

TESIS CARRERA DE DOCTORADO EN FÍSICA

**EFFECTOS DE LA INTERACCIÓN ELECTRÓN-ELECTRÓN Y
CAMPOS MAGNÉTICOS EN GASES BIDIMENSIONALES DE
ELECTRONES**

Daniel Miravet Martínez
Doctorando

Dr. César R. Proetto
Director

Febrero de 2019

Teoría de la Materia Condensada – Centro Atómico Bariloche

Instituto Balseiro
Universidad Nacional de Cuyo
Comisión Nacional de Energía Atómica
Argentina

Índice de símbolos

DFT	Teoría de la funcional densidad (del inglés <i>Density Functional Theory</i>).
LDA	Aproximación de densidad local (del inglés <i>Local Density Approximation</i>).
LSDA	Aproximación de densidad de espín local (del inglés <i>Local Spin Density Approximation</i>).
2DEG	Gas bidimensional de electrones (del inglés <i>2-dimensional electrons gas</i>).
q2DEG	Gas cuasi-bidimensional de electrones (del inglés <i>quasi 2-dimensional electrons gas</i>).
DOS	Densidad de estados (del inglés <i>Density of States</i>).
LL	Nivel de Landau (del inglés <i>Landau Level</i>).
EE	Intercambio exacto (del inglés <i>Exact exchange</i>).
KLI	Aproximación de Krieger, Li e Iafrate.
KS	Kohn-Sham.
xc	Intercambio y correlación (del inglés <i>Exchange and correlation</i>).
OEP	Método de potencial efectivo optimizado (del inglés <i>Optimized effective potential</i>).
QHE	Efecto Hall cuántico (del inglés <i>Quantum Hall effect</i>).
IQHE	Efecto Hall cuántico entero (del inglés <i>Integer quantum Hall effect</i>).
QHF	Ferromagnetismo Hall cuántico (del inglés <i>Quantum Hall ferromagnetism</i>).
HF	Hartree-Fock.

Índice de contenidos

Índice de símbolos	i
Índice de contenidos	iii
Resumen	vii
Abstract	ix
1. Introducción general	1
1.1. Introducción	1
1.2. Organización de la tesis	4
2. Gases de electrones y el efecto Hall cuántico	7
2.1. Introducción a los q2DEG	7
2.2. Estados de un electrón en un campo magnético perpendicular al quasi-2DEG	8
2.2.1. Inclusión de impurezas y ensanchamiento	11
2.2.2. Cálculo de los coeficientes de magneto-transporte	12
3. Teoría de la funcional densidad	15
3.1. Principio variacional para la densidad	15
3.2. Teorema de Hohenberg-Kohn	17
3.3. Ecuaciones de Kohn-Sham	18
3.4. Sistemas con número de partículas variable	21
3.5. Funcionales de intercambio y correlación	23
4. Gases de electrones y aproximación de intercambio exacto	27
4.1. Esquema de KS para un q2DEG con un campo magnético aplicado	27
4.2. Intercambio exacto en el efecto Hall cuántico	29
4.3. Aproximación KLI	33
4.4. Una sub-banda ocupada	36

5. Tres gases de electrones acoplados	39
5.1. Introducción	39
5.2. Modelo	40
5.3. Resultados	45
5.3.1. Límite $d^* = 0$	45
5.3.2. Resultados numéricos para el modelo general	48
5.4. Conclusiones	52
6. Anisotropía de pseudo-espín para un semiconductor tricapa	53
6.1. Introducción	53
6.2. Modelo y estados de una partícula	54
6.3. Hamiltoniano de muchos cuerpos	56
6.4. Anisotropía magnética	59
6.4.1. Cruce de niveles de Landau provenientes de la misma sub- banda : $\xi(\downarrow) = \xi(\uparrow)$	60
6.4.2. Cruce de niveles de Landau provenientes de distintas sub- bandas: $\xi(\downarrow) \neq \xi(\uparrow)$	61
6.4.3. Resultados numéricos para el caso general	64
6.5. Términos de una partícula	69
6.6. Conclusiones	72
7. Teoría de la funcional densidad e intercambio exacto en el efecto Hall cuántico	75
7.1. Intercambio exacto para sistemas quasi-2D	75
7.1.1. Resultados y discusión	76
7.1.2. Conclusiones	82
7.2. Intercambio exacto en un sistema 2D estricto	83
7.2.1. La aproximación x -LSDA para un gas de electrones estrictamente 2D	86
7.2.2. Resultados y discusiones	87
7.2.2.1. Comparación entre intercambio exacto y x -LSDA a campo magnético finito	87
7.2.2.2. Límite de campo magnético cero	90
7.2.2.3. Dependencia en z de $v_x^\sigma(z)$	91
7.2.3. Conclusiones	94
8. Efectos de muchos cuerpos en mapas de resistividad	95
8.1. Sistema de tres pozos cuánticos en la aproximación LSDA	95
8.1.1. Sistema no interactuante	96
8.1.2. Sistema interactuante	97

8.1.2.1. Contribución de Hartree	97
8.1.2.2. Contribución de Hartree e intercambio y correlación	99
8.1.3. Modelo estrictamente 2D	99
8.1.3.1. Mapa de resistividad a $\nu = 3$	101
8.1.3.2. Mapa de resistividad a $\nu = 4$	103
8.1.3.3. Conclusiones	107
8.2. Un pozo cuántico con dos sub-bandas ocupadas	107
Conclusiones y perspectivas	111
A. Apéndices	115
A.1. Potencial de intercambio como suma de tres términos	115
A.2. Algunos resultados analíticos para la integral de intercambio inter- lámina	117
A.3. Límite de campo cero para integrales de intercambio	118
Bibliografía	121
Publicaciones asociadas	131
Agradecimientos	133

Resumen

En este trabajo hemos estudiado los efectos de la interacción electrón-electrón y campos magnéticos en gases cuasi-bidimensionales de electrones (q2DEGs). Para estos sistemas, con un campo magnético aplicado en la dirección de cuantización, se estudiaron los efectos de las interacciones electrónicas en el régimen del efecto Hall cuántico entero. En una primera etapa, se usó la aproximación de Hartree-Fock variacional para estudiar los posibles cruces de niveles de Landau en un sistema de tres láminas semiconductoras acopladas. A partir de este estudio se determinó en que situaciones los niveles de Landau se "anti-cruzan" (estados "easy-axis") o se mezclan (estados "easy-plane"), al coincidir sus energías con el potencial químico μ . Se demuestra que este comportamiento es una consecuencia de la competencia entre las interacciones de Hartree e intercambio.

Para el estudio de los q2DEGs dentro del marco de la teoría de funcional densidad (DFT), se desarrolló el formalismo de intercambio exacto para estos sistemas con campo magnético aplicado. Se obtuvo un funcional para la energía de intercambio que se minimiza de manera no analítica en los valores enteros del factor de llenado ν . Se encontró una solución analítica para el potencial de intercambio exacto en el régimen de una subbanda ocupada. Este potencial presenta discontinuidades en los valores entero de ν , que pueden ser inducidas incluso a densidad constante, variando el campo magnético. Estos funcionales de intercambio exacto presentan notables diferencias con los correspondientes en la aproximación de densidad local.

Por último, dentro de la DFT, utilizando el esquema de Kohn-Sham (KS) y respuesta lineal se calculó la resistividad longitudinal ρ_{xx} para dos sistemas de interés desde el punto de vista experimental. Se evidenció en los cálculos la importancia de las interacciones, principalmente en las regiones donde se cruzan varios niveles de Landau. Los resultados obtenidos son bastante cercanos a los experimentos.

Palabras clave: EFECTO HALL CUÁNTICO, TEORÍA DE FUNCIONAL DENSIDAD, INTERCAMBIO EXACTO, POZOS CUÁNTICOS.

Abstract

In this work we have studied the effects of electron-electron interaction and magnetic fields in quasi-two-dimensional electron gases (q2DEGs). For these systems with an applied perpendicular magnetic field, the effects of electronic interactions on the integer quantum Hall effect regime were studied. In a first stage, a variational Hartree-Fock approximation was used to study the possible crossings of Landau levels in a system of three coupled semiconductor layers. We has determined in which situations the Landau levels present a "anti-crossing" behavior (easy-axis states) or they are mixed (easy-plane states), when their energies coincide with the chemical potential μ . It is shown that this behavior is a consequence of the competition between Hartree and exchange interactions.

For the study of q2DEGs within the framework of the density functional theory (DFT), the exact exchange formalism was developed for these systems with an applied magnetic field. A functional for the exchange energy was obtained that is minimized non-analytically at the integer values of the filling factor ν . We found an analytical solution for the exact exchange potential in the one occupied subband regime. This potential has discontinuities at the integer values of ν , which can be induced even at constant density, varying the magnetic field. These exact exchange functionals show notable differences with the corresponding ones in the local density approximation.

Finally, within the DFT framework, using the Kohn-Sham (KS) scheme and linear response, the longitudinal resistivity ρ_{xx} was calculated for two systems of interest from the experimental point of view. The importance of interactions was evidenced in the calculations, mainly in the regions where several Landau levels cross. The results obtained are quite close to the experiments.

Keywords: QUANTUM HALL EFECT, DENSITY FUNCTIONAL THEORY, EXACT EXCHANGE, QUANTUM WELLS.

Capítulo 1

Introducción general

1.1. Introducción

Las extraordinarias propiedades de los dispositivos electrónicos modernos y los nuevos materiales son a menudo una consecuencia del comportamiento complejo del gran número de electrones que forman lo que se conoce como gas de electrones. La determinación del estado fundamental del gas de electrones interactuantes es uno de los problemas más interesantes y desafiantes dentro de la física de la materia condensada. En este trabajo estudiaremos el estado fundamental de los gases de electrones cuasi-bidimensionales (q2DEG) cuando se les aplica un campo magnético en la dirección de confinamiento. Bajo estas condiciones el sistema entra en el régimen conocido como efecto Hall cuántico (QHE).

El **efecto Hall cuántico** se manifiesta en gases cuasi-bidimensionales de electrones con movilidades relativamente altas [1], a los que se le aplican campos magnéticos fuertes ($B \sim (1, 10)T$). La inclusión de un campo magnético perpendicular al q2DEG cuantifica la componente de energía cinética en el plano, formando los niveles de Landau (LL). La degeneración de cada nivel de Landau se escribe usualmente como $N_\phi = AB/\Phi_0$, donde A es el área del sistema y $\Phi_0 = ch/e$ es el cuanto de flujo magnético. El parámetro más utilizado para caracterizar estos sistemas es el factor de llenado

$$\nu = N/N_\phi, \tag{1.1}$$

donde N es número total de electrones. Es decir, cuando los niveles de Landau están suficientemente separados, ν es una medida del número de LLs ocupados.¹ A valores enteros de ν , el potencial químico queda en la brecha de energía (gap) entre dos niveles de Landau y el sistema presenta un comportamiento no trivial, con una

¹Como veremos más adelante, esta imagen se modifica cuando tenemos varios niveles con energías cercanas al potencial químico.

