar como el enfoque antiguo del problema. Posteriormente surgieron dos principales líneas de investigación del problema: el estudio en sistemas multibandas efectuado por Fukuyama⁽¹⁵⁾, Saitoh⁽¹⁶⁾ y L.McKinnon⁽¹⁷⁾ y la interpretación de las escaleras de Stark como estados metaestables debida a J.Avron⁽¹⁸⁾ y Bentosela *et al.*⁽¹⁴⁾. Sin embargo, en el terreno experimental las escaleras de Stark distaban mucho de ser observadas en estructuras cristalinas no obstante las evidencias experimentales presentadas a favor de su existencia por Callaway⁽¹⁹⁾ y Koss *et al.*⁽²⁰⁾, quienes reportaron la manifestación del fenómeno a manera de oscilaciones en el coeficiente de absorción óptica de un dispositivo semiconductor de GaAs. El problema para observar las escaleras estriba en que para cristales típicos la

separación de los niveles de las escaleras es muy pequeña en comparación con las dimensiones de la banda de energía. Si se desea que los efectos de la red periódica y el potencial debido al campo eléctrico sean comparables, es necesario aplicar campos eléctricos muy intensos lo que resulta experimentalmente muy complicado. Es curioso que aunque en 1970 L. Esaki⁽²¹⁾ introdujo el concepto de superred semiconductor para estudiar tunelaje resonante, la introducción de este tipo de estructuras para el estudio de las escaleras fué considerado hasta en la década de los ochenta por Voisin *et al.*⁽²²⁾ quien establece la posibilidad de observarlas en superredes, siendo verificado experimentalmente por Méndez *et al.*⁽²³⁾. Esto se debe esencialmente a que en este tipo de estructuras aparecen las llamadas minibandas de energía cuyas dimensiones son tales que hacen posible la existencia de las escaleras de Stark para valores del campo eléctrico accesibles experimentalmente.

El objetivo de esta tesis es realizar una revisión bibliográfica del problema de las Escaleras de Stark para tener un panorama actualizado. Con el propósito de que este trabajo sea autocontenido es necesario hacer un repaso de conceptos básicos de mecánica cuántica y teoría cuántica de sólidos, como teoría de representaciones y teoría de Hamiltonianos Equivalentes, de los cuales hacemos una

revisión en el capítulo II. En base a estos formalismos, en el capítulo III se obtienen las escaleras de Stark en la representación de Wannier haciendo uso de la aproximación cuasiclásica y comparando los resultados con la versión cuántica.

En el capítulo IV se estudia la evolución de los formalismos, hasta llegar a la interpretación de las escaleras de Stark como estados metaestables, que es la aceptada actualmente. Además, se realiza un revisión del fenómeno en superredes semiconductoras en virtud de que resultados experimentales confirman su existencia en heteroestructuras. Finalmente en el capítulo V se efectúa un cálculo numérico a partir de un modelo unidimensional para obtener las escaleras de Stark.

CAPITULO II.

CONCEPTOS BASICOS.

Comprender el fenómeno de las escaleras de Stark en cristales exige un conocimiento previo de la dinámica de electrones en campos externos. El aspecto dinámico generalmente se estudia empleando Teoría de Hamiltonianos Equivalentes de una manera muy similar a los desarrollos realizados originalmente por Slater⁽⁴⁾. Analizaremos la teoría de Hamiltonianos Equivalentes en las representaciones de Wannier y C.M.R (Crystal Momentum Representation). La primera es muy importante ya que gracias a ella se predice por primera vez la existencia de las escaleras de Stark y la segunda representa un enfoque alternativo matemáticamente más simple.

El material que se presenta a continuación puede ser encontrado en cualquier libro estándar de teoría del estado sólido⁽²⁴⁻³²⁾ y mecánica cuántica y se incluye en este trabajo con la finalidad de hacerlo autocontenido.

§ 2.1.-CONSECUENCIAS DE LA INVARIANCIA TRASLACIONAL.

Definiremos una red cristalina infinita como un medio infinito que posee simetría traslacional. En virtud de esta simetría, cada punto de una celda elemental puede compararse con uno equivalente correspondiente a otra celda elemental. La posición de estos puntos se caracteriza por el vector de la red,

$\vec{\rho} = l\vec{a} + m\vec{b} + n\vec{c}$ donde: l, m y n , son enteros y el conjunto de vectores \vec{a} , \vec{b} y \vec{c} forman una red espacial.

A continuación estableceremos algunas de las propiedades generales de los eigenvalores y eigenfunciones de Hamiltonianos invariantes ante traslaciones por un vector $\vec{\rho}$ de la red.

Para Hamiltonianos periódicos toda función físicamente significativa de \vec{k} debe ser periódica en el espacio recíproco y puede expandirse en series de Fourier, en general:

$$f(\vec{k}) = \sum_{\rho} \varphi(\vec{\rho}) \cdot \exp[i\vec{k} \cdot \vec{\rho}] \quad (2.1)$$

Las eigenfunciones son funciones de Bloch, las cuales son ondas planas moduladas por un factor $u_n(\vec{x}, \vec{k})$ que guarda la periodicidad de la red,

$$\Psi(\vec{x}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} u_n(\vec{x}, \vec{k}) \quad (2.2)$$

El vector \vec{k} por lo general se expresa en una región finita en el espacio- \vec{k} conocida como la primera zona de Brillouin. En una dimensión esta zona se representa usualmente por un intervalo centrado alrededor de $k=0$ i.e. $-\pi/a \leq k \leq \pi/a$, en donde se encuentran todas las propiedades básicas del espacio- \vec{k} . El número "n" que toma sólo valores enteros se conoce como el índice de banda, y su presencia compensa en cierta forma la restricción de \vec{k} a la primera

zona de Brillouin.

Uno de los resultados más importantes de la invariancia traslacional se refiere al espectro de energías, que consiste en un continuo llamado *banda*, separado por regiones de energías prohibidas conocidas como *brechas*. La estructura de bandas de energía en un sólido se puede ver como la relación que existe entre la energía $E_n(\vec{k})$ y el momento de un electrón en un sólido, y para cada índice de banda en particular, la energía será una función continua y diferenciable de \vec{k} como se puede observar en el caso de un arreglo de pozos de potencial (Fig.1):

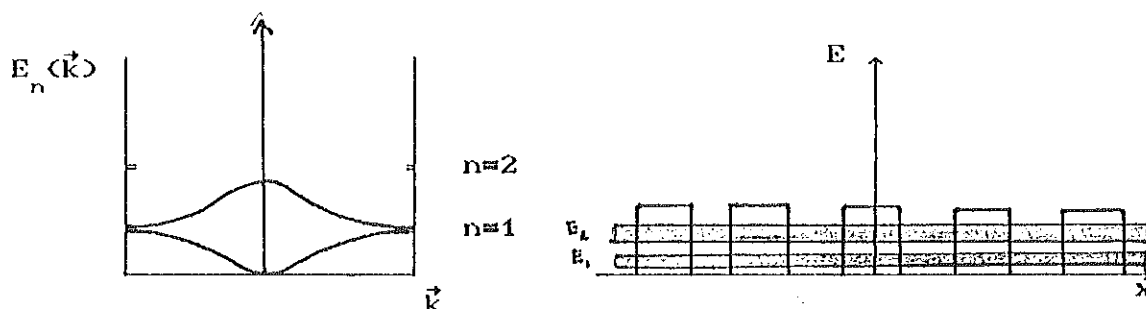


Fig.1.-a) Estructura de bandas en sólidos (esquema reducido).
b) Bandas de energía para una cadena de pozos de potencial.

§2.2.-REPRESENTACION DE WANNIER.

El análisis de las diferentes representaciones permitirá comprender la evolución histórica del problema de las escaleras de Stark desde sus inicios. Históricamente las escaleras de Stark surgen de un modelo basado en la

representación de Wannier^[5,6,8] cuyas funciones base^[99] (conocidas actualmente como *funciones de Wannier*) fueron introducidas en 1937 en el estudio del problema del espectro de energía de un electrón excitado en una banda de energía, permitiendo el uso de estados localizados para describir el sistema. En 1949 Slater^[41] emplea los resultados de Wannier y con este formalismo deriva las ecuaciones de movimiento para un electrón en presencia de perturbaciones externas. Posteriormente Adams^[94] generaliza la representación de Wannier y muestra que el tratamiento puede ser desarrollado de una manera exacta y sencilla en la representación C.M.R.; E.O.Kane^[9] utiliza estos resultados para obtener paralelamente con Wannier las escaleras de Stark. Hay que señalar que la elección de una representación en particular se hace por conveniencia matemática. En esta sección desarrollaremos la representación de Wannier y en el apéndice A, la representación C.M.R.

A continuación analizaremos como se construyen las funciones base en la representación de Wannier y las ventajas que presentan sobre otro tipo de funciones base comúnmente utilizadas, que son las funciones de onda atómicas.

Basaremos el estudio del problema de electrones de Bloch en presencia de campos externos en la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo,

$$\left[\mathcal{H}_0 + U(\vec{x}) \right] \Psi(\vec{x}, t) = i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{x}, t) \quad (2.3)$$

donde \mathcal{H}_0 es el Hamiltoniano que contiene un potencial periódico y $U(\vec{x})$ es la perturbación externa.

Uno pensaría que para describir los efectos dinámicos de un electrón en un cristal bastaría tan sólo construir una función de onda dependiente del tiempo,

$$\Psi(\vec{x}, t) \approx \sum_{\vec{r}} f(\vec{r}, t) \phi_n(\vec{x} - \vec{r}) \quad (2.4)$$

Las $\phi_n(\vec{x} - \vec{r})$ son funciones de onda atómicas localizadas alrededor de la posición atómica \vec{r} y \vec{x} es el vector de posición donde se calcula la función de onda. La función $f(\vec{r}, t)$ juega el papel de una función envolvente. Sin embargo, el problema no es así de sencillo, ya que al obtener una ecuación diferencial para $f(\vec{r}, t)$ nos enfrentamos con el hecho de que las funciones ϕ_n no son ortogonales. Si se construyen dos estados con la misma \vec{k} pero con estados atómicos diferentes, existirán términos de traslape que evitan la ortogonalidad. Para evitar este tipo de problemas se introducen nuevas funciones que son generalizaciones de las funciones de onda atómicas, llamadas *funciones de Wannier*.

Wannier⁽⁹⁹⁾ construyó un nuevo conjunto de funciones a partir de funciones de Bloch que tuvieran la propiedad de ser *localizadas*, contrario a lo que sucede con las funciones de Bloch que están extendidas en todo el cristal. La combinación lineal de las funciones de Bloch para todas las bandas⁽⁹⁰⁾ es la siguiente:

$$\chi_n(\vec{x}, \vec{k}) = \sum_{\vec{k}} \alpha_n(\vec{k}) \Psi_n(\vec{x}, \vec{k}) \quad ; \quad \Psi_n(\vec{x}, \vec{k}) = u_n(\vec{x}, \vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \quad (2.5)$$

donde las $\alpha_n(\vec{k})$ factores de fase de la forma $\alpha_n(\vec{k}) \rightarrow A \exp[-i\vec{k} \cdot \vec{r}]$. La forma exponencial de las $\alpha_n(\vec{k})$ es para regular el factor de fase $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$ que aparece en las funciones de Bloch trasladadas por un vector de la red directa \vec{r} y lograr así que estas se sumen constructivamente. Para lograr que las funciones $\Psi_n(\vec{x}, \vec{k})$ den su contribución máxima en la primera celda unitaria identificada por $\vec{r}=0$, la normalización de las $\chi_n(\vec{x}, \vec{k})$ conduce a que $\alpha = N^{-1/2}$ donde N es el número de celdas unitarias. Cuando esto sucede,

$$\chi_n(\vec{x}, \vec{k}) = a_{n0}(\vec{x}, \vec{k}) = N^{1/2} \sum_{\vec{k}} u_n(\vec{x}, \vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \quad (2.6)$$

Para la j -ésima celda unitaria definimos una función a_{nj} similar donde \vec{r} será un vector de posición que localiza la j -ésima celda unitaria. Esto conduce a la expresión general:

$$\chi_n(\vec{x}, \vec{k}) \longrightarrow a_{nj}(\vec{x}, \vec{k}) = N^{1/2} \sum_{\vec{k}} u_n(\vec{x}-\vec{r}, \vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot (\vec{x}-\vec{r})} \quad (2.7)$$

Estas funciones de Wannier sólo dependen de la posición. Si hacemos $\vec{x} \longrightarrow \vec{x} + \vec{r}$,

$$a_{nj}(\vec{x}+\vec{r}, \vec{k}) = a_{n0}(\vec{x}, \vec{k}) \quad (2.8)$$

Esto significa que la función en la j -ésima celda unitaria se comporta exactamente igual que la función en $\vec{r}=0$. Por lo tanto a_{nj} es función sólo de $\vec{x}-\vec{r}$ y puede ser escrita omitiendo la dependencia en \vec{k} :

$$a_{nj}(\vec{x}) = a_n(\vec{x}-\vec{r}) = N^{-1/2} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \Psi_n(\vec{x}, \vec{k}) \quad (2.9)$$

Si nos alejamos de la celda, $|a_{nj}|$ decrece rápidamente, debido a que existe interferencia destructiva. *Es en este sentido en que a_{nj} está localizada en la j -ésima celda unitaria.*

La condición de ortonormalidad de las funciones de Wannier se sigue de las condiciones usuales para las funciones de Bloch,

$$\int a_m^*(\vec{x}-\vec{r}') a_n(\vec{x}-\vec{r}) d^3\vec{x} = \delta_{mn} \delta_{\vec{r}\vec{r}'} \quad (2.10)$$

Conocidas las propiedades de las funciones de Wannier proponemos una solución para la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (ec.2.3),

$$\Psi(\vec{x}, t) = \sum_{n, \vec{r}} f_n(\vec{r}, t) a_n(\vec{x} - \vec{r}) \quad (2.11)$$

donde $f_n(\vec{r}, t)$ es la función envolvente de las funciones de Wannier. Sustituyendo esta solución en la ecuación (2.3) y multiplicando por $a_n^*(\vec{x} - \vec{r})$ para luego integrar sobre todo el cristal, nos conduce a la ecuación^[24]:

$$\sum_{n, \vec{r}} \left[\delta_{nn'} W_{n, \vec{r}-\vec{r}'} + U_{nn', \vec{r}\vec{r}'} \right] f_n(\vec{r}, t) = i \frac{\partial f_n(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (2.12)$$

donde los elementos de matriz del potencial externo $U(\vec{x})$ están dados por:

$$U_{nn', \vec{r}\vec{r}'} = \int a_n^*(\vec{x} - \vec{r}') U(\vec{x}) a_n(\vec{x} - \vec{r}) d^3x \quad (2.13)$$

y $W_{n, \vec{r}-\vec{r}'}$ es la transformada de Fourier de la energía del caso no perturbado,

$$W_{n, \vec{r}} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} W_n(\vec{k}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (2.14)$$

La ecuación (2.12) es la ecuación de Schrödinger en la representación de Wannier.

§2.3.-TEORIA DE HAMILTONIANOS EQUIVALENTES.

En las secciones anteriores nos ocupamos de las consecuencias de la invariancia traslacional en un cristal y

análisis nos dará el espectro de niveles de energía con separación eña conocido como las *Escaleras de Stark*.

a.- El Hamiltoniano Efectivo.

El Hamiltoniano real del sistema está dado por,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 - e\vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{x} \quad (3.11)$$

donde el Hamiltoniano periódico \mathcal{H}_0 tiene como eigenfunciones a las funciones de Bloch $b_q(\vec{x};\vec{k})$,

$$\mathcal{H}_0 b_q(\vec{x};\vec{k}) = W_q(\vec{k}) b_q(\vec{x};\vec{k}) \quad (3.12)$$

y además, de los resultados de el §2.1, la energía del sistema $W_q(k)$ puede desarrollarse en serie de Fourier,

$$W_q(\vec{k}) = \sum_{\vec{\rho}} w_q(\vec{\rho}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{\rho}} \quad (3.13)$$

donde $\vec{\rho}$ es un vector de la red directa y q el índice de banda. Las funciones de Bloch se pueden expresar en términos de las funciones de Wannier,

$$b_q(\vec{x};\vec{k}) = \sum_{\vec{\rho}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{\rho}} a_q(\vec{x}-\vec{\rho}) \quad (3.14)$$

Ahora se está en posibilidades de operar sobre las funciones de Wannier con el Hamiltoniano de la ec.(3.11),

de las funciones que representan a los electrones moviéndose en potenciales periódicos. El modelo que consideraremos es el de un-electrón, que consiste en tratar a los electrones como partículas independientes moviéndose en un potencial bien definido en el cual se supone están implícitas las interacciones electrón-electrón y las correspondientes al electrón con la red iónica. Un método frecuentemente empleado en la descripción de la dinámica de electrones en cristales es el método de la *masa efectiva*, que cae dentro de un enfoque más general que es el de la teoría de Hamiltonianos Equivalentes. El método consiste en aproximar la relación de dispersión $E(\vec{k})$ del cristal (que en general es una función complicada de \vec{k}) al caso más simple, que es la relación de dispersión parabólica [$E(\vec{k}) \cong |\vec{k}|^2$] típica del electrón libre. Este método permite prescindir del potencial periódico del cristal mediante la introducción del concepto de la masa efectiva⁽²⁷⁾ m^* , reduciendo el problema al de una partícula libre.