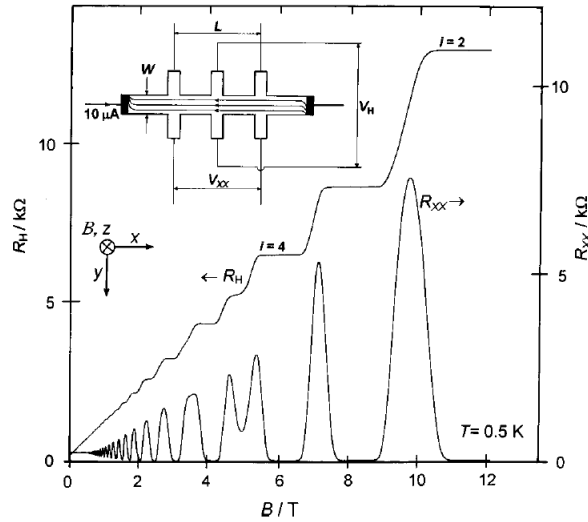


Figura 1.1: Resistencia longitudinal R_{xx} y resistencia transversal o de Hall $R_H = R_{xy}$ como función del campo magnético para una heteroestructura de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ a $T = 0.5 K$. La resistividad y la resistencia están relacionados por $R_{xx} = \rho_{xx}L_x/L_y$ y $R_{xy} = \rho_{xy}$. Note que en muestras cuadradas la resistividad y la resistencia coinciden. Figura tomada de la referencia [3].

resistividad longitudinal ρ_{xx} igual a cero y una resistividad de Hall ρ_{xy} cuantificada. Éstas son las características principales del efecto Hall cuántico entero (IQHE), observado por primera vez por Klitzing, Dorda y Pepper in 1980 [2]. Este régimen se caracteriza mediante mediciones de magnetotransporte con cuatro terminales (ver Fig. 1.1). En estas mediciones se observa que ρ_{xy} presenta plateaus en múltiplos enteros de $\frac{h}{e^2}$ (una constante universal), es decir, $\rho_{xy} = \frac{1}{\nu} \frac{h}{e^2}$, siendo ν el factor de llenado definido anteriormente. Por otra parte, la resistencia ρ_{xx} presenta oscilaciones, conocidas como oscilaciones de Shubnikov-de Haas, con máximos de ρ_{xx} en las transiciones entre plateaus de ρ_{xy} .

La alta precisión obtenida (mejor que una parte en 10^8) en los plateaus fue inesperada. Los resultados no dependían de las características particulares de las muestras como dimensiones, bordes e imperfecciones del material como impurezas. Son tan robustas y precisas las mediciones de la resistencia de Hall que desde el 1ro enero de 1990 se convirtió en el estándar para la determinación de la resistencia eléctrica [4].

A campos magnéticos aún más altos, el aumento en la degeneración de los niveles de Landau lleva a factores de llenado menores que uno y el q2DEG entra en el régimen del efecto Hall cuántico fraccionario, con una fenomenología similar al IQHE, pero a determinados valores fraccionarios del factor de llenado [5].

Muchos experimentos en el IQHE [6–16] se pueden explicar normalmente por modelos no interactuantes que capturan la física de los niveles de Landau llenos en términos de un factor giromagnético efectivo g [6], más una descripción fenomenológica de los estados localizados inducidos por el desorden [17]. Si bien esto

es correcto en muchas situaciones, en esta tesis demostraremos que existen situaciones particularmente relevantes en el cruce entre dos niveles de Landau, donde los efectos de la interacción electrón-electrón son relevantes. Para el estudio de la interacción electrón-electrón tenemos como objetivo extender el formalismo de la *teoría de la funcional densidad* en la *aproximación de intercambio exacto* a sistemas en el régimen del IQHE.

La **Teoría de la Funcional Densidad** (DFT) es una de las herramientas computacionales más utilizadas para el estudio teórico de sistemas interactuantes no homogéneos, como átomos, moléculas y sólidos [18–20]. La idea fundamental para construcción de la teoría de la funcional densidad, introducida en 1964 por Hohenberg y Kohn [21], es escribir el estado del sistema cuántico en términos de la densidad electrónica, en lugar de usar la función de onda del sistema interactuante. Hohenberg y Kohn demostraron que la energía del estado fundamental de un sistema cuántico se puede determinar minimizando la energía como una funcional de la densidad. Una característica interesante de esta funcional es que es universal, en el sentido de que es la misma para todos los sistemas de N electrones con interacción de Coulomb.

El esquema de minimización es propuesto en 1965 por Kohn y Sham [22], donde sugieren un método para obtener la densidad del estado fundamental de un sistema de muchos cuerpos a través de unas ecuaciones efectivas, conocidas en la actualidad como *ecuaciones de Kohn-Sham* (KS). La principal ventaja que ofrece este esquema es su bajo costo computacional, que crece como una potencia del número de electrones en el sistema, mientras que la solución de la ecuación de Schrödinger para el sistema de N electrones tiene un costo que crece exponencialmente con N .

En la implementación de KS, al sistema interactuante real se le hace corresponder un sistema no interactuante auxiliar, con la misma densidad que el sistema interactuante, donde todas las interacciones están incluidas en un potencial efectivo de una partícula $V_{KS}(\mathbf{r})$. El ingrediente crucial de este potencial es su contribución de intercambio y correlación, que es obtenido a partir de la funcional energía de intercambio y correlación $E_{xc}[\rho(\mathbf{r})]$, donde $\rho(\mathbf{r})$ es la densidad electrónica. Si bien se suele afirmar que E_{xc} no se conoce, esto no es completamente correcto: E_{xc} se puede dividir en sus contribuciones de intercambio (E_x) y correlación (E_c), donde solo esta última contribución es la que realmente se desconoce. A partir de la expresión de Fock para la energía E_x se puede obtener el potencial local de **intercambio exacto** (EE) correspondiente, que se utilizará en las ecuaciones efectivas de una sola partícula [23, 24].

A lo largo de los años, se han logrado muchas ventajas con el formalismo de EE. Por citar solo algunas: correcto comportamiento asintótico de $V_{KS}(\mathbf{r})$ para átomos y moléculas [23] y para superficies sólidas [25], la cancelación completa del error de autointeracción entre la energía de Hartree y las aproximaciones convencionales

para la energía de intercambio [24] y la mejora significativa de las estimaciones de la brecha de energía de semiconductores [26].

El método EE también proporciona una solución natural al problema de los sistemas electrónicos de dimensionalidad reducida. A diferencia de las funcionales habituales basadas en aproximaciones de densidad local, en el esquema de EE E_x es una funcional explícita de los orbitales KS, por lo que la dimensionalidad del sistema se incluye de forma automática y rigurosa. Un buen ejemplo de esto es la gran mejora conseguida en el cálculo de los efectos de muchos cuerpos sobre las propiedades electrónicas de los q2DEG, usando el formalismo de EE [27, 28].

Posibles generalizaciones del formalismo de la DFT a campos magnéticos grandes en el régimen del efecto Hall cuántico fraccionario han sido propuestas por Ferconi, Geller y Vignale[29] y por Heinonen, Lubin y Johnson[30]. En ambos casos, propusieron una funcional *ad-hoc* $E_{xc}(\nu)$ con discontinuidades en las derivadas (respecto a ν) para los principales valores de ν . Sin embargo, aplicaciones de la DFT en el régimen del efecto Hall cuántico entero han sido mucho menos consideradas, y reducidas a la aproximación de densidad local [31, 32] o a casos límites [33, 34].

En esta tesis haremos un estudio de los efectos de la interacción electrón-electrón en gases cuasi-bidimensionales de electrones. En una primera etapa estudiaremos el estado fundamental sobre un modelo simplificado para estos sistemas en la aproximación de Hartree-Fock variacional. Más adelante realizaremos una extensión del formalismo de intercambio exacto a sistemas q2DEG con un campo magnético aplicado. Dentro de este formalismo, estudiaremos las interesantes propiedades de las funcionales energía de intercambio y simularemos mediciones de resistividad eléctrica.

1.2. Organización de la tesis

Esta tesis contiene ocho Capítulos (incluyendo la Introducción). En los Capítulos 2 y 3 hacemos una presentación teórica general de los dos principales ejes de la tesis: efecto Hall cuántico (Capítulo 2) y Teoría de la funcional densidad (Capítulo 3). En el Capítulo 4 obtenemos las principales ecuaciones que definen el potencial de intercambio exacto en q2DEGs con campo magnético aplicado. En el Capítulo 5, usando el método de Hartree-Fock variacional, hacemos un estudio del estado fundamental para un sistema de tres gases de electrones acoplados a campo magnético cero. En el Capítulo 6, agregamos un campo magnético sobre el sistema estudiado en el Capítulo 5 y hacemos un estudio del estado fundamental del sistema en las situaciones donde se cruzan dos niveles de Landau, en el régimen del efecto Hall cuántico entero. En el Capítulo 7 estudiamos las propiedades de la funcional energía y potencial

de intercambio exacto para sistemas con solo una sub-banda ocupada. Finalmente, en el Capítulo 8 estudiamos los efectos de la interacción electrón-electrón sobre la resistividad longitudinal ρ_{xx} , tanto en la aproximación de densidad local como en la de intercambio exacto.

Capítulo 2

Gases de electrones y el efecto Hall cuántico

2.1. Introducción a los q2DEG

Para el estudio experimental del efecto Hall cuántico se necesitan sistemas de electrones aproximadamente bidimensionales. Éste es el caso de los gases cuasi-bidimensionales de electrones (q2DEG), donde los electrones pueden moverse libremente en dos dimensiones, mientras se encuentran confinados en la tercera [35, 36]. Estas capas de electrones han sido creadas en muchos sistemas, por ejemplo, en transistores de efecto de campo metal-óxido-semiconductor (MOSFET) y en heteroestructuras semiconductoras. Uno de los sistemas más utilizados para la formación de estos q2DEG son las heteroestructuras semiconductoras de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ ya que las constantes de red del $GaAs$ y el $Al_xGa_{1-x}As$ son muy parecidas y la interfaz queda esencialmente libre de desorden. Por otra parte, los portadores de carga (electrones de conducción) en estos sistemas están espacialmente separados de las impurezas ionizadas a través el dopaje modulado; lo que lleva a movilidades de los portadores altas [1, 35]. El estudio teórico de estos sistemas lo haremos en el marco de la aproximación de la masa efectiva [35]. En esta aproximación, la dinámica de los electrones en el sólido se aproxima por la dinámica de electrones libres con una masa renormalizada por la curvatura de la relación de dispersión del fondo de la banda de conducción del semiconductor. Teniendo esto en cuenta, podemos escribir el espectro de energía de los electrones en estos q2DEG en ausencia de campo magnético, de la forma

$$E_i(\mathbf{k}) = \varepsilon_i + \frac{\hbar^2 |\mathbf{k}|^2}{2m^*}, \quad (2.1)$$

donde m^* es la masa efectiva de los electrones (por ejemplo, para el *GaAs* $m^* = 0.067 m_0$, m_0 es masa del electrón libre), $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ es el vector de onda en el plano xy y ε_i es la energía de la sub-banda ($i = 1, 2, 3, \dots$). Por su parte, la función de onda en el plano tiene forma de ondas planas

$$\phi(x, y) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\rho}}}{\sqrt{A}}, \quad (2.2)$$

donde A es el área del sistema y $\boldsymbol{\rho} = (x, y)$ es la coordenada en el plano. Si consideramos que el área $A = L_x \times L_y$ es macroscópica e imponemos condiciones de contorno periódicas, los valores permitidos para \mathbf{k} son de la forma $\mathbf{k} = (\frac{2\pi}{L_x}n_x, \frac{2\pi}{L_y}n_y)$, con n_x, n_y enteros, por lo que el área "ocupada" en el espacio \mathbf{k} por un estado es $\frac{4\pi^2}{A}$. Entonces el número de estados con energía E (considerando el espín) es

$$N_T(E) = \frac{m^*A}{\pi\hbar^2} \sum_i (E - \varepsilon_i), \quad (2.3)$$

de donde obtenemos que la densidad de estados (DOS) es de la forma

$$g(E) = \frac{dN_T(E)}{dE} = \frac{m^*A}{\pi\hbar^2} \sum_i \theta(E - \varepsilon_i), \quad (2.4)$$

donde $\theta(x)$ es la función escalón de Heaviside. Es decir, la densidad de estados es constante para todos los valores de energía distintos a las energías de sub-banda, donde presenta un salto. Un dibujo esquemático de la dependencia de la densidad de estados con la energía en ausencia de campo magnético se muestra en la Fig. 2.1(a).

En muchas ocasiones, principalmente para simplificar los modelos, se considera que la región de confinamiento es infinitesimal, de forma tal que tenemos un gas de electrones 2D estricto (2DEG). En este límite, las energías ε_i se tornan infinitamente grandes, y todos los electrones se ubican en el nivel fundamental ε_1 (régimen de una sub-banda).