La aproximación anterior se extiende al caso de una perturbación externa dependiente de la posición actuando sobre el sistema. En principio también es posible prescindir de la influencia del potencial periódico y reducir el problema al de un electrón libre en presencia de un campo externo.

El Hamiltoniano equivalente en la representación de

Wannier se obtiene a partir de la ecuación (2.12). La solución de la ecuación resultante para la función envolvente $f_n(\vec{r}, t)$ resulta complicada y lo ideal sería convertirla en una ecuación diferencial considerando ya no una función que esté definida en las posiciones atómicas \vec{r} sino una función continua en \vec{x} que se propague a través del cristal i.e. $f_n(\vec{x}, t)$. Esto es posible si consideramos el argumento de plausibilidad que consiste en analizar las propiedades del operador $W_n(-i\nabla)$ que se obtiene sustituyendo $\vec{k} \rightarrow -i\nabla$ en la transformada de Fourier inversa de (2.14),

$$W_n(-i\nabla)f(\vec{x}) = \sum_{\vec{r}} W_{n,r} e^{i\vec{r} \cdot (-i\nabla)} f(\vec{x}) \quad (2.15)$$

Al desarrollar la función exponencial en serie de potencias en el operador ∇ de la ec.(2.15), obtendremos una ecuación donde se identifica el desarrollo de Taylor de la función $f(\vec{x}+\vec{r})$, por lo que la ecuación (2.15) se reduce a,

$$W_n(-i\nabla)f(\vec{x}) = \sum_{\vec{r}} W_{n,r} f(\vec{x}+\vec{r}) \quad (2.16)$$

Este resultado permite expresar la ec.(2.12) como,

$$\left[W_{n'}(-i\nabla)f(\vec{x}, t) - i\hbar \frac{\partial f}{\partial t}(\vec{x}, t) \right]_{\vec{x}=\vec{r}+\vec{r}'} \sum_{\vec{n}, \vec{r}} U_{nn', \vec{r} \vec{r}'} f_n(\vec{r}, t) = 0$$

(2.17)

La obtención del Hamiltoniano equivalente a partir de la ec.(2.17) requiere una serie de aproximaciones sobre el potencial externo $U(\vec{x})$. Una de ellas establece que es posible describir satisfactoriamente el movimiento de un electrón utilizando exclusivamente estados correspondientes a una banda de energía. Esta es *la aproximación de una banda* ^[4, 24, 26], que en cierta forma es una restricción a la intensidad de la perturbación externa, ya que si es muy intensa, existe la probabilidad de transición interbanda dando lugar al efecto Zener^[2]. La aproximación consiste en considerar despreciables los elementos de matriz $U_{nn'}^{\vec{r}\vec{r}'}$ para los cuales $n \neq n'$.

La segunda aproximación se refiere a la variación del potencial; si éste varía lentamente con las posiciones atómicas dadas por \vec{r} , la perturbación real del sistema $U(\vec{x})$ puede reemplazarse por $U(\vec{r})$. En el caso de una perturbación debida a un campo eléctrico \mathcal{E} , el potencial es $U(\vec{x}) = e\mathcal{E} \cdot \vec{x}$, y la suposición de que el potencial varía lentamente con la posición ^[26] implica que \vec{x} puede reemplazarse por su valor en el centro de la función de Wannier $a_n(\vec{x} - \vec{r})$, de tal manera que $U(\vec{r})$ se convierte en un potencial de tipo escalera (cf. Fig.2).

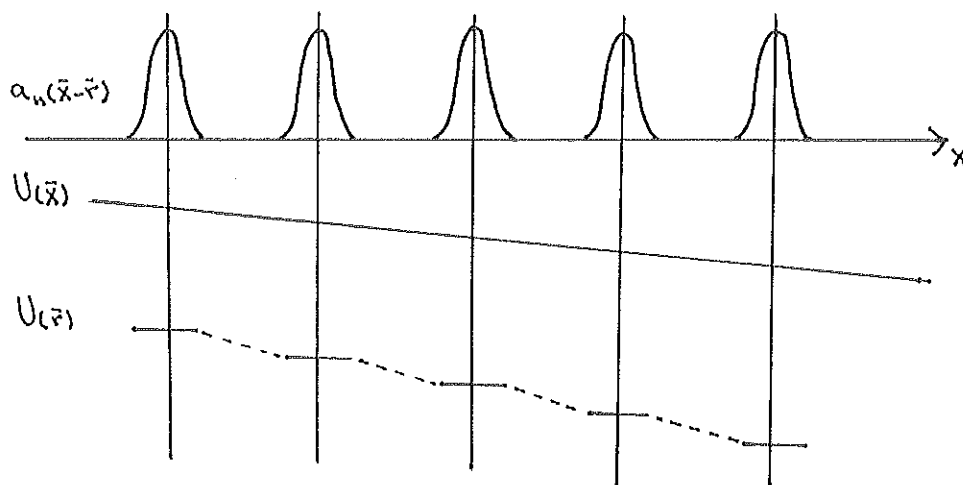


Fig.2.-Aproximación del potencial $U(\vec{x})$ por un potencial $U(\vec{r})$ que varía lentamente con la posición.

Esta aproximación permite expresar los elementos de matriz del potencial dados por (2.13) como:

$$U_{n'n', \vec{r}\vec{r}'} = U(\vec{x}=\vec{r}) \delta_{\vec{r}\vec{r}'} \quad (2.18)$$

Finalmente la ecuación (2.17) se reduce,

$$\left[W_n(-i\nabla) - i\hbar \partial/\partial t \right] f_n(\vec{x}, t) + U(\vec{r}) f_n(\vec{x}, t) = 0 \quad (2.19)$$

Al conocer $W(\vec{k})$ en una banda, podemos conocer los efectos dinámicos de la perturbación ignorando el potencial de la red. El Hamiltoniano de la ec.(2.19) describe un problema análogo al del electrón libre sujeto a una perturbación externa. Hemos obtenido lo que se llama un Hamiltoniano equivalente. Esto es, el Hamiltoniano de la ecuación de Schrödinger se aproxima por el Hamiltoniano de una banda,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + U(\vec{x}) \simeq \mathcal{H}_{eq} = W_n(\vec{k}) + U(\vec{r}) . \quad (2.20)$$

En la expresión anterior denotamos con \mathcal{H}_{eq} al *Hamiltoniano equivalente en la representación de Wannier*.

CAPITULO III.

ESCALERAS DE STARK EN CRISTALES.

En este capítulo obtendremos las escaleras de Stark en base al formalismo de los Hamiltonianos equivalentes (§2.3), considerado como el enfoque antiguo del problema. En el §3.1 analizaremos una de las aplicaciones más sencillas de la teoría de Hamiltonianos equivalentes: la aproximación cuasiclásica.^[8,24,26]

Mediante este enfoque, el movimiento del electrón en presencia de un campo eléctrico resulta periódico en una banda y su cuantización da lugar a las escaleras de Stark i.e. una serie de niveles discretos separados una distancia $e\hbar a$, donde "a" es el parámetro de la red. Sin embargo, los resultados obtenidos no son satisfactorios debido a la forma aproximada del Hamiltoniano utilizado. En el §3.2 se estudian los tratamientos en la representación de Wannier^[5,6] basados principalmente en la obtención de funciones de Houston^[3] como soluciones de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo cuya periodicidad da lugar a las escaleras de Stark. Los resultados obtenidos por E.O.Kane^[9] en la representación C.M.R. se presentan en el Apéndice A.

§3.1.- LA APROXIMACION CUASICLASICA.

Los elementos necesarios para estudiar la dinámica de electrones en una banda en presencia de un campo eléctrico homogéneo son los resultados obtenidos en el §2.3, en particular el Hamiltoniano efectivo en la representación de Wannier. Una de las maneras de obtener información a partir del Hamiltoniano equivalente es mediante la aproximación cuasiclásica. La elección de este tratamiento se justifica debido a que las bandas de energía para un sólido están formadas por un cuasicontinuo⁽³²⁾ que posee un número muy grande de estados con los cuales en general se pueden formar paquetes de onda que se comportan como partículas clásicas sujetas a las ecuaciones de movimiento generadas por el Hamiltoniano. La equivalencia entre los formalismos clásico y cuántico está dada por el principio de correspondencia de Bohr con el cual identificamos los períodos clásicos con espaciamentos cuánticos en la energía. Este tratamiento limitado a una banda requiere de un par de variables conjugadas, que son el momento del cristal $\hbar\vec{k}$ y el vector de la red \vec{r} que define las posiciones atómicas el cual se convierte en un operador cuántico⁽⁸⁾ cuyas eigenfunciones son las funciones de Wannier,

$$\langle \vec{r}_{op} \rangle_a (\vec{x} - \vec{r}) = r_a (\vec{x} - \vec{r}) \quad (3.1)$$

donde \vec{x} es el vector de posición de los electrones.

El Hamiltoniano equivalente de Wannier está dado por la

ec. (2.20),

$$\mathcal{H}_{eq} = W_q(\vec{k}) + U(\vec{r}) \quad (3.2)$$

Utilizando el principio de correspondencia \mathcal{H}_{eq} , será la función Hamiltoniana clásica donde las ecuaciones de movimiento estarán dadas por:

$$\dot{\vec{r}} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{p}}, \quad \dot{\vec{p}} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{r}} \quad (3.3)$$

donde $\vec{p} = \hbar \vec{k}$. Sustituyendo el Hamiltoniano dado por la ec.(3.2) en las ecs.(3.3) se tiene finalmente:

$$\hbar \dot{\vec{r}} = \frac{\partial W(\vec{k})}{\partial \vec{k}}, \quad \hbar \dot{\vec{k}} = -\frac{\partial U(\vec{r})}{\partial \vec{r}} \quad (3.4a,b)$$

El potencial debido a un campo eléctrico uniforme \mathcal{E} tiene la forma: $U(\vec{r}) = -e\vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{r}$. Si además el campo eléctrico está en la dirección $\vec{\mathcal{E}} = \mathcal{E}\hat{x}$ obtenemos de la ecuación (3.4b) el resultado,

$$k_x - \frac{e\mathcal{E}t}{\hbar} = k_0 = \text{cte.} \quad (3.5)$$

Si el campo eléctrico está en la dirección de un vector de la red recíproca con un periodo a^* , entonces el movimiento en el espacio- \vec{k} resulta periódico en el tiempo i.e. la variable k será restaurada a su valor inicial k_0 después de un tiempo,

$$T = \frac{\hbar a^*}{e\mathcal{E}} = \frac{2\pi\hbar}{e\mathcal{E} \cdot a} \quad (3.6)$$

Por otro lado, integrando la ec.(3.4a), obtenemos el resultado,

$$r_x(t) = r_x(0) + \frac{1}{e\mathcal{E}} \left[W(\vec{k}) - W(\vec{k}_0) \right] \quad (3.7)$$

de donde se observa que después de cada periodo T , el electrón retorna a su posición original $r_x(0)$ i.e. la periodicidad en el espacio- \vec{k} da lugar a una periodicidad en el espacio de las configuraciones. Este proceso se visualiza mediante el esquema de bandas de energía en presencia de un campo externo, introducido por Zener⁽²⁾ (fig.3). El electrón efectuará un movimiento oscilatorio con un período T , confinado a una región del espacio delimitada por las fronteras de la banda de energía permitida y de dimensiones $L=W/e\mathcal{E}$. Este fenómeno se conoce en la literatura como *oscilaciones de Bloch*.

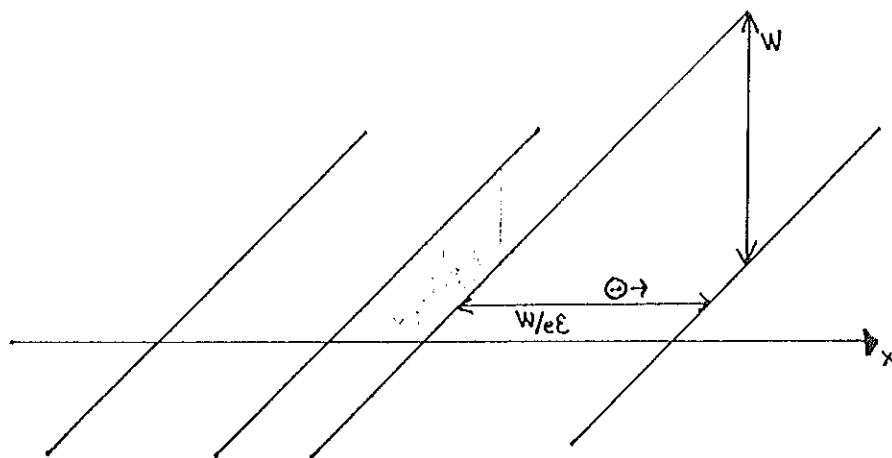


Fig.3.- Movimiento oscilatorio del electrón en una banda de energía.

Las conclusiones obtenidas hasta este momento son suficientes para *interpretar la situación cuántica*. Si utilizamos el principio de correspondencia de Bohr, el período de oscilación T dado por la ec.(3.6) se manifiesta como un *desdoblamiento Stark en cada banda* con un ancho $\Delta E = h/T = e\delta a$. A este resultado se le conoce como las *Escaleras de Stark*⁽¹⁰⁾.

Una forma de ver este espaciamiento es a partir del análisis de la función amplitud $f_n(\vec{r})$ que es solución del Hamiltoniano Equivalente de Wannier dado por la ec. (3.2),

$$\left[W_q(\vec{k}) - e\vec{\delta} \cdot \vec{r} \right] f_n(\vec{r}) = E f_n(\vec{r}) \quad (3.8)$$

la función $f_n(\vec{r} + \vec{a})$ es solución del mismo Hamiltoniano sólo que con un desplazamiento dado en la energía ($E + e\delta a$):

$$\left[W_q(\vec{k}) - e\vec{\delta} \cdot \vec{r} \right] f_n(\vec{r} + \vec{a}) = (E + e\delta a) f_n(\vec{r} + \vec{a}) \quad (3.9)$$

La razón de que estas pruebas cuánticas no sean satisfactorias es que el Hamiltoniano real del sistema no es (3.2) sino,

$$\mathcal{H} = W_q(\vec{k}) - e\vec{\delta} \cdot \vec{x} \quad (3.10)$$

nótese que en el Hamiltoniano (3.2) está implícita la aproximación de que el potencial varía lentamente con las posiciones atómicas dadas por \vec{r} , resultado que permitió simplificar notablemente los elementos de matriz del

potencial (estos resultaron ser diagonales en la representación de Wannier). Para una perturbación que varía con respecto a las posiciones de los electrones \vec{x} , no es fácil simplificar los elementos de matriz del potencial.

En el §3.2 se tratará el modelo en forma exacta según Wannier⁽⁶⁾ y se demostrará la validez del formalismo creado para una sola banda.

§3.2.- ESCALERAS DE STARK EN LA REPRESENTACION DE WANNIER.

En la sección anterior nos dimos cuenta que el problema de electrones en una red periódica en presencia de un campo eléctrico homogéneo podía tratarse mediante la teoría de Hamiltonianos efectivos obteniéndose buena información respecto a la dinámica de los electrones confinando su movimiento a una banda de energía. Mediante la aproximación cuasiclásica se intentó dar una explicación satisfactoria del aspecto cuántico, pero esta no fué del todo correcta en virtud de que el Hamiltoniano analizado no representaba el problema real. En esta sección enfocaremos nuestra atención al problema "exacto" ("exacto" en el sentido que veremos como opera el Hamiltoniano real del sistema (ec.3.10) sobre las funciones de Wannier) lo que conducirá a la obtención de un Hamiltoniano equivalente con el que construiremos soluciones a manera de funciones de Houston⁽²⁾ de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, cuyo

análisis nos dará el espectro de niveles de energía con separación eña conocido como las *Escaleras de Stark*.

a.- El Hamiltoniano Efectivo.