2.2. Estados de un electrón en un campo magnético perpendicular al quasi-2DEG

A partir de aquí estudiaremos cómo se modifican los estados del q2DEG con la aplicación de un campo magnético perpendicular en la dirección z . Para ello, con-

2.2 Estados de un electrón en un campo magnético perpendicular al quasi-2DEG 9

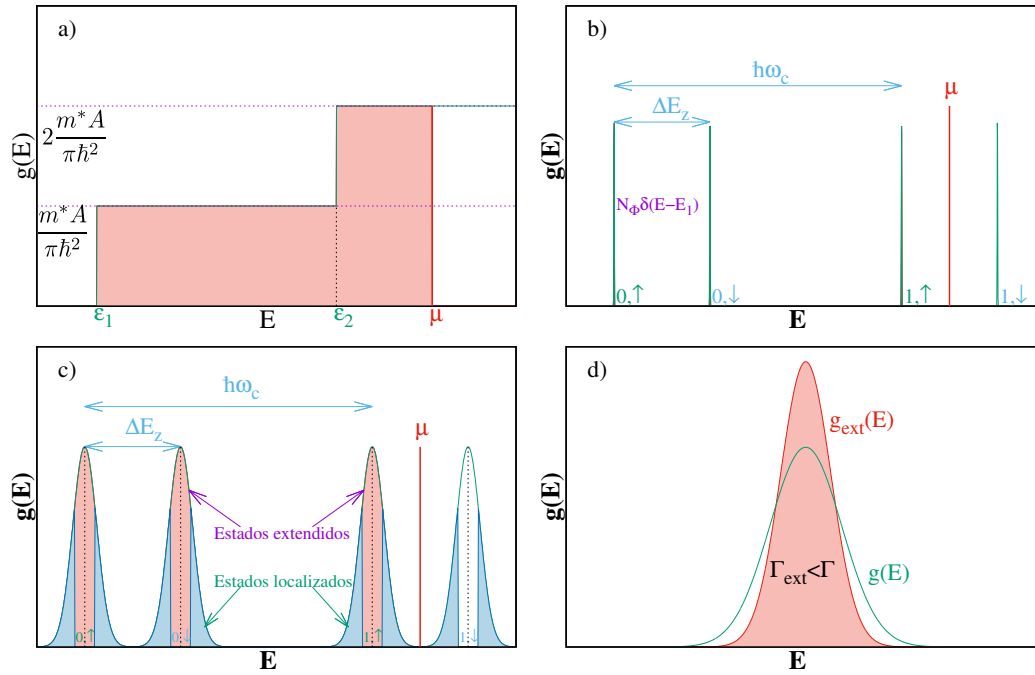


Figura 2.1: Densidad de estados para el q2DEG: (a) Campo cero, (b) campo magnético aplicado y (c) campo magnético aplicado considerando impurezas. (d) Dibujo esquemático de la hipótesis de Prange.

sideremos un sistema semiconductor cuasi-bidimensional de electrones en el plano xy , confinados en la dirección z por un potencial $V(z)$. En el plano xy consideraremos que el sistema es infinito y tiene simetría de traslación, es decir, potencial constante y sin impurezas ni defectos. Si aplicamos un campo magnético $\mathbf{B} = B\hat{z}$ en la dirección z , el hamiltoniano no interactuante para los electrones puede ser escrito como

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A})^2}{2m^*} + V(z) + \frac{1}{2}g\mu_B\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (2.5)$$

donde \mathbf{p} es el operador momento lineal, \mathbf{A} es el potencial vector correspondiente al campo magnético $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, m^* es la masa efectiva de los electrones en el semiconductor, g es el factor giromagnético efectivo ($g = -0.44$ para el $GaAs$), μ_B es el magnetón de Bohr y $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ son las matrices de Pauli. Teniendo en cuenta que nuestro sistema tiene simetría de traslación en el plano xy , la medida ("gauge") más adecuada para la elección del potencial vector es la medida de Landau, $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$, que mantiene la simetría de traslación en la dirección y . Entonces el hamiltoniano nos queda de la forma

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2m^*} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} + \frac{e}{c} Bx \right)^2 - \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) + \frac{1}{2} g\mu_B B \sigma_z. \quad (2.6)$$

Dado que el hamiltoniano no depende explícitamente de y y no hay términos que acoplen las componentes x y z , podemos escribir la solución de la ecuación de Schrödinger $\hat{H}\Psi_{i,n,k_y}^\sigma(x, y, z) = E_{i,n,k_y}^\sigma \Psi_{i,n,k_y}^\sigma(x, y, z)$ como

$$\Psi_{i,n,k_y}^\sigma(x, y, z) = \frac{e^{ik_y y}}{\sqrt{L_y}} \phi_{n,k_y}(x) \lambda_i^\sigma(z), \quad (2.7)$$

y de esta forma podemos separar el hamiltoniano en dos contribuciones. La primera para la componente x de la función de onda, de la forma

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega_c^2}{2} (x - x_0)^2 \right] \phi_{n,k_y}(x) = \varepsilon_{n,k_y} \phi_{n,k_y}(x) \quad (2.8)$$

y la segunda para la componente z

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \right] \lambda_i^\sigma(z) = \varepsilon_i^\sigma \lambda_i^\sigma(z) = \left(E_{i,n,k_y}^\sigma - \varepsilon_{n,k_y} - \frac{1}{2} g\mu_B B \sigma \right) \lambda_i^\sigma(z), \quad (2.9)$$

donde $\omega_c = \frac{eB}{m^*c}$ es la frecuencia ciclotrónica, $x_0 = -l_B^2 k_y$, $\sigma = \pm 1$ describe la componente en z del espín del electrón ($\sigma_z \Psi_{i,n,k_y}^\sigma = \sigma \Psi_{i,n,k_y}^\sigma$) y $l_B = \sqrt{\frac{\hbar c}{eB}}$ es la longitud magnética. La ecuación para la componente x de la función de onda es la ecuación de Schrödinger para el oscilador armónico unidimensional, cuya función de onda se escribe de la forma

$$\phi_{n,k_y}(x) = \frac{\exp\left[-\frac{(x-l_B^2 k_y)^2}{2l_B^2}\right]}{[\sqrt{\pi} l_B 2^n (n!)]^{1/2}} H_n\left(\frac{x-l_B^2 k_y}{l_B}\right), \quad (2.10)$$

donde $H_n(x)$ son los polinomios de Hermite de orden n . Por su parte, las autoenergías quedan de la forma

$$\varepsilon_{n,k_y} \equiv \varepsilon_n = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (2.11)$$

Finalmente vemos que la energía total del electrón se puede escribir como

$$E_{i,n,k_y}^\sigma \equiv E_{i,n}^\sigma = \varepsilon_i^\sigma + \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2}g\mu_B B\sigma \quad (2.12)$$

donde el primer término ε_i^σ es la energía de sub-banda, proveniente de los autovalores de la ecuación de Schrödinger en z , el segundo es el término orbital, asociado a los niveles de Landau y el tercero $\Delta E_z = \frac{1}{2}g\mu_B B\sigma$ es el término de Zeeman.

El estado representado por la autofunción de la Ec.(2.10) con energía dada por la Ec.(2.11) es lo que se conoce como nivel de Landau. Podemos ver además que estos niveles de Landau son degenerados, ya que estados con diferentes valores de k_y en la Ec.(2.10) tienen la misma energía (2.11). Para calcular la degeneración, podemos suponer que la partícula está confinada en el plano xy en una región macroscópica de dimensiones $L_x \times L_y$ e imponer condiciones de contorno periódicas en la dirección y , obteniendo que los posibles valores que puede tomar k_y están separados en $\Delta k_y = 2\pi/L_y$. Si observamos (2.10) vemos que la función de onda en la dirección x representa estados exponencialmente localizados, con centro en $l_B^2 k_y$ y longitud de localización del orden de l_B . Teniendo en cuenta los posibles valores de k_y , obtenemos que la separación entre los centros de localización de los estados es $l_B^2 \Delta k_y = 2\pi l_B^2 / L_y$; de donde se obtiene que la cantidad de estados contenidos en la región de dimensiones $L_x \times L_y$ es

$$N_\phi = \frac{L_x L_y}{2\pi l_B^2} = A \frac{eB}{hc}, \quad (2.13)$$

donde $A = L_x \times L_y$. Dado que la energía no depende de k_y , la densidad de estados $g(\varepsilon)$ para un 2DEG con un campo magnético perpendicular aplicado viene dada por distribuciones tipo delta de Dirac, centradas en los niveles de Landau $E_{i,n}^\sigma$,

$$g(E) = \sum_{i,n,\sigma,k_y} \delta(E - E_{i,n}^\sigma) = N_\phi \sum_{i,n,\sigma} \delta(E - E_{i,n}^\sigma), \quad (2.14)$$

de donde vemos que la aplicación del campo magnético modifica el comportamiento constante de la densidad de estados y la convierte en un conjunto de funciones deltiformes centrados en los niveles de Landau (Fig. 2.1(b)).

2.2.1. Inclusión de impurezas y ensanchamiento

En presencia de impurezas y defectos, se rompe la degeneración de los LLs, por lo que se ensancha la densidad de estados alrededor de las energías $E_{i,n}^\sigma$. Esta característica de la densidad de estados $g(E)$ es esencial para que se manifieste el IQHE.

Son muchos los trabajos que se han concentrado, tanto teórica como experimentalmente, en estudiar el comportamiento de la densidad de estados en presencia de un potencial de desorden [1]. Los principales resultados de estos trabajos se pueden resumir de la siguiente manera: el ancho de cada nivel de Landau Γ es proporcional a \sqrt{B} . Los estados en los extremos de la densidad de estados están localizados, mientras que los estados en la región de máximo de $g(E)$ son no-localizados (extendidos); estos últimos son los que contribuyen a la conductividad longitudinal σ_{xx} y a la corriente de Hall. A la región de los estados localizados se le conoce como *gap de movilidad* (en inglés, *mobility gap*) y a su frontera con la región de estados extendidos se le conoce como *borde de movilidad*. El problema de determinar la frontera entre estados localizados y extendidos no está resuelto y actualmente es un tema de investigación activo. Si bien no hay una forma precisa para la densidad de estados en presencia de desorden, existen varias propuestas semi-empíricas [35], aunque la más popular por su cercanía a los resultados numéricos es la siguiente:

$$g(E) = N_\phi \sum_{i,n,\sigma} \frac{1}{\sqrt{2\pi} \Gamma} \exp \left[-\frac{(E - E_{i,n}^\sigma)^2}{2\Gamma^2} \right], \quad (2.15)$$

donde Γ es una medida del ensanchamiento de la densidad de estados. En esta tesis, basados en los resultados de la referencia [31], usaremos la relación $\Gamma = \Gamma_0 \sqrt{B}$, donde Γ_0 es un parámetro libre. En la Fig. 2.1(c) se muestra esquemáticamente como se modifica la densidad de estados en un q2DEG: primero con la inclusión del campo magnético, se forman funciones deltiformes centradas en los LLs y luego con la presencia de las impurezas estas funciones se ensanchan.

2.2.2. Cálculo de los coeficientes de magneto-transporte

La cuantización de los plateaus de resistividad (Fig. 1.1) puede ser explicada por varios modelos, aquí comentaremos las ideas principales. Para más detalles recomendamos ver la referencia [1]. En primer lugar, tenemos el modelo de Laughlin [37], donde se obtiene la cuantización como una consecuencia de la invariancia de medida de la ecuación de Schrödinger. Esta invariancia sobrevive en presencia de impurezas, de forma tal que se preserva la cuantización. Por otra parte, está el modelo de Prange [38], donde los estados localizados no contribuyen directamente a la corriente. Sin embargo, en la región de los plateaus, los electrones en los estados extendidos son impulsados por un campo efectivo creado por los electrones localizados. Otros modelos consideran los estados de borde [39, 40], donde los electrones se mueven por los extremos diferentes de la muestra en sentidos opuestos, de forma tal que producto de la separación espacial se reduce el apantallamiento entre estos.

Todas estas descripciones se unifican en el modelo de invariantes topológicos [41], donde se demuestra que cuando el potencial químico se encuentra en un gap, los coeficientes de magneto-transporte se pueden escribir como invariantes topológicos que no dependen de las condiciones de contorno.

Los modelos mencionados anteriormente ofrecen una buena descripción de la resistividad de Hall ρ_{xy} , pero no explican completamente la transición entre los plateaus de ρ_{xy} y los máximos en ρ_{xx} correspondientes. En la referencia [42] proponen un modelo fenomenológico para obtener los coeficientes de magneto-transporte. En la misma, para calcular las componentes del tensor de conductividad σ_{xx} y σ_{xy} , utilizan las expresiones derivadas por Ando a través del formalismo de Kubo [43]. En lugar de la densidad de estados $g(E)$, utilizan una densidad de estados $g_{ext}(E)$, que considera los estados extendidos a través del modelo de Prange:

$$g_{ext}(E) = N_\phi \frac{1}{\sqrt{2\pi} \Gamma_{ext}} \exp \left[-\frac{(E - E_{i,n}^\sigma)^2}{2\Gamma_{ext}^2} \right], \quad (2.16)$$

donde $\Gamma_{ext} < \Gamma$, es el ancho efectivo de la región de estados extendidos. Esta distribución de estados extendidos se puede entender como una distribución efectiva, donde los estados extendidos tienen las velocidades incrementadas producto del campo efectivo de los electrones localizados.

Teniendo en cuenta lo mencionado anteriormente, se obtiene [42]

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2 \pi^2 l_B^4 \Gamma_{ext}^2}{\hbar} \sum_{i,n,\sigma} \left(n + \frac{1}{2} \right) \int dE \left(-\frac{df_{FD}(E)}{dE} \right) [g_{ext}(E)]^2, \quad (2.17)$$

$$\sigma_{xy} = \frac{e}{B} \sum_{i,n,\sigma} \int f_{FD}(E) g_{ext}(E) dE = \frac{e}{B} n_{ext}, \quad (2.18)$$

donde n_{ext} puede interpretarse como la densidad efectiva de electrones que contribuyen a la conductividad. $f_{FD}(E) = [1 + e^{(E-\mu)/(k_B T)}]^{-1}$ es la distribución de Fermi-Dirac y μ es el potencial químico. La presencia del término $-\frac{df_{FD}(E)}{dE}$ en la Ec.(2.17) indica que la conductividad longitudinal σ_{xx} depende principalmente de los estados cercanos al potencial químico μ , mostrando valores distintos de cero solo para valores de μ cercanos a la zona de los estados extendidos. A temperaturas bajas ($T \ll 1$) $-\frac{df_{FD}(E)}{dE} \simeq \delta(E - \mu)$, de modo que la resistividad longitudinal depende solamente de los estados en el potencial químico, $\sigma_{xx} \sim [g_{ext}(\mu)]^2$. Por su parte, el término σ_{xy} depende de todos los estados extendidos por debajo de μ , es decir, σ_{xy} "cuenta" el número de estados extendidos ocupados, lo que explica el comportamiento de los plateaus. Estas dos últimas expresiones describen bastante bien el comportamiento de los plateaus en la componente transversal de la conductividad

y las oscilaciones en la componente longitudinal.

Para calcular la resistividad podemos usar la relación entre los tensores de conductividad y resistividad $\hat{\rho} = \hat{\sigma}^{-1}$, obteniendo

$$\hat{\rho} = \frac{1}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & -\sigma_{xy} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{xx} \end{pmatrix}. \quad (2.19)$$

En la ecuación anterior se puede notar una característica interesante del efecto Hall cuántico: siempre que $\sigma_{xy} \neq 0$, la conductividad σ_{xx} y la resistividad ρ_{xx} se anulan al mismo tiempo. En muchas ocasiones diremos que se “destruye” el IQHE cuando se cruzan dos niveles de Landau, con esto nos referimos a que la conductividad longitudinal deja de ser cero producto de que el potencial químico deja de estar en un *gap de movilidad*. Es decir, cuando el factor de llenado ν es entero podemos usar la resistividad (conductividad) longitudinal ρ_{xx} (σ_{xx}) para identificar los cruces entre niveles de Landau. Esta idea será tratada con más detalle en el Capítulo 8.

Cabe aclarar que en los cálculos numéricos desarrollados en esta tesis usamos dos densidades de estados: en los cálculos de la estructura electrónica y potencial químico usamos $g(\epsilon)$ con ancho Γ dada por la Ec.(2.15), mientras que para los cálculos de transporte usamos $g_{ext}(\epsilon)$ con ancho Γ_{ext} dada por la Ec.(2.16). De esta manera logramos que se cumpla la hipótesis de Prange usando valores de ensanchamiento para la DOS tales que $\Gamma_{ext} < \Gamma$ (Fig. 2.1(d)).

Capítulo 3

Teoría de la funcional densidad

En este Capítulo presentaremos de manera simple (y no rigurosa) las principales ideas y teoremas de la DFT, no necesariamente siguiendo el orden cronológico. Para más detalles, puede consultar el libro de Parr y Yang [18] o el libro de Dreizler y Gross [44]. Para un recorrido rápido, pero a la vez amplio de la DFT, más enfocado en los gases de electrones, recomendamos el libro de Giuliani y Vignale [45].

3.1. Principio variacional para la densidad

Consideremos un sistema con N electrones, que se mueven bajo la influencia de un potencial externo $V(\mathbf{r})$ y la interacción de Coulomb repulsiva entre ellos. El hamiltoniano correspondiente tiene la forma

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} + \hat{V}, \quad (3.1)$$

donde \hat{T} y \hat{U} representan a la energía cinética y la interacción de Coulomb respectivamente, \hat{V} representa a la energía potencial asociada a determinado potencial local externo $V(\mathbf{r})$, que contiene la interacción de los electrones con los núcleos.¹ La energía potencial puede ser escrita como

$$\hat{V} = \int V(\mathbf{r}) \hat{\rho}(\mathbf{r}) d^3r, \quad (3.2)$$

donde $\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}}_i)$ es el operador densidad.

Un paso crucial en la construcción de la DFT es transformar el principio variacional de Rayleigh-Ritz para la función de onda en un principio variacional para la

¹Para esto se hace uso de la aproximación de Born-Oppenheimer [46], donde se considera que la dinámica de los electrones es mucho más rápida que la de los núcleos.

densidad. A continuación mostraremos la manera más elegante de hacer esta transformación, propuesta por Levy [47, 48].

El principio variacional de Rayleigh-Ritz plantea que podemos encontrar la energía del estado fundamental a partir de la minimización del valor esperado del hamiltoniano respecto a la función de onda:

$$E = \min_{\psi} \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle, \quad (3.3)$$

donde la función de onda ψ debe ser antisimétrica ante el intercambio de dos electrones. En un primer paso fijamos una densidad $\rho(\mathbf{r})$ (tal que $\int \rho(\mathbf{r}) d^3r = N$) y minimizamos (3.3) sobre el subconjunto de funciones de onda que producen esta densidad. De aquí obtenemos un mínimo condicionado

$$\begin{aligned} E_v[\rho] &= \min_{\psi \rightarrow \rho(\mathbf{r})} \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \\ &= F[\rho] + \int V(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) d^3r, \end{aligned} \quad (3.4)$$

donde hemos definido

$$F[\rho] = \min_{\psi \rightarrow \rho(\mathbf{r})} \langle \psi | \hat{T} + \hat{U} | \psi \rangle. \quad (3.5)$$

El segundo paso es minimizar $E_v[\rho]$ respecto a la densidad. Esto nos lleva al principio variacional para la densidad

$$E = \min_{\rho(\mathbf{r})} \left\{ F[\rho] + \int V(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) d^3r \right\}. \quad (3.6)$$

Mirando hacia atrás vemos que toda la complejidad del principio variacional original queda incluida en la definición de la funcional $F[\rho]$ (Ec.(3.5)). Esta funcional es universal, ya que representa una propiedad intrínseca del sistema interactuante, es el mismo para todos los sistemas de electrones que interactúen coulombianamente, independiente de cual sea el potencial externo $V(\mathbf{r})$. El esquema de minimización presentado en la Ec.(3.6) se puede escribir como

$$\frac{\delta E_v[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r})} = 0. \quad (3.7)$$

Es decir, la densidad del estado fundamental que minimiza la energía debe satisfacer la ecuación

$$\frac{\delta F[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r})} = -V(\mathbf{r}). \quad (3.8)$$

En caso que la Ec.(3.8) tenga más de una solución, nos quedamos con la de menor energía.

En este punto es conveniente dejar claras algunas cosas. En primer lugar, de la definición de la funcional $F[\rho]$ (3.5) se ve que éste es muy difícil (o imposible) de calcular: no en vano el estudio riguroso de las propiedades matemáticas de $F[\rho]$ es en la actualidad un área de investigación activa. En segundo lugar, note que hasta este punto la funcional $F[\rho]$ solo está definida para densidades tales que $\int \rho(\mathbf{r}) d^3r = N$, donde N es entero. Es decir en (3.8) sólo podemos considerar variaciones de la densidad que no cambien N , tales que $\int \delta \rho(\mathbf{r}) d^3r = 0$.

3.2. Teorema de Hohenberg-Kohn

Se dice que una densidad electrónica $\rho(\mathbf{r})$ es *V-representable* si puede ocurrir en el estado fundamental de \hat{H} con un potencial local apropiado $V(\mathbf{r})$. En esta sección demostraremos que este potencial es único.

La idea que marcó el nacimiento de la DFT, propuesta en la referencia [21], plantea que *el potencial $V(\mathbf{r})$ está únicamente determinado, salvo una constante, por la densidad electrónica $\rho(\mathbf{r})$ del estado fundamental*. Es decir, no es posible encontrar dos potenciales que difieran en más de una constante a los que corresponda la misma densidad del estado fundamental. Esta afirmación, conocida actualmente como teorema de Hohenberg-Kohn (HK), se puede considerar como el inicio de la DFT. Como implicación del teorema podemos ver que el conocimiento de la densidad del estado fundamental, determina (en principio) el hamiltoniano, las funciones de onda y por tanto todos los observables del sistema.

El teorema de HK se puede demostrar por reducción al absurdo, como veremos a continuación. Supongamos que tenemos dos potenciales $V(\mathbf{r})$ y $V'(\mathbf{r})$ que difieren en más de una constante, tales que los hamiltonianos $\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} + \hat{V}$ y $\hat{H}' = \hat{T} + \hat{U} + \hat{V}'$ tienen la misma densidad del estado fundamental $\rho(\mathbf{r})$. Sean $|\psi\rangle$ y $|\psi'\rangle$ los autoestados fundamentales correspondientes a \hat{H} y \hat{H}' , con energías E y E' respectivamente. Observemos que $|\psi\rangle$ no puede ser autoestado de \hat{H}' y $|\psi'\rangle$ tampoco puede ser autoestado de \hat{H} ya que esto implicaría que los potenciales difieren solamente en una constante. De acuerdo al principio variacional de Rayleigh-Ritz, el estado fundamental tiene mínima energía, entonces

$$E = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle < \langle \psi' | \hat{H} | \psi' \rangle = \langle \psi' | \hat{H}' + \hat{V} - \hat{V}' | \psi' \rangle = E' + \int [V(\mathbf{r}) - V'(\mathbf{r})] \rho(\mathbf{r}) d^3r. \quad (3.9)$$

Intercambiando las variables primadas y no primadas obtenemos

$$E' < E + \int [V(\mathbf{r}) - V'(\mathbf{r})] \rho(\mathbf{r}) d^3r, \quad (3.10)$$

y sumando las desigualdades (3.9) y (3.10), obtenemos finalmente la siguiente contradicción

$$E + E' < E + E'. \quad (3.11)$$

Se concluye que la suposición inicial es falsa y que la densidad del estado fundamental define unívocamente el potencial externo $V(\mathbf{r})$. Por tanto, el potencial externo es una funcional unívoca de la densidad del estado fundamental, $V(\mathbf{r}) = V[\rho(\mathbf{r})]$.