El Hamiltoniano real del sistema está dado por,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 - e\vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{x} \quad (3.11)$$

donde el Hamiltoniano periódico \mathcal{H}_0 tiene como eigenfunciones a las funciones de Bloch $b_q(\vec{x}; \vec{k})$,

$$\mathcal{H}_0 b_q(\vec{x}; \vec{k}) = W_q(\vec{k}) b_q(\vec{x}; \vec{k}) \quad (3.12)$$

y además, de los resultados de el §2.1, la energía del sistema $W_q(\vec{k})$ puede desarrollarse en serie de Fourier,

$$W_q(\vec{k}) = \sum_{\vec{\rho}} w_q(\vec{\rho}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{\rho}} \quad (3.13)$$

donde $\vec{\rho}$ es un vector de la red directa y q el índice de banda. Las funciones de Bloch se pueden expresar en términos de las funciones de Wannier,

$$b_q(\vec{x}; \vec{k}) = \sum_{\vec{\rho}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{\rho}} a_q(\vec{x} - \vec{\rho}) \quad (3.14)$$

Ahora se está en posibilidades de operar sobre las funciones de Wannier con el Hamiltoniano de la ec.(3.11),

$$\mathcal{H}a_q(\vec{x}-\vec{\rho}) = \sum_{\vec{\rho}'} w_q(\vec{\rho}-\vec{\rho}') a_q(\vec{x}-\vec{\rho}') - e\vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{x} a_q(\vec{x}-\vec{\rho}) \quad (3.15)$$

el primer término del lado derecho de la ec.(3.15) resulta de operar \mathcal{H}_0 sobre la función de Wannier $a_q(\vec{x}-\vec{\rho})$. El resultado de operar \vec{x} sobre las funciones de Wannier y los correspondientes desarrollos matemáticos se confinan al apéndice B, donde obtenemos,

$$\vec{x} a_q(\vec{x}-\vec{\rho}) = \vec{\rho} a_q(\vec{x}-\vec{\rho}) + \omega / (2\pi)^3 \int e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\rho}} \sum_m b_m(\vec{x}; \vec{k}) \xi_{mq} d^3\vec{k} \quad (3.16)$$

donde,

$$\xi_{mq} = \int u_m^*(\vec{x}'; \vec{k}) \frac{\partial u_m(\vec{x}'; \vec{k})}{\partial \vec{k}^q} d^3\vec{x}' d^3\vec{k} \quad (3.17)$$

representa la interacción interbanda.

Con este resultado la ecuación (3.15) se escribe,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}a_q(\vec{x}-\vec{\rho}) = & \sum_{\vec{\rho}'} w_q(\vec{\rho}-\vec{\rho}') a_q(\vec{x}-\vec{\rho}') - \\ & - e\vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{\rho} a_q(\vec{x}-\vec{\rho}) - e\mathcal{E} \omega / (2\pi)^3 \int e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\rho}} \sum_m b_m(\vec{x}; \vec{k}) \xi_{mq} d^3\vec{k} \end{aligned} \quad (3.18)$$

En la expresión dada por la ec.(3.18) Wannier⁽⁶⁾ postula que no hay elementos interbanda, lo que permite prescindir del último término de la ecuación (3.18) y escribir,

$$\left[\mathcal{H}_0 - e\vec{\mathcal{E}} \cdot (\vec{x} - \vec{\rho}) \right] a_q(\vec{x} - \vec{\rho}) = \sum_{\vec{\rho}'} w_q(\vec{\rho} - \vec{\rho}') a_q(\vec{x} - \vec{\rho}') \quad (3.19)$$

Para recuperar la forma de Bloch de esta ecuación hay que multiplicar la ecuación (3.19) por $e^{i\vec{k} \cdot \vec{\rho}}$ y sumar sobre $\vec{\rho}$ para obtener finalmente,

$$\left[\mathcal{H}_0 - e\vec{\mathcal{E}} \cdot \left(\vec{x} + i\frac{\partial}{\partial \vec{k}} \right) \right] b_q(\vec{x}; \vec{k}) = W_q(\vec{k}) b_q(\vec{x}; \vec{k}) \quad (3.20)$$

que es el Hamiltoniano efectivo de Wannier⁽⁷⁾ para una banda propuesta por primera vez en 1955 y derivado posteriormente en varios artículos^(5, 6, 12). Con este resultado será posible construir en la siguiente sección soluciones de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo a manera de funciones de Houston.

b.-Escaleras de Stark.

Wannier^(5, 6) construye soluciones para la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo,

$$\left[\mathcal{H}_0 - e\vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{x} \right] \Psi(\vec{x}, t) = i\frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{x}, t) \quad (3.21)$$

a partir de las funciones $b_q(\vec{x}; \vec{k})$ dadas en la ecuación (3.20). Las soluciones se construyen a manera de funciones de Houston^[9], que para este problema se expresan,

$$\Psi(\vec{x}, t) = b_q(\vec{x}; \vec{k} = \vec{k}_0 + e\vec{\mathcal{E}}t/\hbar) \exp \left[-i/e\mathcal{E} \int_{k_{0x}}^{k_{0x} + e\mathcal{E}t/\hbar} W_q(\vec{k}) dk_x \right] \quad (3.22)$$

donde $b_q(\vec{x}; \vec{k})$ y $W_q(\vec{k})$ son soluciones de la ec.(3.20) y el campo eléctrico \mathcal{E} se aplica en la dirección x .

La solución dada por la ec.(3.22) implica que las funciones de Bloch usuales en presencia de un campo eléctrico $\vec{\mathcal{E}}$ evolucionan en el tiempo en la forma $b(\vec{x}; \vec{k} = \vec{k}_0 + e\vec{\mathcal{E}}t/\hbar)$ i.e. como funciones de Bloch con un vector de onda \vec{k} que depende linealmente del tiempo. En el apéndice C se demuestra con ayuda de algunas relaciones entre los operadores de traslación $T(\vec{\rho})$ de la red cristalina, que la evolución temporal de las funciones de Bloch en presencia de un campo eléctrico cumplen con el teorema de Bloch.

Las *Escaleras de Stark* se obtienen mediante el análisis de Fourier de la función de Houston dada por la ec.(3.22). Si el campo eléctrico \mathcal{E} está en la dirección de la red recíproca con un periodo a^* , la periodicidad de la función en k ($k_x = k_x + 2\pi/a$) permite analizar el factor exponencial de la ec.(3.22) y escribir una expresión para la energía,

$$E_{qn} = \frac{1}{2\pi a^*} \int_{k_{ox}}^{k_{ox} + 2\pi a^*} W_q(\vec{k}) dk_x + \frac{ne\mathcal{E}}{a^*} \quad (3.23)$$

En la ec.(3.23) el primer término del lado derecho representa el valor promedio de la energía en la banda q y el segundo un sistema de niveles de energías igualmente espaciados. Este resultado se conoce como las *Escaleras de Stark*.

La existencia de estos niveles de energía fué propuesta por Wannier^(5, 6, 12) en una serie de artículos los cuales desencadenaron controversias que se pueden resumir en la disputa entre G.H. Wannier^(12,13) y J. Zak^(10,11) acerca de la validez del formalismo empleado por Wannier para demostrar la existencia de este fenómeno. La esencia de las controversias radica en que J.Zak pone en tela de juicio el argumento de Wannier⁽⁶⁾ que consiste en suponer que el primer término de la ecuación (3.23) es una constante bien definida dando lugar a una estructura de niveles discreta. Wannier verifica la validez de este argumento al efectuar la prueba formal de los resultados (3.20) y (3.22). Tal prueba se basa en el hecho de que para electrones en potenciales periódicos en presencia de un campo eléctrico es posible construir funciones del tipo Bloch a partir de las funciones Bloch usuales que satisfagan la ecuación de Schrödinger

dependiente del tiempo dada por (3.21). El procedimiento es muy similar al del apéndice C.

Aunque esta discusión no arroja resultados concluyentes, surge un aspecto relevante que es la suposición de Wannier^[19] de que las escaleras de Stark sean estados metaestables, conjetura que sería comprobada posteriormente por J.Avron^[10] y Bentosela *et al.*^[14].

INTERPRETACION ACTUAL DE LAS ESCALERAS DE STARK.

En este capítulo efectuaremos un resumen de los resultados originalmente obtenidos por Wannier y la posterior interpretación de las escaleras de Stark como estados metaestables.

La interpretación formal de este fenómeno, es la mencionada anteriormente, sin embargo experimentalmente las escaleras de Stark resultaron imposibles de observar en estructuras semiconductoras cristalinas. La construcción de un nuevo tipo de estructuras semiconductoras⁽²¹⁾ (heteroestructuras) han permitido la observación experimental de este fenómeno, reportada recientemente por Méndez *et al.*⁽²⁹⁾ (cf. §4.3). Esto nos conduce a efectuar una revisión del problema de las escaleras de Stark en superredes semiconductoras, basándonos fielmente en los resultados de Bastard⁽⁹⁷⁾ (cf. §4.2).

§4.1.-ESCALERAS DE STARK COMO ESTADOS METAESTABLES.

Conforme a los formalismos del Cap.III y el apéndice A, las escaleras de Stark resultan ser soluciones de la ecuación de Schrödinger,

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(x) - \xi ex \right] \Psi = E \Psi \quad (4.1)$$

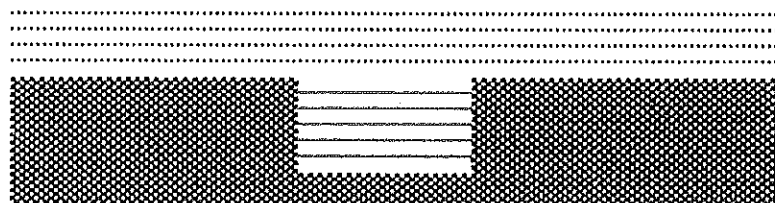
en la aproximación de una banda. En particular, Wannier^[6] demostró que el cuasicontinuo de estados que forman una banda de energía en un cristal en ausencia de un campo eléctrico se convierten, en presencia del campo, en una serie de estados discretos con separación constante $e\alpha$ donde " α " es el parámetro de la red, i.e. en ausencia de tunelaje Zener^[2] el Hamiltoniano del sistema posee estados ligados.

Sin embargo, argumentos en contra de la existencia de las escaleras se basaron fuertemente en que la consideración de la interacción interbanda resultaría en la desaparición del espectro. Ciertamente, el concepto de las escaleras de Stark como estados ligados del sistema resulta erróneo, como fué demostrado por J. Avron^[10] y Bentosela *et al.*^[14] quienes establecen que las escaleras son estados metaestables, verificando de esta manera las conjeturas hechas originalmente por Wannier^[6]. A continuación se hará una revisión de los resultados más relevantes de este enfoque ya que este es el aceptado actualmente.

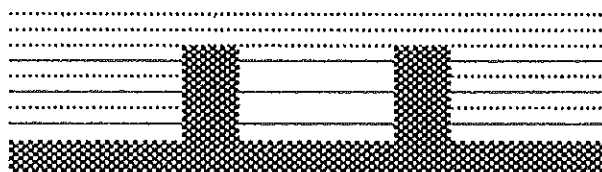
Para visualizar lo que es un estado metaestable^[9] consideremos el pozo cuántico de la Fig.4.a, que posee n estados ligados ϵ_n . Si reducimos las dimensiones de este sistema hasta obtener el caso de la doble barrera de potencial (Fig.4.b) las energías de los estados ligados coincidirán con los estados del continuo; si el ancho de

las barreras "d" no es muy pequeño los estados ligados se convierten en cuasiligados es decir, estados que tienen una vida media relativamente larga, caracterizados por un espectro de energías cuasidiscreto que consta de una serie de niveles cuyas anchuras se determinan por: $\Gamma = \hbar/\tau$, donde τ el período de vida. Si confinamos a un electrón en uno de los estados cuasiligados del pozo este tendrá una probabilidad finita de desligarse y eventualmente salir del sistema. Por otro lado, si hacemos incidir un electrón desde afuera de las barreras de la Fig.5 a una de las energías ε_n , estos penetrarán las barreras sin sufrir reflexión. Estas energías se conocen como *energías de resonancia* del sistema. En caso de aplicar un campo eléctrico \mathcal{E} al pozo de la Fig.4.a, los estados ligados se convierten en estados del continuo, ya que siendo \mathcal{E} de poca intensidad, la energía potencial debida la campo puede ser muy grande al incrementar el valor de x .

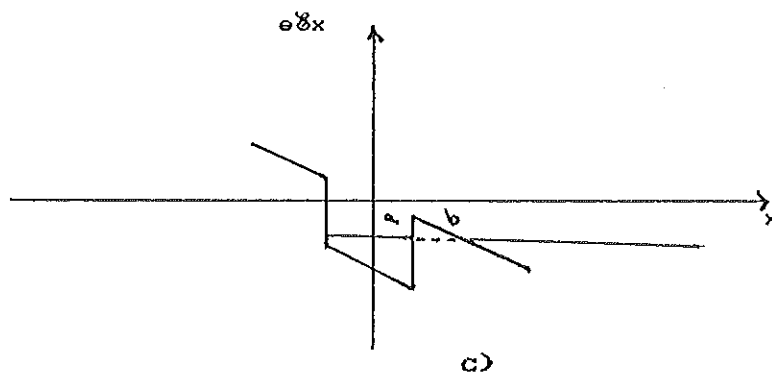
Esto parecería indicar la ausencia total de estados ligados. Sin embargo, resultados teóricos y experimentales muestran que con campos eléctricos del orden de $\mathcal{E} \approx 10^7$ V/m los pozos cuánticos exhiben estados que se comportan como si fueran ligados los cuales en el límite $\mathcal{E} \rightarrow 0$ se convierten en los estados ligados verdaderos. Los estados para este sistema pueden considerarse como metaestables (Fig.4.c) ya que el electrón tendrá una probabilidad finita de tunelaje de la región "a" a la región "b".



a)



b)



c)

Fig.4.- a)Potencial de pozo cuadrado. b) Estados resonantes (—). c)Aparición de estados cuasiligados al aplicar un campo eléctrico \mathcal{E} al pozo cuadrado.

Estos estados metaestables (i.e. estados no estacionarios) son soluciones de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo y se caracterizan por tener energías complejas, donde la parte real de la energía corresponde a las energías de la solución de la ecuación de Schrödinger (4.1) y la parte imaginaria al ancho de las resonancias. Una manera de calcular estas resonancias es mediante el cálculo de los polos de la función de Green del sistema; este formalismo fué utilizado por J.Avron^[10] quien analiza un modelo matemático donde las escaleras de Stark se manifiestan como un conjunto de eigenvalores complejos a manera de escalera distribuidos paralelamente al eje real de las energías. Los resultados coinciden en cierta forma con los de Wannier debido a que cuando las resonancias son lo suficientemente pequeñas, son indistinguibles de los estados ligados verdaderos.

Siguiendo este mismo formalismo, Bentosela *et al.*^[14] obtiene mediante un cálculo numérico los polos de la función de Green para un potencial finito, formado por una cadena de funciones delta de Dirac y el potencial de escalón de Heavyside muy similar al utilizado en nuestro cálculo numérico en el capítulo V, obteniendo las energías complejas correspondientes a las resonancias las cuales exhiben la periodicidad de las escaleras tal y como fué propuesto por Wannier.^[6,8] Un resultado importante es que el ancho de

tales resonancias es pequeño ($\cong 10^{-6}$ eV) comparado con su espaciamiento $\%a \cong 37 \times 10^{-9}$ eV (donde $\%$ es el campo aplicado y a el parámetro de la red) lo que supuestamente permitiría observarlas en virtud de que tal valor es más grande que la resolución de un buen espectrómetro.

Otra forma de encontrar los estados metaestables de la ec.(4.1) consiste en calcular el coeficiente de transmisión $T(E)$ para un electrón incidente sobre el sistema, en donde las resonancias del coeficiente de transmisión describen el confinamiento de las partículas dentro del pozo cuántico y el cual estudiaremos en el capítulo V.

§4.2.-ESCALERAS DE STARK EN SUPERREDES.

El fenómeno de las escaleras de Stark presenta un ligero problema al llevarse al terreno experimental. La generación de campos eléctricos muy intensos ($\geq 10^9$ V/cm) es difícil de lograr y tan sólo es posible obtener separaciones entre los niveles de energía de las escaleras del orden de 10^{-9} eV para cristales típicos (ancho de banda $\cong 2$ eV), de tal manera que para cristales la posibilidad de observar las escaleras de Stark es muy remota. En 1970, L. Esaki y R. Tsu^[21] proponen el diseño de lo que hoy conocemos con el nombre de superred semiconductor, que es una estructura

artificial formada (con analogía a la red periódica de un cristal) por una variación periódica de capas muy delgadas de materiales semiconductores y sus aleaciones. Estas estructuras exhiben dos periodicidades: la correspondiente al arreglo periódico de capas y la asociada a la estructura cristalina. Además, la periodicidad de estas estructuras puede diseñarse arbitrariamente y oscila alrededor de 100 \AA (e.g. hay que recordar para un cristal la periodicidad es del orden de 6\AA). La magnitud de estos periodos tiene consecuencias muy importantes, ya que implica una modificación de lo que conocemos como bandas de energía. Debido a la periodicidad de las capas que forman la superred la primera zona de Brillouin del cristal ($-\pi/a < k < \pi/a$) se reduce a una serie de minizonas dando lugar a minibandas de energía (comparemos el ancho de las minibandas (70 meV) con los 2eV para un cristal). Las dimensiones de estas minibandas ofrecen condiciones favorables para observar fenómenos como las escaleras de Stark, oscilaciones de Bloch y la conductividad diferencial negativa (N.D.C.),⁽²¹⁾ en virtud de que a este nivel los efectos de un campo eléctrico moderado sí son apreciables. En efecto, será posible demostrar (cf. §4.2-b) que la separación entre los niveles de energía de las escaleras de Stark son del orden del ancho de la minibanda. Estos nuevos resultados permitieron en el terreno experimental, la observación indirecta de las

escaleras de Stark por Voisin^[22] y Méndez et al.^[29] en superredes de GaAs-Ga(Al)As, como se discutirá en el §4.3.