Dado que $V[\rho(\mathbf{r})]$ determina $\hat{H}[\rho(\mathbf{r})]$ y éste a su vez los autoestados, podemos escribir las autofunciones como funcionales de la densidad del estado fundamental, $|\psi\rangle[\rho(\mathbf{r})]$. Lo cual implica que, en principio, cualquier observable puede ser escrito como una funcional de la densidad del estado fundamental.

3.3. Ecuaciones de Kohn-Sham

El principio de mínimo para la energía (3.6) y su versión variacional (3.8) representan un formalismo elegante para la descripción del estado fundamental en términos de la densidad, pero al no conocer $F[\rho]$ no contamos con un esquema computacional con fines prácticos. En 1965, Kohn y Sham (KS) propusieron una ingeniosa estrategia para resolver este problema [22]. Ellos plantearon que la densidad del estado fundamental de un sistema interactuante puede ser representada como la densidad del estado fundamental de un sistema no-interactuante en algún potencial local $V_{KS}(\mathbf{r})$. Entonces, la densidad puede ser obtenida minimizando la energía para el sistema no-interactuante

$$E_{V_{KS}}[\rho] = T_s[\rho] + \int V_{KS}(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) d^3r, \quad (3.12)$$

donde

$$T_s[\rho] = \min_{\psi \rightarrow \rho(\mathbf{r})} \langle \psi | \hat{T} | \psi \rangle, \quad (3.13)$$

es la funcional de energía cinética del sistema no-interactuante. Escribiendo en forma variacional, obtenemos la siguiente ecuación para la densidad del estado fundamental del sistema no-interactuante

$$\frac{\delta T_s[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r})} = -V_{KS}(\mathbf{r}), \quad (3.14)$$

que es completamente análoga a la Ec.(3.8).

Por otra parte, podemos descomponer $F[\rho]$ como sigue

$$F[\rho] = T_s[\rho] + E_H[\rho] + E_{xc}[\rho], \quad (3.15)$$

donde $E_H[\rho]$ es la funcional para la energía de Hartree

$$E_H[\rho] = \frac{e^2}{2} \int d^3r \int d^3r' \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (3.16)$$

y $E_{xc}[\rho]$ se define como la funcional para la energía de intercambio y correlación (xc), definido a partir de la Ec.(3.15). Sustituyendo (3.15) en (3.8) obtenemos

$$\frac{\delta T_s[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r})} = -V(\mathbf{r}) - V_H(\mathbf{r}) - V_{xc}(\mathbf{r}), \quad (3.17)$$

donde $V_H(\mathbf{r}) = e^2 \int d^3r' \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$ es el potencial de Hartree y

$$V_{xc}(\mathbf{r}) = \frac{\delta E_{xc}[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r})}, \quad (3.18)$$

es el potencial de intercambio y correlación. Comparando (3.14) y (3.17) obtenemos finalmente la expresión para el potencial de Kohn-Sham

$$V_{KS}(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) + V_H(\mathbf{r}) + V_{xc}(\mathbf{r}). \quad (3.19)$$

Podemos ver que minimizar $E_{V_{\text{KS}}}[\rho]$ (3.12) es equivalente a encontrar la energía del estado fundamental de un sistema electrónico no-interactuante en presencia del potencial de Kohn-Sham $V_{\text{KS}}(\mathbf{r})$. Para esto resolvemos la ecuación

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + V_{\text{H}}(\mathbf{r}) + V_{\text{xc}}(\mathbf{r}) \right] \phi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \phi_i(\mathbf{r}) \quad (3.20)$$

para los orbitales $\phi_i(\mathbf{r})$. Entonces, sumando sobre los estados ocupados, obtenemos la densidad del estado fundamental

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N |\phi_i(\mathbf{r})|^2. \quad (3.21)$$

La Ec.(3.20) es lo que se conoce como ecuación de Kohn-Sham. Hasta este punto todo el esquema planteado es exacto, hemos logrado acotar lo "desconocido" y agruparlo dentro del término de intercambio y correlación. Si bien encontrar una expresión para $E_{\text{xc}}[\rho]$ parece tan complicado como el problema original de encontrar una expresión para $F[\rho]$, dado que usualmente $E_{\text{xc}} < E_{\text{H}}$, aproximar solamente E_{xc} debería tener mucho menor impacto en los resultados.

Suponiendo que contamos con una aproximación para $V_{\text{xc}}(\mathbf{r})$, la Ec.(3.20) puede ser resuelta iterativamente. Partiendo de una densidad de prueba, que determina $V_{\text{H}}(\mathbf{r})$ y $V_{\text{xc}}(\mathbf{r})$, se resuelve (3.20) y se calcula la densidad con (3.21). Con la nueva densidad actualizamos $V_{\text{H}}(\mathbf{r})$ y $V_{\text{xc}}(\mathbf{r})$, y repetimos el ciclo hasta que las densidades en dos iteraciones consecutivas coincidan con determinada precisión. Esto define el esquema auto-consistente propuesto por Kohn y Sham.

Una vez conocida la densidad, podemos calcular la energía del estado fundamental. Para esto, se tiene en cuenta el problema auxiliar no-interactuante (3.20) y su energía (3.12)

$$E_{V_{\text{KS}}}[\rho] = T_s[\rho] + \int V_{\text{KS}}(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) d^3r = \sum_{i=1}^N \epsilon_i, \quad (3.22)$$

de donde obtenemos

$$T_s[\rho] = \sum_{i=1}^N \epsilon_i - \int V_{\text{KS}}(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) d^3r, \quad (3.23)$$

entonces, sustituyendo en (3.15) y ésta a su vez en (3.4), obtenemos

$$E = \sum_{i=1}^N \epsilon_i - \frac{e^2}{2} \int d^3r \int d^3r' \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \int V_{xc}(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r})d^3r + E_{xc}[\rho]. \quad (3.24)$$

Dado que el potencial de KS es local, las ecuaciones de KS son más simples que las ecuaciones de Hartree-Fock, además de incluir los efectos de la correlación no incluidos en Hartree-Fock. Esto ha convertido a la teoría de KS en el método más usado [20] para el cálculo de la energía del estado fundamental, diferencias de energía, densidades electrónicas, estructuras de banda en sólidos y estructuras en el equilibrio de moléculas y sólidos. También, mediante la denominada Density Functional Perturbation Theory (DFPT), es el método de cálculo más usado para calcular las constantes elásticas y relaciones de dispersión de los fonones en sólidos, y la constante de acoplamiento electrón-fonón.

3.4. Sistemas con número de partículas variable

Hasta este punto hemos considerado la energía del sistema como una funcional de la densidad, manteniendo constante el número de partículas $N = \int \rho(\mathbf{r})d^3r$, donde además, N es un número entero. Sin embargo, en física de la materia condensada muchas veces es necesario considerar sistemas muy grandes ($N \gg 1$) e incluso, por conveniencia matemática, sistemas infinitos. En estos casos mucha veces es conveniente tratar a N como una variable continua.

En 1982 Perdew, Parr, Levy y Balduz extienden el formalismo de la DFT a una densidad $\rho(\mathbf{r})$ que integra a un número de partículas $N = M + \omega$ [49], donde M es un entero no negativo y $0 \leq \omega < 1$. Usando el esquema de búsqueda restringida de Levy se define

$$F[\rho] = \min_{\Gamma \rightarrow \rho(\mathbf{r})} \left\langle \hat{T} + \hat{U} \right\rangle_{\Gamma}, \quad (3.25)$$

donde $\min_{\Gamma \rightarrow \rho(\mathbf{r})}$ significa que la minimización de $F[\rho]$ se realiza sobre todas las mezclas estadísticas Γ (del tipo permitido), que producen la densidad $\rho(\mathbf{r})$. Se entiende por tipo de mezcla permitido a la que se realiza entre un estado de M electrones $|\psi_M\rangle$ y un estado de $M + 1$ electrones $|\psi_{M+1}\rangle$. Las probabilidades respectivas deben ser $1 - \omega$ y ω , ya que $(1 - \omega)M + \omega(M + 1) = M + \omega$. Con esta extensión de la funcional universal, la ecuación variacional (3.8) sigue siendo válida, ahora con $F[n]$ dado por (3.25). Note que cuando N es entero se recupera el resultado original. Minimizando $E_v[\rho] = F[\rho] + \int V(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r})d^3r$ se obtiene la energía mínima

$$E = (1 - \omega)E_M + \omega E_{M+1}, \quad (3.26)$$

donde E_M y E_{M+1} son las energías del estado fundamental de los sistemas con M y $M + 1$ electrones respectivamente, bajo la influencia de un potencial $V(\mathbf{r})$. De acuerdo a la ecuación anterior la energía vs N se compone de un conjunto de líneas rectas. Si bien la función es continua, su derivada $\partial E/\partial N$ presenta discontinuidades para valores enteros de N .

Para estos sistemas más generales, la ecuación variacional (3.8) se puede reescribir como

$$\frac{\delta F[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r})} = \mu - V(\mathbf{r}), \quad (3.27)$$

donde

$$\mu = \frac{\partial E}{\partial N}. \quad (3.28)$$

El factor μ viene de exigir que la minimización se efectúe considerando densidades tales que $\int \rho(\mathbf{r})d^3r = N$, a través de los multiplicadores de Lagrange. La similitud entre (3.28) y la ecuación que define el potencial químico en un sistema abierto lleva a identificar a μ como el potencial químico.

A partir de la ecuación variacional (3.8) se puede ver que una discontinuidad en $\mu = \partial E/\partial N$ se traduce en una discontinuidad en la derivada funcional $\delta F[\rho]/\delta \rho(\mathbf{r})$ para valores enteros $\int \rho(\mathbf{r})d^3r$. Estas discontinuidades en la derivada tienen particular importancia dentro de la materia condensada por sus implicaciones en la determinación de la brecha de energía de semiconductores o aislantes [50].

Consideremos las densidades $\rho_M^\pm(\mathbf{r}) = \rho_M(\mathbf{r}) \pm \eta(\mathbf{r})$, donde $\rho_M(\mathbf{r})$ es la densidad del estado fundamental del sistema de M partículas y $\eta(\mathbf{r})$ es una pequeña variación positiva en la densidad, que cambia el número de partículas en una pequeña cantidad $\int \eta(\mathbf{r})d\mathbf{r} = \eta \ll 1$. Entonces, la brecha de energía en el espectro de excitación de una partícula viene dada por [50]

$$\Delta = I - A = \lim_{\eta \rightarrow 0} \left[\frac{\delta F[\rho(\mathbf{r})]}{\delta \rho(\mathbf{r})} \Big|_{\rho_M^+(\mathbf{r})} - \frac{\delta F[\rho(\mathbf{r})]}{\delta \rho(\mathbf{r})} \Big|_{\rho_M^-(\mathbf{r})} \right] \quad (3.29)$$

donde $I = E[M - 1] - E[M]$ es la energía de ionización y $A = E[M] - E[M + 1]$

es la energía de electroafinidad.² La discontinuidad en la derivada se puede escribir como la suma de dos contribuciones $\Delta = \Delta_{KS} + \Delta_{XC}$, provenientes de la energía cinética no-interactuante (Δ_{KS}) y del término de intercambio y correlación (Δ_{XC}). Sin embargo las funcionales locales y semi-locales, que son las más usadas, no presentan en general discontinuidad en la derivada de la funcional de xc , $\Delta_{XC} = 0$. Esto trae consigo la subestimación de la brecha de energía en muchos cálculos de estructura de banda [50, 51].

3.5. Funcionales de intercambio y correlación

Como vimos anteriormente, la formulación de Hohenberg y Kohn establece una descripción exacta de la energía del estado fundamental en términos de funcionales de la densidad electrónica. Con la formulación de Kohn-Sham se logra un método auto-consistente para minimizar la energía y encontrar la densidad del estado fundamental. Todo este procedimiento se puede considerar exacto siempre y cuando contemos con una expresión para la funcional de la energía de intercambio y correlación. En la práctica esta funcional no es conocida y es necesario llevar a cabo aproximaciones. Por tanto, el éxito dentro de la DFT dependerá de cuán buena sea la aproximación que usemos para la funcional de xc .

Anteriormente habíamos definido la funcional de xc a partir de la Ec.(3.15), en la forma

$$E_{xc}[\rho] = F[\rho] - T_s[\rho] - E_H[\rho] \quad (3.30)$$

o usando la expresión inicial para $F[\rho]$

$$E_{xc}[\rho] = (T[\rho] - T_s[\rho]) + (U[\rho] - E_H[\rho]) \quad (3.31)$$

donde $T[\rho]$ es la energía cinética interactuante y definimos $U[\rho]$ como la energía de Coulomb total. Teniendo en cuenta esto podemos escribir $E_{xc}[\rho] = E_x[\rho] + E_c[\rho]$, donde $E_x[\rho]$ es la energía de intercambio y $E_c[\rho]$ es la energía de correlación. La ventaja de separar así estas contribuciones es que para muchos sistemas podemos conocer $E_x[\rho]$ de manera exacta y solo nos quedaría por aproximar el término de correlación. En este caso, el término de intercambio solo contiene contribuciones de la energía de Coulomb producto de la anti-simetría de la función de onda. Por otra parte, el

²La brecha de energía de una partícula en general difiere de la brecha de energía óptica ("optical gap"), que está determinada por la mínima energía de excitación electrón-hueco.

término de correlación contendría las contribuciones de interacción de Coulomb restantes y las contribuciones de la energía cinética interactuante.

La funcional de intercambio se describe a partir de la expresión para la energía de intercambio definida en el método de Hartree-Fock (integral de Fock),

$$E_x[\rho] = -\frac{e^2}{2} \sum_{i,j,\sigma}^{\text{ocupados}} \int d^3r \int d^3r' \frac{\phi_i^\sigma(\mathbf{r})^* \phi_j^\sigma(\mathbf{r}')^* \phi_j^\sigma(\mathbf{r}) \phi_i^\sigma(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (3.32)$$

donde $\phi_i^\sigma(\mathbf{r})$ son los orbitales electrónicos u orbitales de KS en el contexto de la DFT. Note que esta funcional no depende explícitamente de la densidad, por lo que la determinación del potencial $V_x = \delta E_x / \delta \rho(\mathbf{r})$ puede ser complicada. Es por ello que usualmente se utilizan aproximaciones para la energía de intercambio, explícitamente dependientes de la densidad, en lugar de la Ec.(3.32).

La aproximación más usada para la energía de intercambio es la aproximación de densidad local (LDA). Aquí mostraremos su extensión a sistemas polarizados en espín, la aproximación de densidad de espín local (LSDA), utilizada en los casos donde el espín juega un papel importante. Esta aproximación supone que la densidad varía lentamente en una pequeña región del espacio, de forma tal que la energía de intercambio puede ser aproximada localmente por la energía del sistema de electrones homogéneo,³

$$E_x[\rho_\uparrow(\mathbf{r}), \rho_\downarrow(\mathbf{r})] = \sum_\sigma \int \rho_\sigma(\mathbf{r}) \epsilon_x[\rho_\sigma(\mathbf{r})] d^3r \quad (3.33)$$

donde

$$\epsilon_x[\rho_\sigma(\mathbf{r})] = -\frac{3e^2}{4} \left[\frac{6}{\pi} \rho_\sigma(\mathbf{r}) \right]^{\frac{1}{3}} \quad (3.34)$$

es la funcional de energía de intercambio por partícula con espín σ para el sistema de electrones homogéneo tridimensional. Haciendo la derivada funcional, obtenemos

$$V_x[\rho_\sigma(\mathbf{r})] = \epsilon_x^\sigma[\rho_\sigma(\mathbf{r})] + \rho_\sigma(\mathbf{r}) \frac{\delta \epsilon_x^\sigma[\rho_\sigma(\mathbf{r})]}{\delta \rho_\sigma(\mathbf{r})} = -e^2 \left[\frac{6}{\pi} \rho_\sigma(\mathbf{r}) \right]^{\frac{1}{3}}. \quad (3.35)$$

Por su parte, para la energía de correlación $\epsilon_c[\rho_\uparrow(\mathbf{r}), \rho_\downarrow(\mathbf{r})]$ existen varias para-

³Podemos obtener esta expresión sustituyendo $\phi_i^\sigma(\mathbf{r})$ por $\phi_{\mathbf{k}}^\sigma(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) |\sigma\rangle$ en la integral de Fock.

metrificaciones, estas extrapolan a valores arbitrarios de densidades los resultados obtenidos usando métodos numéricos de Monte Carlo por Ceperley y Alder [52] en sistemas no polarizados y totalmente polarizados en espín. Particularmente, en esta tesis, para los cálculos dentro de la aproximación LSDA incluiremos la correlación a través de la parametrización propuesta por Perdew y Wang en 1992, conocida en la jerga de DFT como PW92.

Capítulo 4

Gases de electrones y aproximación de intercambio exacto

4.1. Esquema de KS para un q2DEG con un campo magnético aplicado

En el Capítulo 2 introdujimos los sistemas q2DEG, y para su descripción teórica usamos la aproximación de masa efectiva, en la que se consideran los efectos del potencial periódico del sólido sobre los electrones de conducción a través de una masa renormalizada m^* . Por otro lado, la interacción entre los electrones en la banda de conducción del material queda también renormalizada por la constante dieléctrica del medio ϵ (por ejemplo, para el *GaAs* $\epsilon = 12.85$). Teniendo esto en cuenta, los términos de interacción quedan como si los electrones tuvieran una carga efectiva $e/\sqrt{\epsilon}$. Es por esto que consideramos conveniente escribir las ecuaciones para estos sistemas en unidades atómicas efectivas (radio de Bohr efectivo $a_0^* = \epsilon\hbar^2/e^2m^*$ y Hartree efectivo $Ha^* = m^*e^4/\epsilon^2\hbar^2$).

Como vimos anteriormente, para un q2DEG el potencial externo $V(\mathbf{r})$ se puede separar como

$$V(\mathbf{r}) = v(x, y) + v(z), \quad (4.1)$$

aunque siempre tomaremos $v(x, y) = 0$.¹ En el caso del sistema con un campo magnético perpendicular al plano del q2DEG, usando las soluciones obtenidas en el Capítulo 2 y teniendo en cuenta que la densidad en el plano xy es constante, podemos

¹Cabe aclarar que aunque tomamos $v(x, y) = 0$, consideraremos implícitamente en forma efectiva la presencia de impurezas en el plano a través del ensanchamiento de la densidad de estados electrónicos.

escribir los orbitales de KS como

$$\Psi_{i,n,k_y}^\sigma(x, y, z) = \phi_{n,k_y}(x) e^{ik_y y} \lambda_i^\sigma(z) / \sqrt{L}, \quad (4.2)$$

donde $\phi_{n,k_y}(x)$ está dado por la Ec.(2.10) y $\lambda_i^\sigma(z)$ es una solución auto-consistente de la ecuación de KS efectiva en una dimensión

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + v_{\text{KS}}^\sigma(z) \right] \lambda_i^\sigma(z) = \gamma_i^\sigma \lambda_i^\sigma(z). \quad (4.3)$$

Los autovalores asociados a $\Psi_{i,n,k_y}^\sigma(x, y, z)$ están dados por

$$\varepsilon_{i,n}^\sigma = \gamma_i^\sigma + (n + 1/2) \hbar \omega_c / \hbar a^* + g \mu_B B \sigma / (2 \hbar a^*), \quad (4.4)$$

donde $\omega_c = eB/m^*c$ es la frecuencia ciclotrónica y el último término es el acoplamiento Zeeman, con $\sigma = \pm 1$ [53]. El conjunto de niveles de energía $\varepsilon_{i,n}^\sigma$ son los niveles de Landau del q2DEG. $\lambda_i^\sigma(z)$ son las autofunciones de KS efectivas en 1D para los electrones en las sub-bandas i ($= 1, 2, \dots$), con espín σ y autovalores γ_i^σ . Este potencial de KS dependiente del espín es la suma de tres contribuciones: $v_{\text{KS}}^\sigma(z) = v_{\text{ext}}(z) + v_{\text{H}}(z) + v_{\text{xc}}^\sigma(z)$, donde $v_{\text{ext}}(z)$ representa el potencial de barrera del semiconductor más el potencial externo (que puede ser el campo eléctrico generado por las láminas de dopaje en el semiconductor). $v_{\text{H}}(z) = -2\pi \int_{-\infty}^{\infty} |z - z'| \rho(z') dz'$ es el potencial de Hartree, donde $\rho(z)$ es la densidad electrónica. $v_{\text{xc}}^\sigma(z)$ es el potencial de intercambio y correlación.

Usando la expresión (3.32) para la energía de intercambio y las funciones de onda $\Psi_{i,n,k}^\sigma(x, y, z)$, podemos escribir la energía de intercambio a temperatura finita [54] de la forma

$$E_x = -\frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sum_{i,j} \sum_{n_i,n_j} \sum_{k_i,k_j} f_{\text{FD}}(\varepsilon_{i,n_i}^\sigma) f_{\text{FD}}(\varepsilon_{j,n_j}^\sigma) \times \int d^3r \int d^3r' \frac{\Psi_{i,n_i,k_i}^\sigma(\mathbf{r})^* \Psi_{j,n_j,k_j}^\sigma(\mathbf{r}')^* \Psi_{j,n_j,k_j}^\sigma(\mathbf{r}) \Psi_{i,n_i,k_i}^\sigma(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (4.5)$$

donde $f_{\text{FD}}(\varepsilon) = [1 + e^{(\varepsilon - \mu)/(k_B T)}]^{-1}$ es la distribución de Fermi-Dirac y μ es el potencial químico.

Sustituyendo las autofunciones $\Psi_{i,n,k_y}^\sigma(\mathbf{r})$ dadas por (4.2) en la expresión anterior y usando la representación de Fourier quasi-2D de la interacción Coulomb [35],

obtenemos

$$E_x = -\frac{N_\phi}{2l_B} \sum_{i,j,\sigma} \int dz \int dz' \lambda_i^\sigma(z) \lambda_i^\sigma(z') \lambda_j^\sigma(z) \lambda_j^\sigma(z') \sum_{n,m} n_{i,n,\sigma}^{2D} n_{j,m,\sigma}^{2D} I_n^m(z-z'). \quad (4.6)$$

Aquí $n_{i,n,\sigma}^{2D} = \int g(\varepsilon - \varepsilon_{i,n}^\sigma) f_{FD}(\varepsilon) d\varepsilon / N_\phi$ es el factor de ocupación del LL con números cuánticos i, n, σ , tal que $0 \leq n_{i,n,\sigma}^{2D} \leq 1$. $g(\varepsilon)$ es la densidad de estados dada por la Ec.(2.15). Bajo estas condiciones, $\sum_{i,n,\sigma} n_{i,n,\sigma}^{2D} = \nu$ es una constante que define μ . Finalmente,

$$I_n^m(z-z') = \frac{n_{<}!}{n_{>}!} \int_0^\infty dx e^{-x^2/2} (x^2/2)^{n_{>}-n_{<}} [L_{n_{<}}^{n_{>}-n_{<}}(x^2/2)]^2 e^{-x|z-z'|/l_B}, \quad (4.7)$$

donde $L_n^m(x)$ son los polinomios generalizados de Laguerre, $n^< = \min(n, m)$ y $n^> = \max(n, m)$. La Ec.(4.6) representa la energía de intercambio de un q2DEG con un campo magnético perpendicular; depende explícitamente de los orbitales de KS efectivos en 1D $\lambda_i^\sigma(z)$ y será el punto de partida para la derivación del potencial de intercambio exacto. Cabe aclarar que la Ec.(4.6) es válida para todo valor de ν , pues para poder considerar valores fraccionarios de ν hemos reemplazado $\sum_{k_y} f_{FD}(\varepsilon_{i,n_i}^\sigma)$ por $n_{i,n,\sigma}^{2D} = \int g(\varepsilon - \varepsilon_{i,n}^\sigma) f_{FD}(\varepsilon) d\varepsilon$, y de esta forma tenemos en cuenta la pérdida de la degeneración de los LLs producto de las impurezas.