A continuación se hará un estudio de las escaleras de Stark en superredes utilizando un método similar al empleado originalmente por Wannier^[6], basado en la aproximación de una banda, donde, para obtener resultados más realistas, consideraremos la aproximación de Amarre Fuerte.

a.-Minibandas de Energía en la aproximación de Amarre Fuerte.

Una superred unidimensional puede representarse por una cadena de pozos de potencial (Fig.5.a) donde $V(x)=V(x+nd)$ es el potencial del pozo cuadrado aislado centrado en $x=nd$ y "d" el periodo (Fig.5.b). El esquema de bandas es similar al estudiado para cristales en el §2.2 con la diferencia de que las minibandas aparecen en el perfil de potencial formado en las fronteras de la banda de conducción de la heteroestructura^[96]. Además, este efecto se refleja en una subdivisión de la primera zona de Brillouin en una serie de minizonas como se aprecia en la Fig.5.c,

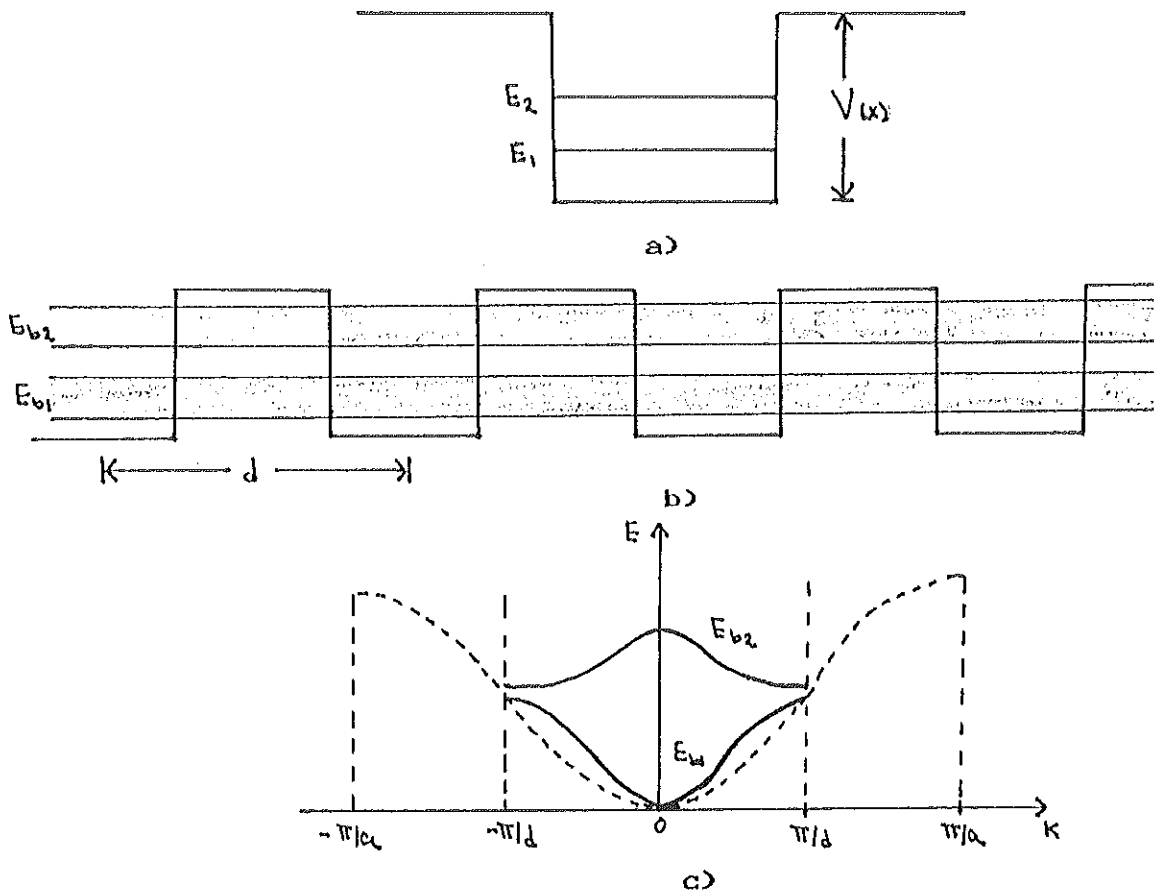


Fig.5.-a) Pozo cuadrado con energías E_1 y E_2 . b) Esquema de minibandas para una superred. c) División de la primera zona de Brillouin en minizonas.

y aparece también un nuevo índice de banda para etiquetar las minibandas. En el pozo aislado de la Fig.5.a si consideramos el movimiento de electrones en la dirección de

x, existirá una cuantización de la energía (E_n) en esta dirección tal como esperaríamos en el caso de la partícula en una caja, mientras que en el plano paralelo al movimiento el electrón se comporta como si estuviera libre, con una energía cinética dada por $\hbar^2(k_x^2+k_y^2)/2m$. En una dimensión si formamos un arreglo periódico con estos potenciales surgirá una estructura de minibandas formadas a partir de los estados E_{c1} y E_{c2} y las cuales se identifican por E_{b1} y E_{b2} en la Fig.5.b. Una manera de calcular las minibandas de energía es mediante la aproximación de Amarre Fuerte.^[97] La elección particular de este modelo es debido a su simplicidad y a que ofrece una descripción cualitativa del problema. Es importante señalar que aunque la situación física es algo diferente, el problema es matemáticamente análogo al caso de un cristal. Para los vecinos más cercanos, la energía de la minibanda dentro de esta aproximación se expresa,

$$\varepsilon_n(k) = E_n - 2|\lambda| \cos kd \quad (4.2a)$$

si consideramos el caso de la banda más baja de energía ($n=1$),

$$\varepsilon_1(k) = E_1 - 2|\lambda| \cos kd \quad (4.2b)$$

donde E_1 será la energía del primer estado ligado del pozo cuadrado aislado (Fig.6.a). El ancho de la minibanda se representa por $\Delta = 4|\lambda|$ y $|\lambda|$ es la integral de traslape entre las funciones de onda vecinas.

b.-Escaleras de Stark en la aproximación de una banda.

La aproximación de una banda de energía se logra a partir de la formación de una superred partiendo de pozos cuánticos aislados los cuales soportan tan solo un estado ligado ϵ_0 . Considerando los estados de una banda de energía se procederá a establecer la ec. de Schrödinger del sistema que consiste en una superred de período "d" en presencia de un campo eléctrico \mathcal{E} . Posteriormente se utilizarán algunas propiedades de los operadores de traslación $T(\vec{\rho})$ discutidos en el apéndice C, para obtener las escaleras de Stark. Con este formalismo obtendremos información de las funciones de onda, su localización, y efectuaremos un análisis comparativo entre los resultados para superredes y cristales.

El Hamiltoniano del sistema está dado por,

$$H = T + \sum_n V(x - nd) + e\mathcal{E}x \quad (4.3)$$

donde $V(x - nd)$ es el potencial del pozo cuadrado centrado en $x = nd$ y \mathcal{E} el campo eléctrico. Consideremos el operador de traslación $T_{jd} = e^{ipjd/\hbar}$ cuyo efecto sobre una función Ψ es,

$$T_{jd} \Psi_\nu(x) = \Psi_\nu(x + jd) \quad (4.4)$$

donde Ψ es solución de la ec. de Schrodinger,

$$H\Psi(x) = \varepsilon_0 \Psi(x) \quad (4.5)$$

Aplicando j veces el operador de traslación T_{jd}^+ a la ecuación de Schrödinger (4.5) y utilizando el resultado,

$$[T_{jd}^+, H] = -jeFdT_{jd}^+ \quad (4.6)$$

obtenemos,

$$H\Psi(x-nd) = [\varepsilon_0 + neFd]\Psi(x-nd) \quad (4.7)$$

lo que da lugar a la escalera,

$$\varepsilon_n = \varepsilon_0 + neFd \quad (4.8)$$

donde ε_0 es la energía promedio de la banda, tal y como fue demostrado por Wannier^[6,8],

$$\varepsilon_0 = d/2\pi \int_{z_1}^{z_2} \varepsilon_1(k) dk \quad (4.9)$$

y $\varepsilon_1(k)$ es la minibanda de energía de la superred. Si utilizamos la aproximación de Amarre Fuerte dada por la ecuación (4.2b) obtenemos inmediatamente el resultado: $\varepsilon_0 = E_1$, que es la energía del pozo aislado. El proceso puede ilustrarse esquemáticamente de la siguiente manera:

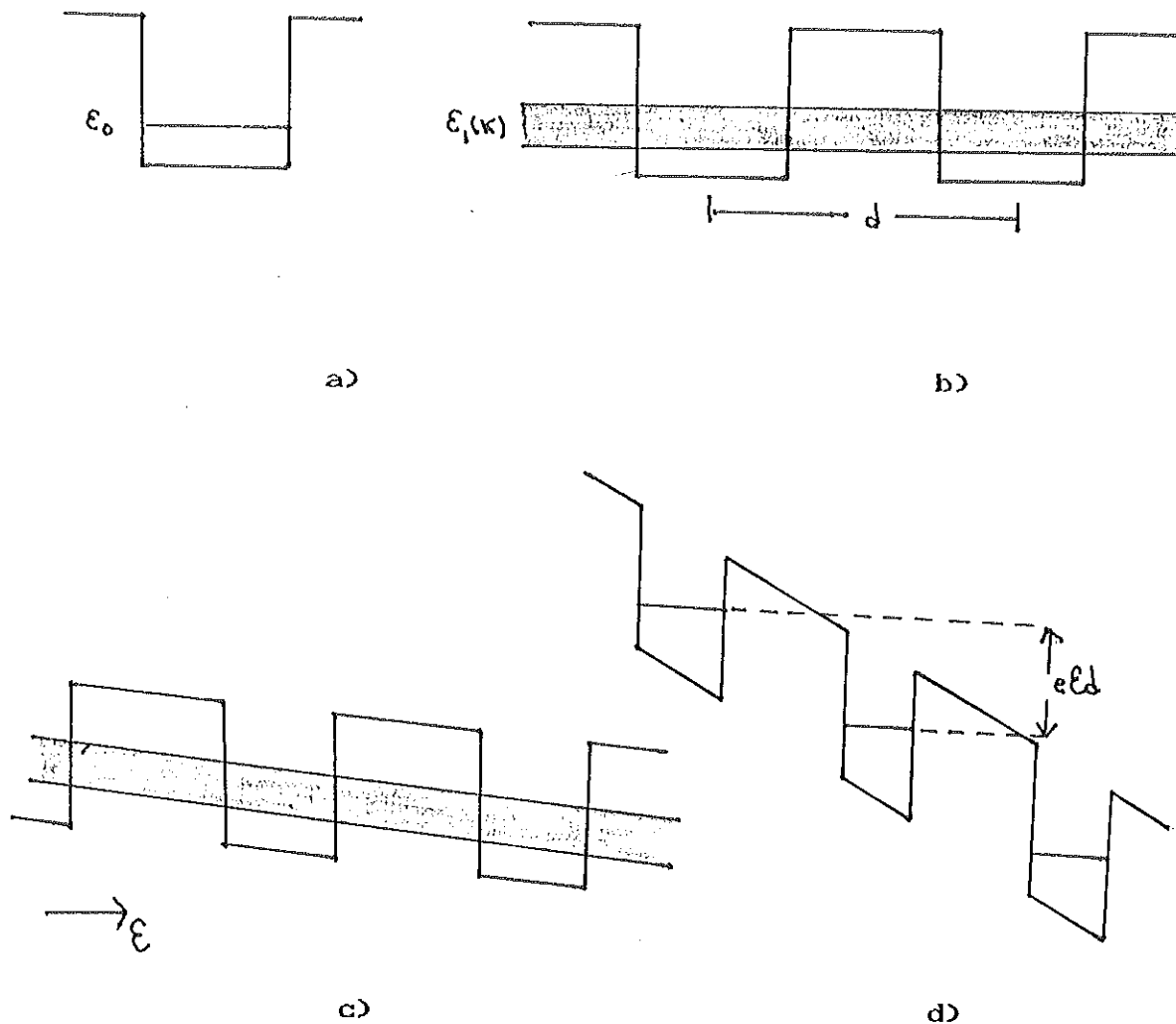


Fig.6.-a) Pozo cuadrado con un estado ligado. b) Formación de la minibanda de energía. c) Aplicación de un campo eléctrico \mathcal{E} a la superred. d) El incremento de la intensidad de \mathcal{E} genera niveles de energía discretos separados por $e\mathcal{E}d$ (Escaleras de Stark.)

El análisis cuantitativo de estos resultados ayudará a entender el porqué las escaleras de Stark son difíciles de observar en cristales y en qué forma la introducción de superredes permite la observación de este fenómeno.

En un cristal el ancho de banda es del orden de 2eV con un parámetro de la red $a=6\text{\AA}$. Si se aplica un campo eléctrico $\mathcal{E}=10^5\text{ V/cm}$, la separación entre los niveles de energía de las escaleras de Stark es del orden de $e\mathcal{E}d \approx 6 \times 10^{-3}\text{eV}$. Este resultado implica que el efecto del campo eléctrico sobre el cristal es pequeño comparado con el de la red periódica. La separación entre niveles es mucho menor que el ancho de la banda de energía y además como en un cristal el parámetro de la red es fijo, para obtener una separación de niveles del orden del ancho de la banda son necesarios valores muy grandes del campo eléctrico, difíciles de obtener experimentalmente. En cambio para una superred con un ancho de minibanda de 70 meV y un periodo $d=60\text{\AA}$, la separación entre los niveles de energía es $e\mathcal{E}d \approx 60\text{ meV}$, siendo en este caso los efectos debidos al campo eléctrico y al potencial de la superred comparables en magnitud. En estas estructuras no tenemos la restricción de un parámetro de la red fijo, ya que para superredes las dimensiones pueden ser diseñadas arbitrariamente lo que permite utilizar campos eléctricos no muy intensos.

c.- Localización de las funciones de onda.

Otro resultado importante es la forma de las funciones de onda $\Psi_\nu(x)$. A continuación veremos que son funciones completamente localizadas en cada pozo de potencial. Para esto consideremos a las $\Psi_\nu(x)$ desarrolladas en función de las funciones base $\phi(x-nd)$ las cuales son eigenfunciones para el caso de pozos cuánticos aislados i.e,

$$H_0 \phi(x) = E \phi(x) \quad (4.10)$$

por lo que,

$$\Psi_\nu = \sum c_{n\nu} \phi(z-nd) \quad (4.11)$$

sustituyendo en la ec. de Schrödinger,

$$H\Psi_\nu(x) = \varepsilon_\nu \Psi_\nu(x) \quad (4.12)$$

y utilizando el mismo procedimiento del apéndice A para la representación C.M.R, se llega a la ecuación:

$$c_{n+1\nu} + \frac{[\varepsilon_\nu - E_1 - e\zeta nd] c_{n\nu} + c_{n-1\nu}}{|\lambda|} = 0 \quad (4.13)$$

que es una ecuación recursiva para las funciones de Bessel, de donde se obtiene por un lado el espectro,

$$\varepsilon_\nu = E_1 + e\zeta nd \quad (4.14)$$

y por otro lado,

$$c_{n\nu} = J_{\nu-n} \left(\frac{-2|\lambda|}{e\zeta d} \right) \quad (4.15)$$

que es una función de Bessel de primer tipo. Resultados similares fueron obtenidos por Hacker y Obermair^[38] en la aproximación de Amarre Fuerte para una banda de energía en un cristal, resultados que servirán para estudiar comparativamente la localización de las funciones de onda en cristales y superredes. Sus resultados indican que la función de onda oscila periódicamente en la banda de energía y decae exponencialmente en las regiones prohibidas (cf. Fig.7.a). Un parámetro útil para estimar la región donde oscila la función de onda (extensión espacial) está dado por $L=(\text{Ancho de banda})/e\mathcal{E}$ que se le conoce también como "longitud de Stark". Para el cristal estudiado $L \approx 333a$, esto implica que la función de onda no está concentrada en una posición de la red como los estados atómicos ni completamente deslocalizada en el cristal como las funciones de Bloch (cf. Fig.7.a). En el caso de la superred, la localización es diferente. Como a este nivel el ancho de la banda y $e\mathcal{E}d$ son comparables en magnitud, no es difícil ver que la función de onda se localiza totalmente en una región de la superred ($L \approx d$). Cuando $e\mathcal{E}d \geq \Delta$ (Δ es el ancho de banda) la función de onda Ψ_{ν} se localiza completamente en cada pozo de potencial y la energía se cuantiza formando una escalera de niveles.

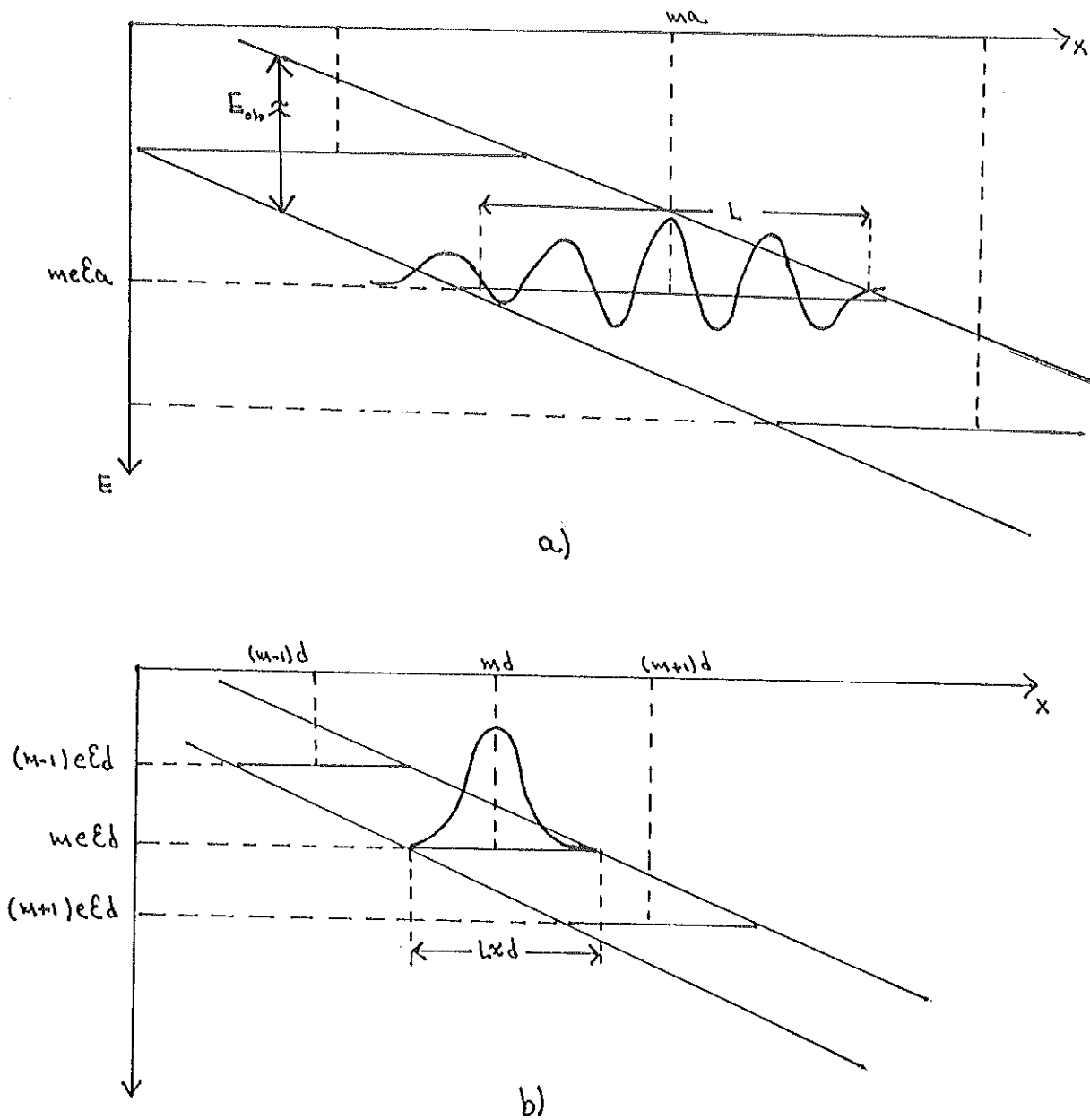


Fig.7.-a)Función de onda para las escaleras de Stark en cristales. b)Función de onda para el caso de una superred.

§4.3.-EVIDENCIAS EXPERIMENTALES SOBRE LA EXISTENCIA DE LAS ESCALERAS DE STARK.

Los primeros intentos dentro del terreno experimental para observar las escaleras de Stark fueron efectuados por Koss y Lambert⁽²⁰⁾ basados en la teoría de Callaway⁽¹⁹⁾ la cual predice su aparición en dispositivos semiconductores a manera de oscilaciones en el coeficiente de absorción óptica asociado a las transiciones entre bandas.

Aunque los resultados experimentales de Koss y Lambert⁽²⁰⁾ del cálculo de la absorción óptica de un semiconductor GaAs en presencia de un campo eléctrico ($\geq 1.6 \times 10^5 \text{ V cm}^{-1}$) concuerdan con lo esperado teóricamente, la pequeñez del efecto (e.g. para tales valores del campo se obtiene una separación entre los niveles de las escaleras del orden de 1meV) no se considera como una fuerte evidencia.

Recientemente las escaleras de Stark han sido observadas experimentalmente por Méndez *et al.*⁽²⁹⁾ en superredes de GaAs-GaAlAs, mediante el estudio de las transiciones ópticas entre los diferentes niveles de las escaleras correspondientes a las minibandas de valencia y conducción, proceso que puede ser cuantificado mediante espectros de fotoluminiscencia.

Las escaleras de Stark se estudiaron en superredes definidas por los perfiles de potencial de las fronteras superior e inferior de las bandas de valencia y conducción respectivamente (Fig.8). En virtud de que cada material utilizado para construir la heteroestructura posee un ancho de banda distinto (Fig.8.a), es de esperarse que exista una discontinuidad abrupta en la interfaz de los materiales la cual se manifiesta con una distorsión de la banda en esa vecindad. El efecto total puede describirse satisfactoriamente por una distorsión a manera de una cadena de pozos de potencial. El movimiento en este perfil de potencial da lugar a minibandas que es precisamente donde estudiaremos los efectos del campo eléctrico (Fig.8.c).

En la Fig.8.d podemos apreciar los efectos del campo eléctrico \mathcal{E} sobre la heteroestructura. Para valores moderados del campo eléctrico ($\mathcal{E} \cong 2 \times 10^{-4} \text{Vcm}^{-1}$) el sistema se comporta como una serie de pozos no acoplados los cuales exhiben niveles discretos separados una distancia $e\mathcal{E}d$ (Escaleras de Stark).

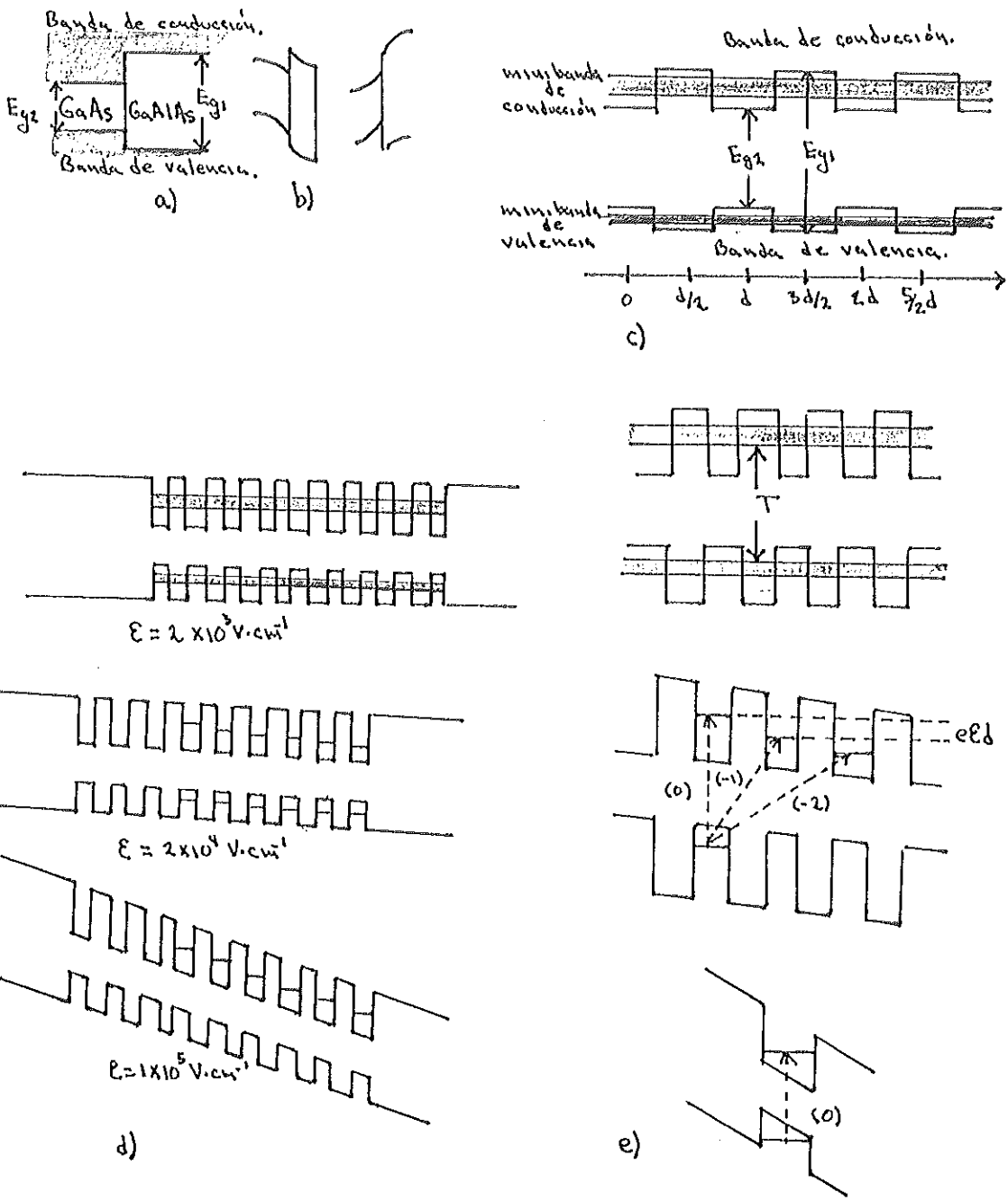


Fig.8.- Formación de la Heteroestructura.a) Discontinuidad en las bandas de energía.b) Distorsión de la banda.c) Superred.d) Efectos del campo eléctrico sobre la superred.e)Diferentes tipos de transiciones entre las escaleras de Stark.

El objetivo del experimento es mostrar la existencia de transiciones entre los niveles de energía de las escaleras correspondiente a la minibanda de conducción con un nivel fijo de la escalera correspondiente a la minibanda de valencia.

Para diferentes valores del campo eléctrico se inducen diferentes tipos de transiciones las cuales se muestran en la Fig.8.e. Para valores muy bajos del campo eléctrico ($0 \leq \mathcal{E} \leq 1 \times 10^4 \text{ V cm}^{-1}$), las energías correspondientes a las transiciones se medirán como la diferencia entre las fronteras inferior y superior de las minibandas de conducción y de valencia respectivamente.

Para valores moderados del campo eléctrico ($1.2 \times 10^4 \leq \mathcal{E} \leq 5.2 \times 10^4$) aparecerán dos tipos de transiciones: verticales y oblicuas. Las transiciones entre electrones y hoyos localizados en el mismo pozo cuántico son conocidas como transiciones verticales y las identificamos por (0). Las transiciones oblicuas corresponden a transiciones entre hoyos y electrones localizados en diferentes pozos cuánticos, de tal manera que (-1) y (-2) representan las transiciones que corresponden a un nivel de la escalera de la minibanda de valencia (escogido arbitrariamente) con los niveles situados a uno y dos periodos en la minibanda de conducción respectivamente. Para valores muy intensos del campo eléctrico ($5.6 \times 10^4 \leq \mathcal{E}$) solo son posibles transiciones

verticales.

Ciertamente, de ser posible las transiciones entre los diferentes niveles de las escaleras de Stark, las transiciones oblicuas deben manifestarse como desplazamientos hacia energías menores del orden de $\pm e\mathcal{E}d$, $\pm 2\mathcal{E}d$, medidas respecto a la transición vertical. Además, para valores muy intensos del campo eléctrico, la energía correspondiente a la transición vertical (de un pozo cuántico en particular) debe experimentar un incremento del orden de $(\Delta_c + \Delta_v)/2$ donde Δ_c y Δ_v corresponden a los anchos de la banda de conducción y de valencia. Esto se debe a que los niveles que integran las escaleras de Stark que están localizados en cada pozo cuántico se encuentran centrados en la minibanda.^[39]

Los resultados de Méndez *et al.*^[23] fueron obtenidos en una superred construida por la variación periódica de 60 capas de GaAs con espesores de 30\AA con 59 capas de Ga_{0.05}Al_{0.95}As de un espesor de 35\AA dando lugar a un período de la superred de $d=65\text{\AA}$.

En la Fig.9, los resultados experimentales se muestran en las gráficas de la intensidad de fotoluminiscencia en función de la energía para diferentes valores del campo eléctrico. Y en efecto, para valores moderados del campo ($1.2 \times 10^{-4} \leq \mathcal{E} \leq 5.2 \times 10^{-4}$) el espectro exhibe una serie de máximos correspondientes a las transiciones (0), (-1) y (-2)

los cuales se comportan de manera diferente con el campo. Los máximos (-1) y (-2) se desplazan linealmente hacia energías menores a razón de $-0.55\text{-meV}/(\text{kV}/\text{cm})$ y $-1.35\text{-meV}/(\text{kV}/\text{cm})$ respectivamente. Estos desplazamientos coinciden con los esperados teóricamente para la estructura de pozos en la Fig.8, $-e\mathcal{E}d$ y $-2\mathcal{E}d$ i.e. disminuciones a razón de -0.65 y $-1.30\text{-meV}/(\text{kV}/\text{cm})$ respectivamente.

Por otro lado, el corrimiento efectivo en la energía correspondiente a la transición vertical (0) para campos intensos, se deduce de las energías de los máximos de la fotoluminiscencia para $\mathcal{E}=0$ y $\mathcal{E}=6 \times 10^4$ después de haber realizado una corrección debida a la energía de enlace de los excitones. Los resultados teóricos coinciden con los experimentales, i.e. el máximo correspondiente a la transición (0) se desplaza 14 meV a la parte azul del espectro, como era de esperarse, dado que $(\Delta_c + \Delta_v) \cong 28$ meV. Estos resultados son una clara evidencia de que las escaleras de Stark pueden ser observadas en heteroestructuras.

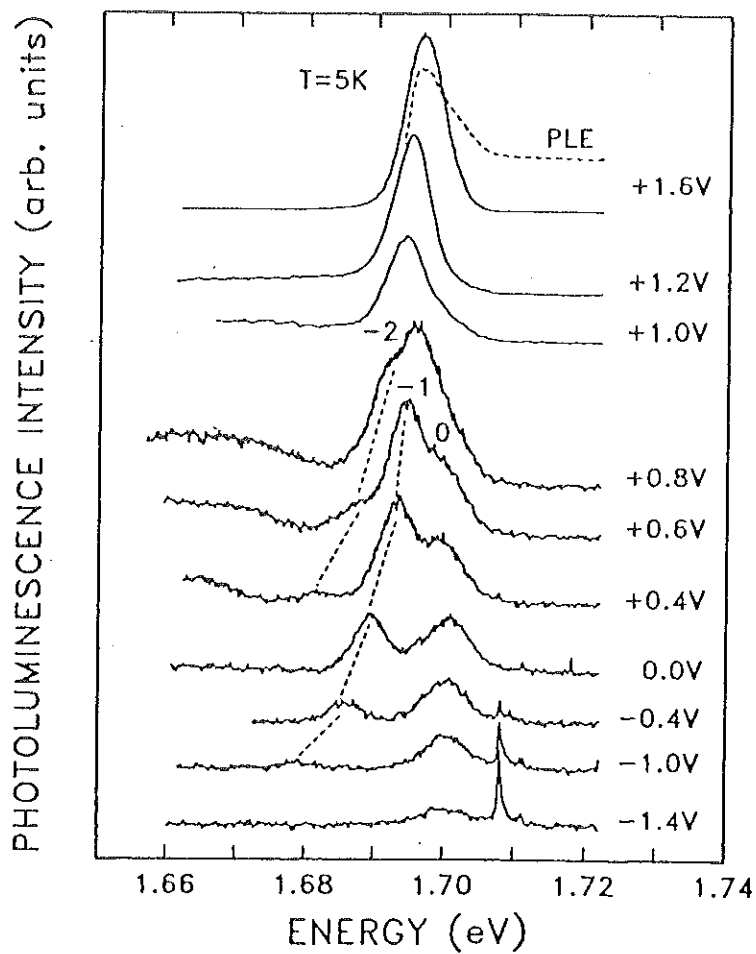


Fig.9.-Espectro de fotoluminiscencia. $\mathcal{E} \cong 20 |V - 1.6\text{V}| \text{KVcm}^{-1}$. Los máximos identificados por 0, -1 y -2 corresponden a las transiciones entre pozos adyacentes, como se ilustra en la Fig.8.e.