Por otra parte, usando (3.21) podemos escribir la densidad de electrones para una componente de espín en la forma

$$\rho_\sigma(\mathbf{r}) \equiv \rho_\sigma(z) = \sum_i \sum_n \sum_{k_y} f_{FD}(\varepsilon_{i,n_i}^\sigma) \left| \Psi_{i,n,k_y}^\sigma(\mathbf{r}) \right|^2 = \sum_i \bar{f}_i^\sigma |\lambda_i^\sigma(z)|^2, \quad (4.8)$$

donde $\bar{f}_i^\sigma = N_\phi (a_0^*)^2 \sum_n n_{i,n,\sigma}^{2D}$, y la densidad electrónica total es la suma de las dos contribuciones por espín, $\rho(z) = \rho_\uparrow(z) + \rho_\downarrow(z)$. Para obtener (4.8) se usa la Ec.(4.2) para la función de onda y se sustituye la suma sobre los k_y por una integral de la densidad de estados como se mostró más arriba.

4.2. Intercambio exacto en el efecto Hall cuántico

Como habíamos comentado anteriormente, el éxito dentro de la teoría de la funcional densidad depende de cuán buena sea la aproximación para la energía de intercambio y correlación que estamos usando. Dentro del esquema de KS, adaptado para sistemas q2DEG, el potencial de intercambio se define como

$$v_x^\sigma(z) = \frac{\delta E_x[\rho]}{\delta \rho_\sigma(z)}, \quad (4.9)$$

donde $E_x[\rho]$ es la energía de intercambio del sistema. Usualmente, en las aplicaciones prácticas de DFT se emplean aproximaciones para la funcional $E_x[\rho]$, que son explícitamente dependientes de la densidad. Sin embargo, aunque nuestra funcional de intercambio (4.6) no depende explícitamente de la densidad, podemos derivar el potencial de intercambio de manera exacta usando la regla de la cadena para derivadas funcionales. Primeramente notemos que la energía de intercambio dada por (4.6) depende de los orbitales $\lambda_i^\sigma(z)$ y autovalores γ_i^σ de KS, es decir, $E_x[\{\lambda_i^\sigma\}, \{\gamma_i^\sigma\}]$. Entonces, a partir de la definición del potencial de intercambio (4.9) podemos escribir

$$\begin{aligned} v_x^\sigma(z) &= \frac{\delta E_x[\{\lambda_j^\sigma\}, \{\gamma_j^\sigma\}]}{\delta \rho_\sigma(z)} \\ &= \sum_{\sigma'} \sum_i \int dz_1 \left\{ \int dz_2 \left(\frac{\delta E_x[\{\lambda_j^\sigma\}, \{\gamma_j^\sigma\}]}{\delta \lambda_i^{\sigma'}(z_2)} \frac{\delta \lambda_i^{\sigma'}(z_2)}{\delta v_{\text{KS}}^\sigma(z_1)} + c.c. \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\delta E_x[\{\lambda_j^\sigma\}, \{\gamma_j^\sigma\}]}{\delta \gamma_i^{\sigma'}} \frac{\delta \gamma_i^{\sigma'}}{\delta v_{\text{KS}}^\sigma(z_1)} \right\} \chi_{\text{KS},\sigma}^{-1}(z_1, z), \end{aligned} \quad (4.10)$$

donde $\chi_{\text{KS},\sigma}^{-1}(z_1, z)$ es la inversa de la función respuesta del sistema no-interactuante auxiliar

$$\chi_{\text{KS},\sigma}(z, z_1) = \frac{\delta \rho_\sigma(z)}{\delta v_{\text{KS}}^\sigma(z_1)} \quad (4.11)$$

En la Ec.(4.10) hemos tenido en cuenta la dependencia de la energía de intercambio con los orbitales (segunda línea) y con los autovalores (tercera línea) de KS. Multiplicando por la función respuesta en ambos lados de la Ec.(4.10) e integrando, obtenemos

$$\begin{aligned} \int dz_1 v_x^\sigma(z_1) \chi_{\text{KS},\sigma}(z_1, z) &= \sum_{\sigma'} \sum_i \left\{ \int dz_1 \left(\frac{\delta E_x[\{\lambda_j^\sigma\}, \{\gamma_j^\sigma\}]}{\delta \lambda_i^{\sigma'}(z_1)} \frac{\delta \lambda_i^{\sigma'}(z_1)}{\delta v_{\text{KS}}^\sigma(z)} + c.c. \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\delta E_x[\{\lambda_j^\sigma\}, \{\gamma_j^\sigma\}]}{\delta \gamma_i^{\sigma'}} \frac{\delta \gamma_i^{\sigma'}}{\delta v_{\text{KS}}^\sigma(z)} \right\}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Solo nos faltaría calcular las derivadas funcionales de los orbitales y autovalores respecto al potencial de KS. Para esto, usando teoría de perturbaciones de primer

orden, tenemos

$$\frac{\delta \lambda_i^{\sigma'}(z_1)}{\delta v_{\text{KS}}^\sigma(z)} = \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}} \frac{\lambda_k^{\sigma'}(z_1) \lambda_k^{\sigma'}(z)^*}{\gamma_i^{\sigma'} - \gamma_k^{\sigma'}} \lambda_i^{\sigma'}(z) \delta_{\sigma', \sigma} = G_{i\sigma'}(z_1, z) \lambda_i^{\sigma'}(z) \delta_{\sigma', \sigma}, \quad (4.13)$$

donde

$$G_{i\sigma'}(z_1, z) = \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}} \frac{\lambda_k^{\sigma'}(z_1) \lambda_k^{\sigma'}(z)^*}{\gamma_i^{\sigma'} - \gamma_k^{\sigma'}}, \quad (4.14)$$

es la función de Green de la ecuación de KS y

$$\frac{\delta \gamma_i^{\sigma'}}{\delta v_{\text{KS}}^\sigma(z)} = |\lambda_i^{\sigma'}(z)|^2 \delta_{\sigma', \sigma}. \quad (4.15)$$

Usando las Ecs.(4.13-4.15), la definición de la función respuesta (4.11) y la Ec.(4.8) para la densidad, obtenemos

$$\chi_{\text{KS}, \sigma}(z, z_1) = \sum_j \left\{ \frac{\partial \bar{f}_j^\sigma}{\partial \gamma_j^\sigma} |\lambda_j^\sigma(z_1)|^2 |\lambda_j^\sigma(z)|^2 + [\bar{f}_j^\sigma G_{j\sigma}(z, z_1) \lambda_i^\sigma(z_1) \lambda_j^\sigma(z)^* + c.c.] \right\}. \quad (4.16)$$

Sustituyendo en (4.12) y usando nuevamente las Ecs.(4.13-4.15), obtenemos finalmente la ecuación integral que determina el potencial de intercambio exacto

$$\sum_j \bar{f}_j^\sigma \int dz_1 \{ [v_x^\sigma(z_1) - u_x^{j, \sigma}(z_1)] \lambda_j^\sigma(z) \lambda_j^\sigma(z_1)^* G_j^\sigma(z_1, z) + c.c. \} = \sum_j |\lambda_j^\sigma(z)|^2 \frac{\partial \bar{f}_j^\sigma}{\partial \gamma_j^\sigma} [n_x^{j, \sigma} - \bar{v}_{xj}^\sigma], \quad (4.17)$$

donde

$$u_x^{j, \sigma}(z) = \frac{1}{\bar{f}_j^\sigma \lambda_j^\sigma(z)} \frac{\delta E_x}{\delta \lambda_j^\sigma(z)}, \quad (4.18)$$

$$\eta_x^{j,\sigma} = \frac{\delta E_x / \delta \gamma_j^\sigma}{\partial \bar{f}_j^\sigma / \partial \gamma_j^\sigma}, \quad (4.19)$$

y

$$\bar{O}_j^\sigma = \int |\lambda_j^\sigma(z)|^2 O(z) dz. \quad (4.20)$$

El término $u_x^{j,\sigma}(z)$ (Ec. (4.18)) representa de manera explícita la dependencia de la energía con los orbitales $\lambda_j^\sigma(z)$. Por su parte, el término $\eta_x^{j,\sigma}$ (Ec. (4.19)), que proviene de la derivada de la energía de intercambio respecto a los autovalores de KS, representa en cierto sentido la dependencia de la energía respecto a la densidad en el plano xy .

La Ec.(4.17) puede ser reescrita en la forma más compacta

$$\sum_j \bar{f}_j^\sigma \psi_j^\sigma(z)^* \lambda_j^\sigma(z) + c.c. = \sum_j |\lambda_j^\sigma(z)|^2 C_{x,j}^\sigma, \quad (4.21)$$

donde hemos definido los corrimientos ("shift") $\psi_j^\sigma(z)$ como

$$\psi_j^\sigma(z)^* = \int dz_1 \Delta v_{x,j}^\sigma(z_1) \lambda_j^\sigma(z_1)^* G_j^\sigma(z_1, z) \quad (4.22)$$

y

$$C_{x,j}^\sigma = \frac{\partial \bar{f}_j^\sigma}{\partial \gamma_j^\sigma} [\eta_x^{j,\sigma} - \bar{v}_{x,j}^\sigma], \quad (4.23)$$

además, $\Delta v_{x,j}^\sigma(z_1) = v_x^\sigma(z_1) - u_x^{j,\sigma}(z_1)$. Se le llama corrimiento ("shift" en inglés) a $\psi_j^\sigma(z)$, ya que se pueden interpretar como el cambio, a primer orden, de los orbitales de KS $\lambda_j^\sigma(z)$ causado por la perturbación $\Delta v_{x,j}^\sigma(z)$ [55].

Dado que los orbitales de KS forman un conjunto ortonormal, integrando la Ec.(4.22) obtenemos que $\psi_i^\sigma(z)$ es ortogonal a $\lambda_i^\sigma(z)$:

$$\int dz \psi_i^\sigma(z)^* \lambda_i^\sigma(z) = 0. \quad (4.24)$$

Integrando (4.21) por z y usando la ortogonalidad de $\psi_i^\sigma(z)$ con los orbitales de KS, obtenemos la regla de suma

$$\sum_i C_{x,i}^\sigma = 0. \quad (4.25)$$

Esta condición será de ayuda más adelante para definir la aproximación KLI [56].

Dado que $G_j^\sigma(z_1, z)$ es la función de Green de la ecuación de KS

$$\left(\hat{h}_{\text{KS}}^\sigma(z) - \gamma_j^\sigma \right) G_j^\sigma(z_1, z) = - \left[\delta(z_1 - z) - \lambda_j^\sigma(z_1) \lambda_j^\sigma(z)^* \right], \quad (4.26)$$

donde $\hat{h}_{\text{KS}}^\sigma(z) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + v_{\text{KS}}^\sigma(z)$. Si aplicamos el operador $\left[\hat{h}_{\text{KS}}^\sigma(z) - \gamma_i^\sigma \right]$ en ambos lados de (4.22), tenemos

$$\left[\hat{h}_{\text{KS}}^\sigma(z) - \gamma_i^\sigma \right] \psi_j^\sigma(z)^* = - \left(\Delta v_{x,j}^\sigma(z) - \Delta \bar{v}_{x,j}^\sigma \right) \lambda_j^\sigma(z)^*. \quad (4.27)$$

Esta última ecuación aporta una gran ventaja en la determinación numérica del potencial de intercambio, pues su uso en el esquema iterativo numérico para la obtención de los corrimientos $\psi_j^\sigma(z)$ evita la inclusión de los estados de KS no ocupados, presentes en la definición original (4.22) a través de las funciones de Green $G_j^\sigma(z_1, z)$ (4.14). Es importante destacar que en esta aproximación es necesario contar inicialmente con los orbitales $\lambda_j^\sigma(z)$ y autovalores γ_j^σ de KS. Para resolver este problema usualmente se usa como "condición de arranque" las soluciones del sistema convergido en la aproximación de densidad local. Los cálculos dentro de la aproximación de intercambio exacto son muy costosos computacionalmente ya que para encontrar el potencial $v_x^\sigma(z)$ se necesita realizar un esquema de iteraciones extra por cada iteración de KS. Sin embargo, existe una aproximación donde se puede obtener una solución más directa de esta ecuación integral, conocida como aproximación KLI, que se explica a continuación.