CAPITULO V.

CALCULO NUMERICO.

Una de las maneras de estudiar el problema de las escaleras de Stark es a partir de un modelo unidimensional que consiste en considerar el movimiento de un electrón en un potencial periódico $V_n(x)$ formado por una cadena de N funciones delta de Dirac espaciadas una distancia "a" e intensidad constante α ,

$$V(x) = \sum_{n=0}^N \alpha \delta(x - na) \quad (5.1)$$

bajo la presencia de un campo eléctrico homogéneo \mathcal{E} . La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para este sistema es,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \rho(x)}{dx^2} + W(x)\rho(x) = E\rho(x) \quad (5.2a)$$

$$W(x) = \alpha \sum_n \delta(x-na) - Fx \quad (5.2b)$$

En la ec.(5.2b) el potencial electrostático es $-Fx$ donde $F=e\mathcal{E}$ y \mathcal{E} es el campo eléctrico aplicado. Un parámetro útil es $L=(N-1)a$ que representa la longitud del sistema. El análisis numérico de este modelo se basa en el método de la matriz de transferencia M que consiste en conectar los coeficientes de las funciones de onda evaluadas a la izquierda ($\rho_i(x=0)$) y a la derecha ($\rho_d(x=L)$) del potencial

de la forma,

$$\rho_d(x=L) = M\rho_i(x=0) \quad (5.3)$$

donde M es una matriz de 2X2 que contiene la información del potencial (5.2b) y que se construye imponiendo las condiciones de acoplamiento de la función de onda y su derivada en los puntos de discontinuidad del potencial. El método permitirá observar las escaleras de Stark como resonancias en el coeficiente de transmisión en función de la energía del electrón incidente E.

Una manera de simplificar el modelo es mediante la aproximación de $-e\delta x$ por un potencial de escalera según Bentosela *et al.*⁽¹⁴⁾ que permite expresar a (5.2b) como,

$$W(x) = \alpha \sum_n \delta(x-na) - Fa \sum_n \Theta(x-(n+1/2)a) \quad (5.4)$$

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases} \quad \text{función unitaria de Heavyside.}$$

cuya gráfica vemos en la Fig.10,

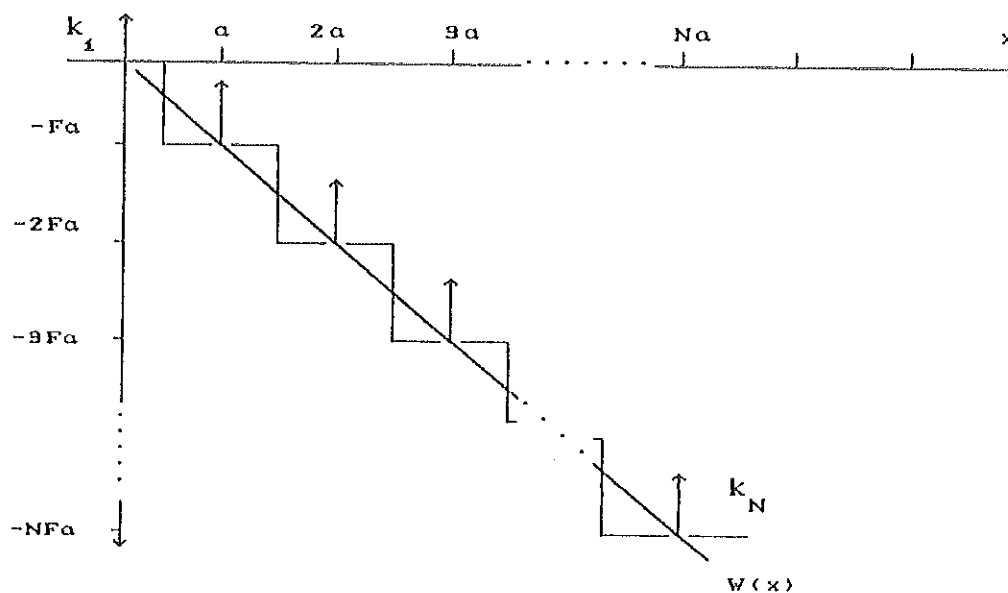


Fig.10.-Gráfica del potencial $W(x)$ con la aproximación de escalera.

La elección de (5.4) simplifica los elementos de la matriz M y evita además el manejo de las funciones de Airy que resultan como solución exacta de (5.2) y cuyo cálculo numérico presenta ciertas dificultades computacionales.

Podemos plantear las soluciones de la ecuación de Schrödinger (5.2a) a la izquierda y a la derecha del sistema como combinaciones lineales de ondas planas. Considerando un haz incidente por la izquierda del sistema de amplitud uno y unidades de $\frac{\hbar^2}{2m} = 1$ se tienen las soluciones,

$$\rho_i(x) = e^{ik_1 x} + r e^{-ik_1 x} \quad (5.5)$$

$$\rho_d(x) = \tau e^{ik_N x}$$

donde $k_N = \sqrt{E + e\delta(N-1)a}$. Además r y τ son las amplitudes de reflexión y transmisión respectivamente. Mediante la ec.(5.3) y el resultado (5.5) podemos expresar,

$$\begin{pmatrix} \tau \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} \quad (5.6)$$

La forma explícita de los elementos de matriz (M_{ij}) para el caso de una cadena de potenciales delta de Dirac pueden verse en el tratamiento de F. Rojas^[40]. La amplitud de transmisión está dada por,

$$\tau = \frac{\det(M_{ij})}{M_{22}} \quad (5.7a)$$

Como la corriente asociada a $\rho(x)$ se conserva para un estado estacionario,

$$\text{Det}(M_{ij}) = k_1/k_N \quad (5.7b)$$

Usando la definición usual del coeficiente de transmisión T ^[31],

$$T = \frac{k_N}{k_1} |\tau|^2 \quad (5.8)$$

y de los resultados (5.7a-b) obtenemos finalmente,

$$T = \frac{k_1}{k_N} \left| 1/M_{22} \right|^2 \quad (5.9)$$

Se implementa un programa en Fortran-77 para hacer el cálculo numérico y los resultados se presentan en gráficas del coeficiente de transmisión en función de la energía.

El análisis de los resultados del cálculo numérico se basa principalmente en el uso de criterios establecidos en la literatura al estudiarse los espectros de energía en cadenas de potenciales periódicos en presencia de campos eléctricos constantes. En base a los resultados obtenidos por Bentosela *et al.*⁽¹⁴⁾, la condición para observar las escaleras de Stark correspondientes a la n -ésima banda de energía es que la longitud del sistema (L) sea mayor que la llamada "longitud de Stark" (L_s) dada por $L_s = (E_n^{\text{sup}} - E_1^{\text{inf}})/F$, donde $E_n^{\text{sup(inf)}}$ es la energía del extremo superior (inferior) de la n -ésima banda.

La presentación gráfica de los resultados pretende ilustrar que dada una longitud fija del sistema (L), existen ciertos valores críticos del campo eléctrico que satisfacen la condición $(E_n^{\text{sup}} - E_1^{\text{inf}})/L < F$ para los cuales el fenómeno de las escaleras de Stark se pone de manifiesto.

La interpretación de los resultados se simplifica notablemente si se analizan los efectos de un incremento gradual del campo eléctrico sobre el ya conocido espectro de bandas de energía del potencial periódico dado por la ecuación (5.1) (modelo de Kronig-Penney). Para esto efectuaremos el análisis de coeficiente de transmisión $T(E)$ en ausencia del campo eléctrico considerando diferentes longitudes del sistema. En la Fig.11 se muestra el coeficiente de transmisión para $L=10,50$ y 100 para un intervalo de energías $0 \leq E < 40$ manteniendo fijos los parámetros $\alpha=a=1$ y efectuando un barrido de 1000 puntos en la energía. En este caso se describe el modelo de Kronig-Penney de longitud finita, donde se aprecia la aparición del esquema de bandas permitidas ($T \neq 0$) y prohibidas ($T=0$). El hecho de que las bandas de energía más bajas sean muy estrechas se debe a que el efecto túnel es menos probable para energías pequeñas^[29].

El esquema de bandas presentado en la Fig.11.c será utilizado para analizar los efectos del campo eléctrico mediante un incremento gradual de F , que toma los valores $F=.08,.16,.32,.5,.8,1.5$. Dada la longitud finita del sistema (L) y el ancho aproximado de las bandas de energía en la Fig.11.c, es fácil estimar los valores del campo eléctrico para los cuales en principio las escaleras de Stark pueden ser observadas.

La aplicación de campos eléctricos débiles ($0 < F \leq 1.6$) se manifiesta por una destrucción de las bandas de energía más bajas, en el sentido de que estas empiezan a hacerse más estrechas y eventualmente desaparecen debido a que los eigenvalores $E \approx FL$ son los más afectados (Figs.12.a-c).

Para valores moderados del campo eléctrico ($1.6 < F \leq 8$), aparecen una serie de resonancias en el coeficiente de transmisión a manera de una estructura periódica donde las posiciones de las resonancias de $T(E)$ pueden describirse por,

$$E_j^n = E_0^n + jFa \quad (5.10)$$

donde el superíndice "n" indica a que banda corresponde tal estructura, conocida como las escaleras de Stark.

En la Fig.12.d se aprecia solamente la escalera E_j^1 que corresponde a las energías $[E_1^{min}, E_1^{max}] \cong [1,9]$, sin embargo en la Fig.12.e, es evidente la escalera E_j^2 para las energías $[E_2^{min}, E_2^{max}] \cong [12,40]$, de tal manera que es posible observar una escalera de Stark asociada a cada banda de energía.

En la secuencia de gráficas de la Fig.13 se estudia el efecto del campo eléctrico en un intervalo más grande de energías $0 < E < 300$ para valores de $F = 6, 8$. Es de esperarse la ausencia de la escalera correspondiente a la tercera banda de energía ($[E_9^{min}, E_9^{max}] \cong [45,90]$) (Fig.13.a) en virtud de que dada la longitud del sistema $L=100$ no se satisface la condición necesaria para su observación i.e. $F > 9$.

Finalmente en la secuencia de gráficas de la Fig.14 se realiza una variación simultánea de los valores F y L manteniendo fijo el parámetro $FL=60$. Nuestro análisis nos permite dar una interpretación al criterio de Bentosela *et al.*^[14], para observar las escaleras de Stark: El parámetro $FL=cte$. nos indica que existe un intervalo de energías dentro del cual es posible observar un número finito de escaleras siempre y cuando este no sea mayor que la energía ganada por el electrón en su paso por el sistema i.e. $(E_n^{sup} - E_1^{inf}) < FL$. En otras palabras, las escaleras aparecen en regiones de la energía donde los efectos del campo eléctrico son mayores que los del potencial periódico.

Nuestros resultados coinciden con los de un estudio numérico similar realizado por J. Flores y G. Monsivais^[41] donde se analizan cualitativamente las escaleras de Stark incluyendo los efectos del desorden.

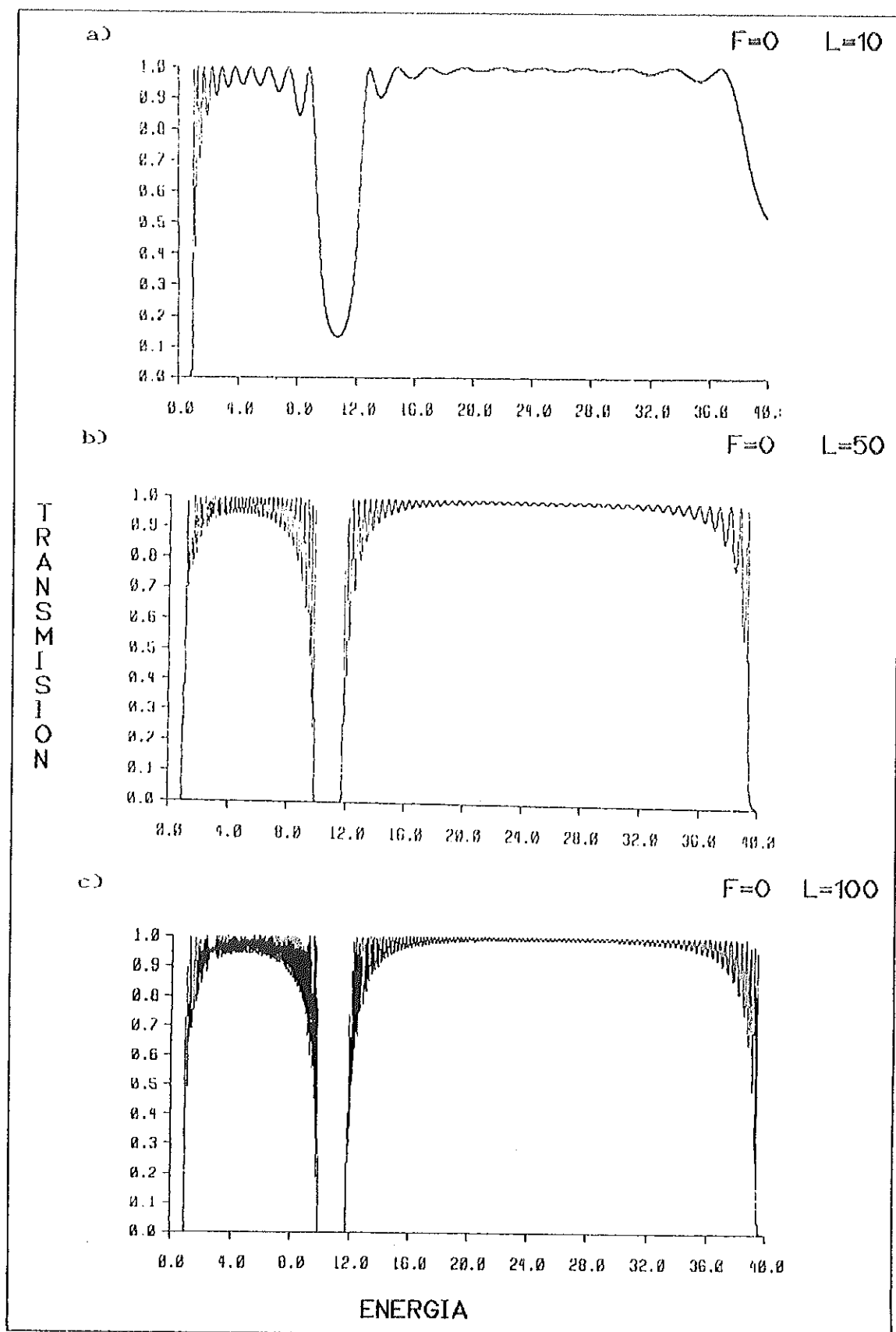


Fig.11.-Gráficas del coeficiente de transmisión T en función de la energía para distintos valores de L en ausencia de campo eléctrico.

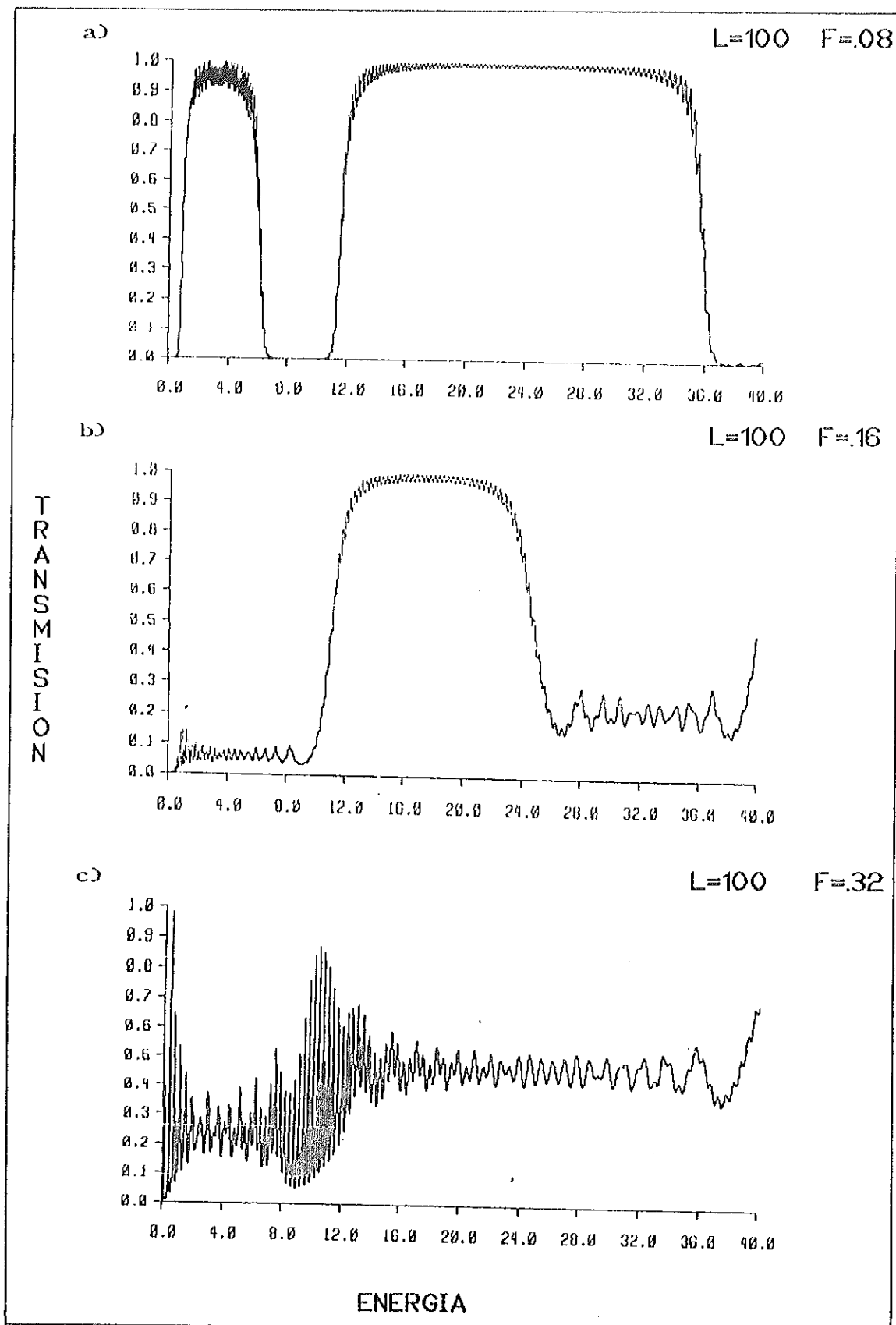
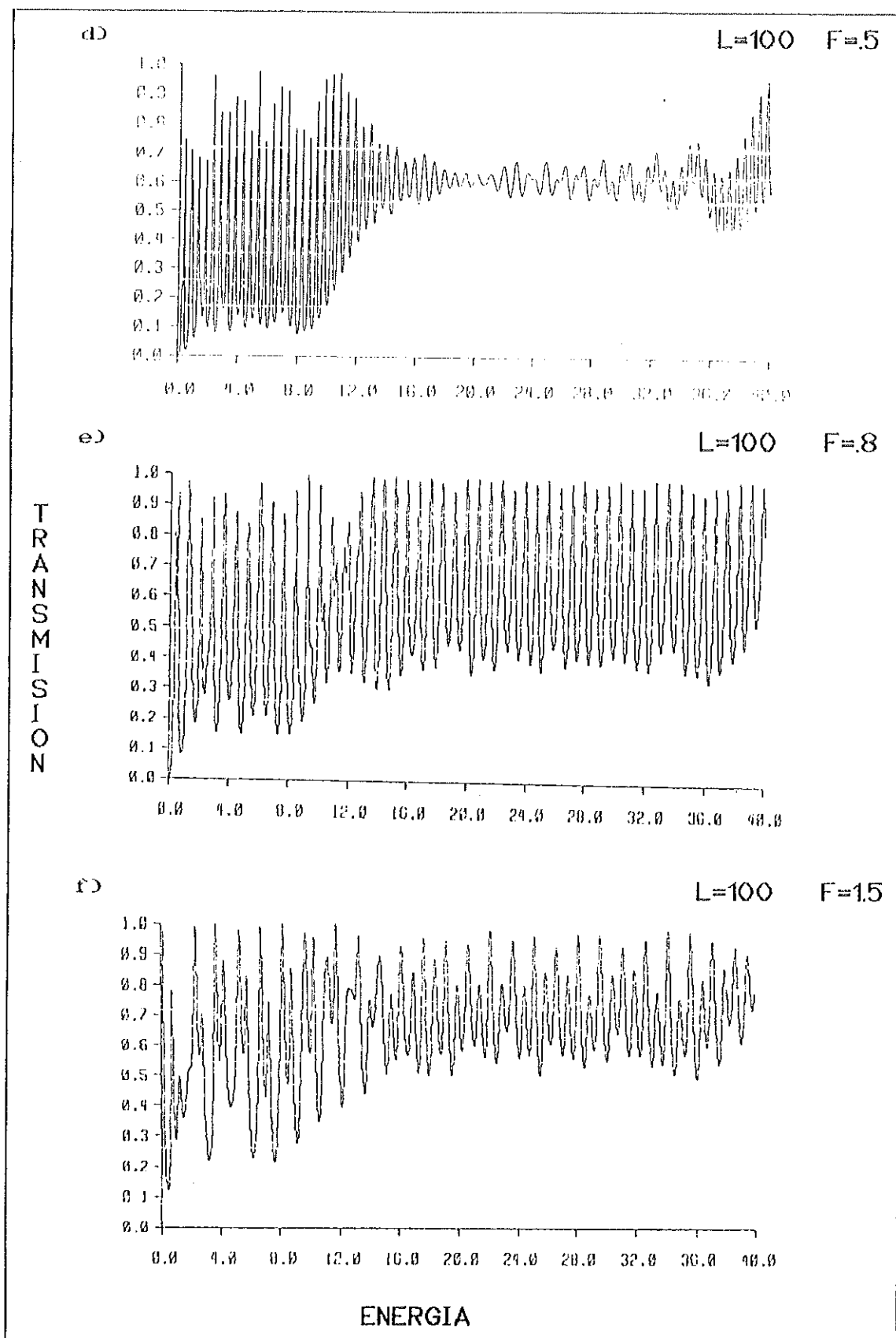


Fig.12.-Gráficas del coeficiente de transmisión T en función de la energía para distintos valores de F para un sistema de longitud finita $L=100$.



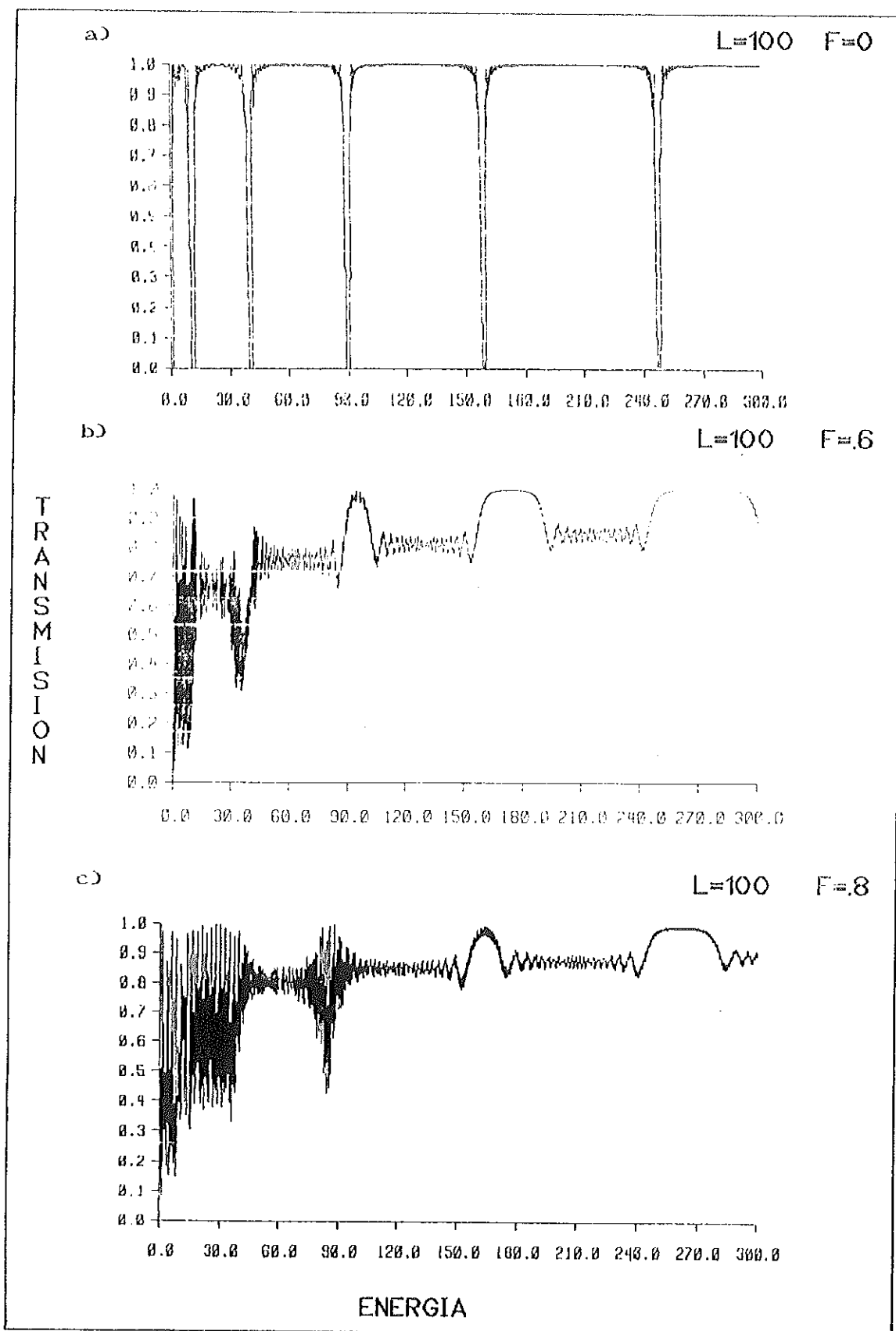


Fig.13.-Gráficas del coeficiente de transmisión T en función de la energía para distintos valores de F en sistema de longitud finita $L=100$ en un intervalo de energía de $[0, 300]$.

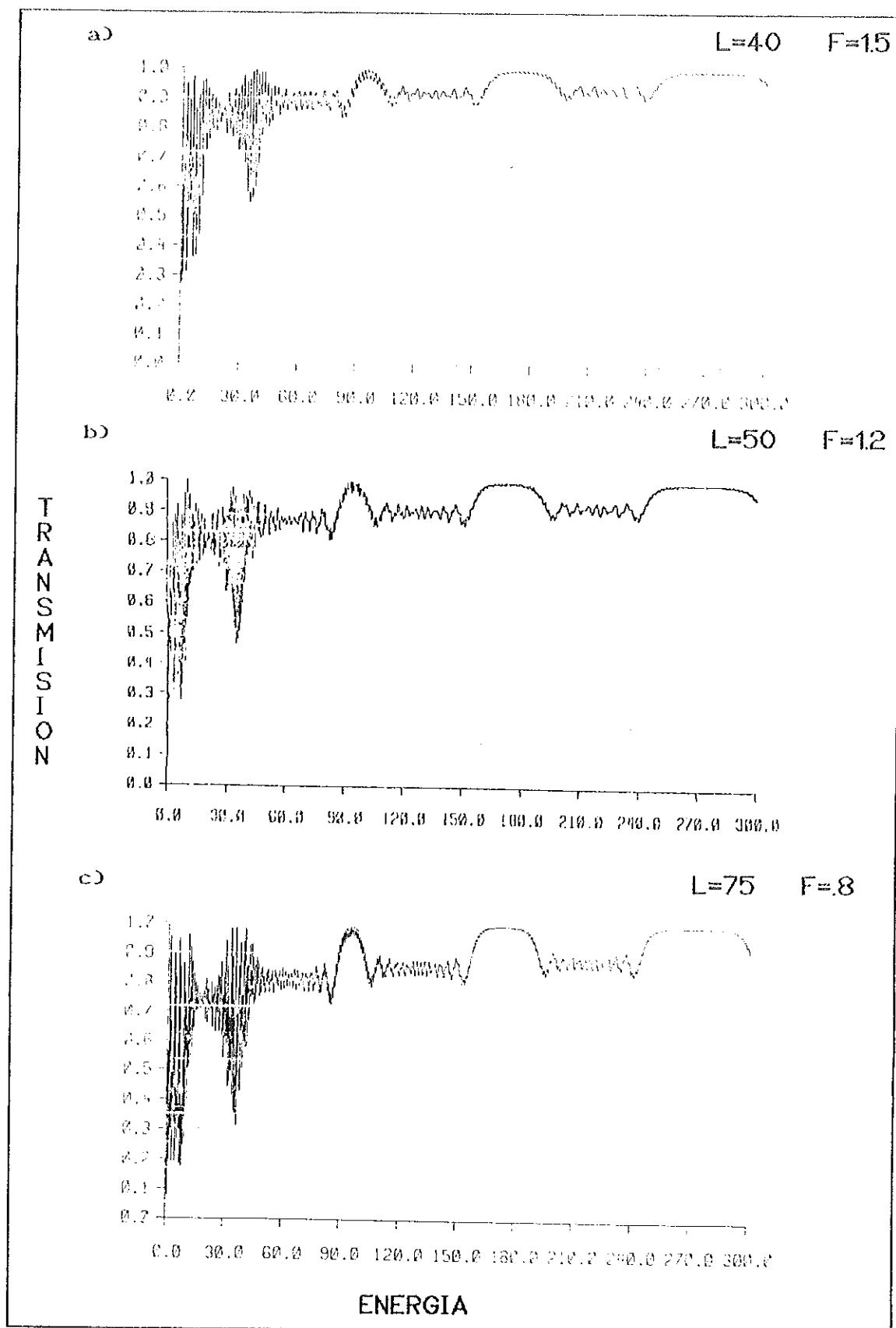


Fig.14.-Gráficas del coeficiente de transmisión T en función de la energía para una variación simultánea de los valores F y L manteniendo fijo el parámetro $FL=60$

CONCLUSIONES.

Se llevó a cabo una revisión del problema de las propiedades de transporte electrónico en sistemas periódicos en presencia de un campo eléctrico. Lo que resulta es una estructura periódica en el espectro de niveles de energía conocida como Escaleras de Stark.

Esencialmente, el estudio del problema se realizó considerando los efectos de un campo eléctrico en estructuras cristalinas y superredes semiconductoras. En cristales, el estudio del fenómeno se clasificó en dos etapas importantes en virtud de los diferentes formalismos empleados para su interpretación: el *enfoque antiguo*, basado en la teoría de Hamiltonianos equivalentes en diferentes representaciones, que permitió un estudio detallado de las versiones semiclásica y cuántica del problema en el capítulo III. En el *enfoque actual* de las escaleras de Stark como estados metaestables se emplean modelos cuya descripción se basa en la interpretación de las resonancias en términos de los polos complejos de la función de Green, resultados que fueron discutidos cualitativamente en el capítulo IV.

Por otra parte, avances tecnológicos recientes en el campo de la microelectrónica han hecho posible la construcción de dispositivos de dimensionalidad restringida (e.g. heteroestructuras, pozos cuánticos, alambres cuánti-

cos) en donde los efectos cuánticos determinan su funcionamiento. Es por ello que gran parte del capítulo IV se dedicó al estudio de los aspectos teóricos de las escaleras de Stark en superredes, complementando con una discusión cualitativa de los resultados experimentales de E. Méndez^[29] que confirman por vez primera la existencia de este fenómeno.

Como complemento al capítulo IV, en el capítulo V se realizó un cálculo numérico a partir de un modelo unidimensional mediante el método de la matriz de transferencia, en donde se pone de manifiesto a las escaleras de Stark como estados metaestables.

Finalmente es importante señalar que a partir de las observaciones experimentales, para un estudio más realista del problema de las escaleras de Stark en superredes es necesario considerar la interacción electrón-hoyo (excitón), lo que hace que el problema deba de ser estudiado en sistemas cuya descripción requiere Teoría de muchos cuerpos y no de modelos simples como el del electrón independiente.

BIBLIOGRAFIA.

- [1].-F. Bloch, *Zeits. f. Physik* 52,555 (1928).
- [2].-G. Zener, *Proc. R. Soc.* 145, 523 (1934).
- [3].-W. V. Houston, *Phys. Rev.* 57, 184 (1940).
- [4].-J. C. Slater, *Phys. Rev.* 76, 1592 (1949).
- [5].-G. H. Wannier, *Phys. Rev.* 117, 432 (1960).
- [6].-G. H. Wannier, *Rev. Mod. Phys.* 34, 645 (1962).
- [7].-G. H. Wannier, *Phys. Rev.* 100, 4 (1955).
- [8].-G. H. Wannier, "*Elements of Solid State Theory*", Cambridge University Press, Cambridge 1959. págs.170-193.
- [9].-E. O. Kane, *J. Phys. Chem. Sol.* 12, 181 (1959).
- [10].-J. Zak, *Phys. Rev. Lett.* 20, 1477 (1968).
- [11].-J. Zak, *Phys. Rev.* 181, 1366 (1969).
- [12].-G. H. Wannier and D. R. Fredkin, *Phys. Rev.* 125, 1910 (1962).
- [13].-G. H. Wannier, *Phys. Rev.* 181, 1364 (1969).
- [14].-F. Bentosela, V. Grecchi and F. Zironi, *J. Phys. C: Solid State Phys.* 15, 7119 (1982).
- [15].-H. Fukuyama, R. A. Bari and H. C. Fogedby, *Phys. Rev. B* 8, 5579 (1973).
- [16].-M. Saitoh, *J. Phys. C: Solid State Phys.* 5, 914 (1972).
- [17].-J. Leo and A. Mc. Kinnon, *J. Phys.: Condens. Matter* 1, 1449 (1989).
- [18].-J. E. Avron, *Phys. Rev. Lett.* 37, 1568 (1976).
- [19].-J. Callaway, *Phys. Rev.* 130, 1963, 549 (1963).
- [20].-R. W. Koss, L. M. Lambert, *Phys. Rev. B* 5, 1479, (1972).
- [21].-L. Esaki and R. Tsu, *I.B.M. J. Res. Develop.* 14, 61 (1970).
- [22].-P. Voisin, J. Bleuse, C. Bouche, S. Gaillard, C. Albert and A. Regreny, *Phys. Rev. Lett.* 61, 1639 (1988).
- [23].-E. E. Méndez, F. Agullo-Rueda and J. M. Hong, *Phys. Rev. Lett.* 60, 2426 (1988).
- [24].-Ziman, J. M., "*Principles of the Theory of Solids*", Cambridge Univ. Press, 1965. págs. 147-161.
- [25].-Callaway J., "*Energy Band Theory*", Academic Press, N.Y. & London, 1964. págs. 108-112, 276-281, 311, 314.
- [26].-Anderson P. W., "*Concepts in Solids*", W.A. Benjamin, Inc. Publishers, 1964, págs.9-90.
- [27].-Davidov A. S., "*Teoría del Sólido*", Ed. Mir, 1981. págs. 128-145.
- [28].-Harrison Walter A., "*Solid State Theory*", Dover Publications, Inc., N.Y., 1979. págs. 56-71 y 166-168.
- [29].-Cohen-Tanoudji C., Diu B., Laloë F., "*Quantum Mechanics. Vol.II.*", John Wiley & Sons, 1977. págs. 1156-1168.

- [30].-Smith R. A., "Wave Mechanics of Crystalline Solids", John Wiley & Sons, N.Y., 1961. págs. 349-363.
- [31].-Landau, Lifshitz E., "Curso Abreviado de Física Teórica. Libro 2.", Ed. Mir, 1979. págs.130-132.
- [32].-Eisberg y Resnick, "Física Cuántica", Ed. Limusa, 1983. págs.530-549.
- [33].-G. H. Wannier, Phys. Rev. 52, 191 (1937).
- [34].-E. N. Adams, J. Chem. Phys. 21, 2103 (1953).
- [35].-Blount E. I. en *Solid State Physics*, editado por F. Seitz y D. Turnbull (Academic, N.Y., 1962), Vol. XIII, pág.305.
- [36].-L. Esaki, IEEE of Quantum Electronics, Vol. QE-22, No.9, Sept. 1986, pág.1161.
- [37].-G. Bastard, J. A. Brum and R. Ferreira.(Notas de curso:"*Spring College in Condensed Matter on: Physics of Low-Dimensional Semiconductor Structures.*), del 23 de Abril al 15 de Junio de 1990, Trieste, Italia.
- [38].-K. Hacker and G. Obermair, Z. Phys. 234, 1 (1970).
- [39].-D. Emin and C. F. Hart, Phys. Rev. B 36, 7353 (1987).
- [40].-F. Rojas, Tesis Profesional, U.A.B.C., Enero de 1989.
- [41].-J. Flores y G. Monsiváis, Rev. Mex. de Fis., 33, 412 (1987).

ESCALERAS DE STARK EN LA REPRESENTACION C.M.R.

Partimos de la ecuación de Schrödinger en la representación C.M.R.^[25]:

$$\left[E_n(\vec{k}) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] \rho_n(\vec{k}) + \sum_{n'} \rho_n(\vec{k}') \langle n\vec{k} | U | n'\vec{k}' \rangle d^3\vec{k} = 0 \quad (\text{A.1})$$

donde los elementos de matriz del potencial están dados por,

$$\langle n\vec{k} | U | n'\vec{k}' \rangle = \int \Psi_n^*(\vec{k}, \vec{x}) U \Psi_{n'}(\vec{k}', \vec{x}) d^3\vec{x} \quad (\text{A.2})$$

Para estudiar el movimiento de electrones en un campo eléctrico constante consideraremos una perturbación de la forma $U = e\delta x$ donde δ es el campo eléctrico en la dirección x .

Necesitamos el valor de los elementos de matriz del potencial: $\langle \vec{k} | U | n'\vec{k}' \rangle = e\delta \langle n\vec{k} | x | n'\vec{k}' \rangle$. El problema se reduce a calcular los elementos de matriz de x ,

$$\langle n'\vec{k}' | x | n\vec{k} \rangle = \int \Psi_n^*(\vec{k}', \vec{x}) x \Psi_n(\vec{k}, \vec{x}) d^3\vec{x} \quad (\text{A.3})$$

que mediante la sustitución de las funciones de Bloch se

expresan,

$$\langle \vec{n}', \vec{k}' | x | \vec{n} \vec{k} \rangle = \int e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{r}} u_n^*(\vec{k}', \vec{x}) x u_n(\vec{k}, \vec{x}) d^3x \quad (A.4)$$

Una manera de calcular los elementos de matriz es mediante el método utilizado por Blount⁽³⁵⁾ que consiste en derivar respecto a la variable k la condición de ortonormalidad de las funciones de Bloch, lo cual nos conduce a,

$$i \langle \vec{n}', \vec{k}' | x | \vec{n} \vec{k} \rangle + \int e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{x}} u_n^*(\vec{k}', \vec{x}) \frac{\partial u_n(\vec{k}, \vec{x})}{\partial k_x} d^3x = \delta_{nn'} \frac{\partial \delta(\vec{k}-\vec{k}')}{\partial k_x} \quad (A.5)$$

despejando los elementos de matriz de x de la ec.(A.5),

$$\langle \vec{n}', \vec{k}' | x | \vec{n} \vec{k} \rangle = i \left[\int e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{x}} u_n^*(\vec{k}', \vec{x}) \frac{\partial u_n(\vec{k}, \vec{x})}{\partial k_x} d^3x - \delta_{nn'} \frac{\partial \delta(\vec{k}-\vec{k}')}{\partial k_x} \right]$$

(A.6)

La periodicidad de la función $u_n^*(\vec{k}', \vec{x}) \frac{\partial u_n(\vec{k}, \vec{x})}{\partial k_x}$ permite expresar los elementos de matriz como,

$$\langle \vec{n} \vec{k} | x | \vec{n}' \vec{k}' \rangle = i \delta_{nn'} \frac{\partial}{\partial k_x} \delta(\vec{k} - \vec{k}') + \chi_{nn'} \delta(\vec{k} - \vec{k}') \quad (\text{A.7})$$

donde,

$$\chi_{nn'} = i \frac{(2\pi)^3}{\Omega} \int u_{\vec{n}'}^*(\vec{k}', \vec{x}) \frac{\partial u_{\vec{n}}(\vec{k}, \vec{x})}{\partial k_x} d^3x \quad (\text{A.8})$$

Sustituyendo (A.7) en (A.1),

$$\left[E_n(\vec{k}) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] \rho_n(\vec{k}) + i e \hbar \frac{\partial \rho_n(\vec{k})}{\partial k_x} + e \hbar \sum_n \chi_{nn'} \rho_{n'}(\vec{k}) = 0 \quad (\text{A.9})$$

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, se escribe,

$$\left[E_n(\vec{k}) + i e \hbar \frac{\partial}{\partial k_x} + e \hbar \chi_{nn} \right] \rho_n(\vec{k}) + e \hbar \sum_{n' \neq n} \chi_{nn'} \rho_{n'}(\vec{k}) = E \rho_n(\vec{k}) \quad (\text{A.10})$$

donde el término: $e \hbar \sum_{n' \neq n} \chi_{nn'} \rho_{n'}(\vec{k})$ representa la interacción interbanda.

Bajo la aproximación de una banda la ec.(A.10) se escribe,

$$\left[E_n(\vec{k}) + ie\delta \frac{\partial}{\partial \vec{k}_x} + e\delta \chi_{nn} \right] \rho_n^{(1)}(\vec{k}) = E \rho_n^{(1)}(\vec{k}) \quad (\text{A.11})$$

donde identificamos por $\rho_n^{(1)}(\vec{k})$ a la solución del caso estacionario.

Si definimos: $E_n^{(1)}(\vec{k}) = E_n(\vec{k}) + e\delta \chi_{nn}$ la ecuación se reduce,

$$\left[E_n^{(1)}(\vec{k}) + ie\delta \frac{\partial}{\partial \vec{k}_x} \right] \rho_n^{(1)}(\vec{k}) = E \rho_n^{(1)}(\vec{k}) \quad (\text{A.12})$$

cuya solución es,

$$\rho_n^{(1)}(\vec{k}) = \bar{\kappa}^{-1/2} \exp \left[-i \int_0^{k_x} [E - E_n^{(1)}(\vec{k}')] dk'_x \right] \quad (\text{A.13})$$

donde κ es una constante de normalización.

De la periodicidad de la función en el espacio- \vec{k} tenemos que,

$$\frac{1}{\kappa} \int_{\kappa/2}^{\kappa/2} [E - E_n^{(1)}(\vec{k}')] dk'_x = 2\nu\pi \quad (\text{A.14})$$

Integrando la ecuación anterior nos conduce:

$$E_{\nu} = \frac{2\nu\pi e\mathcal{E}}{\kappa} + \frac{1}{\kappa} \int_{\kappa/2}^{\kappa/2} E_n^{(1)}(\vec{k}') dk'_x \quad (\text{A.15})$$

que son los eigenvalores de la energía.

El espectro de energía dado por (A.15) consiste en una serie de niveles separados por $2\pi e\mathcal{E}$, bajo la suposición de que la integral en la ecuación (A.15) es una constante bien definida. Si el parámetro de la red es 'a', tendremos que $\kappa=2\pi/a$, lo que implica que la separación entre niveles es del orden de $e\mathcal{E}a$. A esta estructura de niveles de energía se le conoce como *Escaleras de Stark*.

 APENDICE B.

OPERACION DE X SOBRE LAS FUNCIONES DE WANNIER.

Las funciones de Wannier se obtienen al invertir la ecuación (3.14),

$$a_q(\vec{x}-\vec{\rho}) = \frac{\omega}{8\pi^3} \int e^{i\vec{k}\cdot\vec{\rho}} b_q(\vec{x};\vec{k}) d^3\vec{k} \quad (\text{B.1})$$

aplicando el operador x a la ecuación (B.1) y notando que

$x e^{ikx} = -i \frac{\partial}{\partial k_x} e^{ikx}$ podemos reescribir convenientemente,

$$x a_q(\vec{x}-\vec{\rho}) = \rho a_q(\vec{x}-\vec{\rho}) + i \frac{\omega}{8\pi^3} \int e^{-i\vec{k}\cdot\vec{\rho}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \frac{\partial u(\vec{x},\vec{k})}{\partial k^q} d^3\vec{k} \quad (\text{B.2})$$

Nos interesa desarrollar la integral de la ec.(B.2) de tal manera que exhiba la interacción interbanda. Esto resulta fácil si se considera un desarrollo para la función $\frac{\partial u(\vec{x},\vec{k})}{\partial k^q}$,

$$\frac{\partial u(\vec{x},\vec{k})}{\partial k^q} = \sum_m u_m(\vec{x}) \int u_m^*(\vec{x}') \frac{\partial u(\vec{x}')}{\partial k^q} d^3\vec{x}' \quad (\text{B.3})$$

la cual se puede encontrar en el texto de Smith⁽⁹⁰⁾.

Si además se define al término ξ_{mq} como el responsable de la interacción interbanda,

$$\xi_{mq} = i \int u_m^*(\vec{x}') \frac{\partial u(\vec{x}')}{\partial \vec{k}^q} d^3 \vec{x}' \quad (\text{B.4})$$

la ecuación (B.2) finalmente se expresa,

$$x a_q(\vec{x}-\vec{\rho}) = \rho a_q(\vec{x}-\vec{\rho}) + i \omega \frac{1}{8\pi^3} \int e^{-i\vec{k}\cdot\vec{\rho}} \sum_m b_m(\vec{x};\vec{k}) \xi_{mq} d^3 \vec{k} \quad (\text{B.5})$$

Para el caso $\vec{\rho}=0$ se reproduce un resultado similar al obtenido por Blount.⁽⁹⁵⁾

 APENDICE C.

EVOLUCION TEMPORAL DE LAS FUNCIONES DE BLOCH EN PRESENCIA DE UN CAMPO ELECTRICO.

Sabemos que la solución de la ec. de Schrödinger (3.21) a un tiempo t es,

$$\Psi(\vec{x}, t) = \exp[-i/\hbar \mathcal{H} t] \Psi(\vec{x}, 0) \quad (C.1a)$$

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 - e\vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{x} \quad (C.1b)$$

Si en lugar de tener una función arbitraria $\Psi(\vec{x}, 0)$ tenemos una función de Bloch la cual denotamos por $b(\vec{x}; \vec{k}_0)$ en $t=0$, entonces $b(\vec{x}; \vec{k})$ nos dará el comportamiento de $b(\vec{x}; \vec{k}_0)$ a un tiempo t ,

$$b(\vec{x}; \vec{k}) = \exp[-i\mathcal{H} t / \hbar] b(\vec{x}; \vec{k}_0) \quad (C.2)$$

La ec.(C.2) determina la evolución temporal de una función de Bloch, la cual se puede ver también en términos del propagador $\mathcal{O}(t) = \exp[-i\mathcal{H} t / \hbar]$. Ahora, se tiene que demostrar que la función dada por la ec.(C.2) es una función de Bloch. Esto se hace analizando el cambio en un pequeño intervalo de tiempo de la función (C.2), dado por,

$$b(\vec{x}; \vec{k}) = (1 - i/\hbar \mathcal{H} dt) b(\vec{x}; \vec{k}_0) \quad (C.3)$$

Aplicando el operador de traslación $T(\vec{\rho}) = \exp[i\vec{p} \cdot \vec{\rho} / \hbar]$ a la

función (C.3) y utilizando además el hecho de que el operador de traslación $T(\vec{\rho})$ no conmuta con el Hamiltoniano,

$$[T(\vec{\rho}), \mathcal{H}] = -e\vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{\rho} T(\vec{\rho}) \quad (C.4)$$

tenemos que,

$$T(\vec{\rho})b(\vec{x}; \vec{k}) = \exp[-i/\hbar \int_0^t (e\vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{\rho}) dt] \exp[i\vec{k} \cdot \vec{\rho}] b(\vec{x}; \vec{k}_0) \quad (C.5)$$

la expresión anterior se puede escribir como,

$$T(\vec{\rho})b(\vec{x}; \vec{k}) = \exp[i\vec{k} \cdot \vec{\rho}] b(\vec{x}; \vec{k}) \quad (C.6)$$

observando que el vector de onda \vec{k} de la ec.(C.6) tiene la forma $\vec{k} = \vec{k}_0 + e\vec{\mathcal{E}}t/\hbar$. Por lo tanto $b(\vec{x}; \vec{k})$ es una función de Bloch con vector de onda $\vec{k} = \vec{k}_0 + e\vec{\mathcal{E}}t/\hbar$. Por otro lado la dependencia temporal de \vec{k} también se puede ver a partir de la dependencia que guardan los operadores de traslación $T(\vec{\rho})$ considerando la relación usual,

$$[T(\vec{\rho}), \mathcal{H}] = i\hbar \frac{dT(\vec{\rho})}{dt} \quad (C.7)$$

lo que nos conduce con ayuda de (C.4) a que,

$$i\hbar \frac{dT(\vec{\rho})}{dt} = -e\vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{\rho} T(\vec{\rho}) \quad (C.8)$$

Se puede ver de la ecuación (C.8) que el vector \vec{k} puede considerarse dependiente del tiempo y que cumple con la relación,

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = e\vec{\mathcal{E}}/\hbar \quad \text{o} \quad \vec{k} = \vec{k}_0 + e\vec{\mathcal{E}}t/\hbar \quad (C.9)$$