4.3. Aproximación KLI

Luego de varias manipulaciones a partir de la Ec.(4.21), el potencial de intercambio exacto se puede escribir en forma equivalente como la suma de tres términos (vea Apéndice A.1)

$$v_x^\sigma(z) = v_{x1}^\sigma(z) + v_{x2}^\sigma(z) + v_{x3}^\sigma(z), \quad (4.28)$$

donde $v_{x1}^\sigma(z)$, $v_{x2}^\sigma(z)$ y $v_{x3}^\sigma(z)$ están dados por las Ecs.(A.4, A.9 y A.10) respectivamente.

Ahora utilizaremos una variante de la aproximación KLI, propuesta originalmente por Krieger, Li e Iafate en la referencia [56]. En nuestro caso, esta aproximación consiste en no considerar el segundo y tercer término en la ecuación anterior, obteniendo así un potencial de intercambio aproximado de la forma

$$v_x^{\sigma,KLI}(z) = v_{x1}^\sigma(z) = \frac{1}{\rho_\sigma(z)} \sum_j |\xi_j^\sigma(z)|^2 \bar{f}_j^\sigma [u_x^{j,\sigma}(z) + \Delta \bar{v}_{x,j}^\sigma], \quad (4.29)$$

y además se debe cumplir la condición $\sum_j C_{x,j}^\sigma = 0$. Esta aproximación podría parecerse hasta cierto punto arbitraria, sin embargo, puede ser interpretada como una aproximación de campo medio, ya que el promedio sobre la densidad $\rho_\sigma(z)$ de los términos que despreciamos ($v_{x2}^\sigma(z)$ y $v_{x3}^\sigma(z)$) es cero.

Multiplicando la Ec.(4.29) por $|\lambda_i(z)|^2$ e integrando por z , tenemos

$$\int v_x^{\sigma,KLI}(z) |\lambda_i^\sigma(z)|^2 dz = \bar{v}_{xi}^\sigma = \int dz \frac{|\lambda_i^\sigma(z)|^2}{\rho_\sigma(z)} \sum_j |\lambda_j^\sigma(z)|^2 \bar{f}_j^\sigma [u_x^{j,\sigma}(z) + \Delta \bar{v}_{x,j}^\sigma]. \quad (4.30)$$

Llamando

$$N_i^\sigma = \int dz \frac{|\lambda_i^\sigma(z)|^2}{\rho_\sigma(z)} \sum_j \bar{f}_j^\sigma |\lambda_j^\sigma(z)|^2 u_x^{j,\sigma}(z), \quad (4.31)$$

$$M_{i,j}^\sigma = \bar{f}_j^\sigma \int dz \frac{|\lambda_j^\sigma(z)|^2 |\lambda_i^\sigma(z)|^2}{\rho_\sigma(z)}, \quad (4.32)$$

podemos escribir la ecuación anterior en forma matricial

$$\bar{v}_{xi}^\sigma = N_i^\sigma + \sum_j M_{i,j}^\sigma \Delta \bar{v}_{x,j}^\sigma \quad (4.33)$$

o

$$\overleftrightarrow{A} \vec{x} = \vec{y}, \quad (4.34)$$

donde $A_{i,j} = \delta_{i,j} - M_{i,j}$, $x_i = \bar{v}_{xi}^\sigma - \bar{u}_x^{i,\sigma}$ y $y_i = N_i^\sigma - \bar{u}_x^{i,\sigma}$. El sistema lineal anterior está indeterminado ya que $\sum_j A_{i,j} = 1 - \int dz |\lambda_i^\sigma(z)|^2 = 0$, pero la ecuación $\sum_j C_{x,j}^\sigma = 0$

(4.25) resuelve este problema, añadiendo una condición extra al sistema. Sumando $\sum_j \frac{\partial \bar{f}_j^\sigma}{\partial \gamma_j^\sigma} \bar{u}_x^{j,\sigma}$ en ambos lados de la Ec.(4.25), obtenemos

$$\sum_j \frac{\partial \bar{f}_j^\sigma}{\partial \gamma_j^\sigma} \Delta \bar{v}_{xj}^\sigma = \sum_j \frac{\partial \bar{f}_j^\sigma}{\partial \gamma_j^\sigma} (\eta_x^{j,\sigma} - \bar{u}_x^{j,\sigma}), \quad (4.35)$$

y añadiendo esta última ecuación al sistema lineal (4.34), obtenemos finalmente que la aproximación KLI se reduce a resolver

$$\begin{cases} \overleftrightarrow{A} \vec{x} = \vec{y} \\ \sum_j \frac{\partial \bar{f}_j^\sigma}{\partial \gamma_j^\sigma} x_j = \sum_j \frac{\partial \bar{f}_j^\sigma}{\partial \gamma_j^\sigma} (\eta_x^{j,\sigma} - \bar{u}_x^{j,\sigma}). \end{cases} \quad (4.36)$$

La principal ventaja de la aproximación KLI es que podemos obtener directamente el potencial de intercambio sin necesidad de un esquema iterativo para resolver la ecuación integral (4.17). Además, el sistema convergido en la aproximación KLI representa una buena "condición de arranque" para el cálculo dentro de la aproximación de intercambio exacto.

Sistema con solo una sub-banda ocupada

Cuando el sistema tiene solo una sub-banda ocupada, las ecuaciones para el potencial de intercambio se simplifican y es posible encontrar una expresión analítica para este. Como habíamos visto anteriormente, si integramos según z la Ec.(4.21), obtenemos la condición $\sum_j C_{x,j}^\sigma = 0$ (Ec.(4.25)), que en el caso de solo una sub-banda ocupada se reduce a $C_{x,1}^\sigma = 0$, o

$$\bar{v}_{x1}^\sigma = \eta_x^{1,\sigma}. \quad (4.37)$$

Teniendo esto en cuenta y observando (4.21), podemos ver que el corrimiento $\psi_1^\sigma(z) = 0$. Entonces, en (4.28) solo el primer término es distinto de cero y el potencial de intercambio queda de la forma

$$v_x^\sigma(z) = v_{x1}^\sigma(z) = u_x^{1,\sigma}(z) + \eta_x^{1,\sigma} - \bar{u}_x^{1,\sigma}(z), \quad (4.38)$$

y note que en este límite la aproximación de intercambio exacto (EE) y KLI son equivalentes. Cabe aclarar que se puede hacer una derivación directa de esta última ecuación, aprovechando que en este caso se puede escribir la energía de intercambio como una funcional explícita de la densidad. Para ello hay que retornar a la Ec.(4.6)

y particularizarla para el caso de solo una sub-banda ocupada ($i = j = 1$). Esto se puede encontrar en las referencias [57, 58].

4.4. Una sub-banda ocupada

Cuando el sistema solo tiene ocupada la sub-banda $i = 1$, la Ec.(4.6) se simplifica drásticamente a

$$e_x(\nu) = \frac{-1}{2\nu l_B} \sum_{\sigma} \frac{\langle \rho_{\sigma} | S_1^{\nu\sigma} | \rho_{\sigma} \rangle}{(\nu_{\sigma} N_{\phi})^2}, \quad (4.39)$$

donde $e_x(\nu) = E_x/N$ es la energía de intercambio por partícula, $\langle \rho_{\sigma} | S_1^{\nu\sigma} | \rho_{\sigma} \rangle$ representa las integrales sobre z y z' de las densidades $\rho_{\sigma}(z)$ y $\rho_{\sigma}(z')$ multiplicadas por $S_1^{\nu\sigma}(z - z')$ y

$$S_1^{\nu\sigma}(z - z') = \sum_{n,m} n_{1,n,\sigma}^{2D} n_{1,m,\sigma}^{2D} I_n^m(z - z'). \quad (4.40)$$

En este caso hemos usado $\rho_{\sigma}(z) = N_{\sigma} |\lambda_1^{\sigma}(z)|^2 = \nu_{\sigma} N_{\phi} |\lambda_1^{\sigma}(z)|^2$ y que $\nu_{\sigma} = \sum_n n_{1,n,\sigma}^{2D}$ es el factor de llenado de la componente de espín σ . Dado que $\int \rho_{\sigma}(z) dz = \nu_{\sigma} N_{\phi}$, podemos definir $\nu N_{\phi}/A^* = (\pi r_s^2)^{-1}$, donde r_s es el parámetro adimensional que caracteriza la densidad 2D en el plano y A^* es el área del sistema en unidades de a_0^* . Usando estas relaciones, obtenemos $\nu = 2(l_B/r_s)^2$. Este régimen de una sub-banda (1S) es relevante tanto teórica como experimentalmente. Los sistemas q2DEG pueden ser llevados a este régimen a través de un dopaje modulado, la aplicación de un bias, cambiando la distancia entre los pozos cuánticos o la altura de la barrera [35]. Desde el punto de vista teórico, hace ya algunos años se obtuvieron considerables simplificaciones en las ecuaciones que definen el intercambio exacto a campo magnético cero en este régimen [27, 28, 59–62].

La expresión para $e_x(\nu)$ puede ser simplificada aún más si suponemos que el ancho Γ de los picos de la densidad de estados es menor que la diferencia de energía entre niveles de Landau consecutivos con el mismo espín ($\hbar\omega_c > \Gamma$). Entonces, denotando por $[\nu_{\sigma}]$ la parte entera de ν_{σ} , los factores de ocupación están dados aproximadamente por

$$n_{1,n,\sigma}^{2D} \equiv n_{n,\sigma}^{2D} = \begin{cases} 1 & n < [\nu_{\sigma}] \\ p_{\sigma} & n = [\nu_{\sigma}] \\ 0 & n > [\nu_{\sigma}] \end{cases}, \quad (4.41)$$

donde $p_{\sigma} = \nu_{\sigma} - [\nu_{\sigma}]$, y $0 < p_{\sigma} < 1$ es el factor de ocupación del LL ocupado con espín σ de mayor energía. Esto nos permite simplificar la suma en la Ec.(4.40) como

sigue,

$$S_1^{\nu\sigma}(t) = a^{\nu\sigma}(t) + 2 p_\sigma b^{\nu\sigma}(t) + p_\sigma^2 c^{\nu\sigma}(t) , \quad (4.42)$$

con $a^{\nu\sigma}(t) = \sum_{n,m=0}^{[\nu\sigma]-1} I_n^m(t)$, $b^{\nu\sigma}(t) = \sum_{n=0}^{[\nu\sigma]-1} I_n^{[\nu\sigma]}(t)$, $c^{\nu\sigma}(t) = I_{[\nu\sigma]}^{[\nu\sigma]}(t)$ y $t = z - z'$.

Cada término en (4.42) y por tanto en $e_x(\nu)$ admite una interpretación física clara. El primer término representa la energía de intercambio de los electrones en los $[\nu\sigma] - 1$ niveles de Landau llenos con espín σ . El segundo término, lineal en p_σ , corresponde a la energía de intercambio entre los electrones en el LL parcialmente lleno $n = [\nu\sigma]$ con los electrones en los niveles de menor energía (llenos). Por último, el tercer término, proporcional a p_σ^2 , representa la interacción de intercambio entre los electrones en el nivel parcialmente ocupado $n = [\nu\sigma]$. Aclaremos que los resultados que presentaremos más adelante fueron obtenidos utilizando la expresión original para $S_1^{\nu\sigma}(t)$ en la Ec.(4.40), sin embargo la aproximación (4.42) será muy útil para entender los resultados numéricos.

Anteriormente habíamos obtenido una expresión analítica para el potencial de intercambio en el régimen $1S$ (Ec.(4.38)) a partir de la ecuación integral para el caso general. Como se ve en la Ec.(4.39), en este caso la energía se puede escribir explícitamente como una funcional de la densidad y podemos obtener directamente el potencial sin pasar por todo el aparato algebraico de las ecuaciones EE. Entonces, obtenemos el potencial de intercambio exacto de la forma $v_x^\sigma(z) = N\delta e_x/\delta\rho_\sigma(z)$; usando (4.39) tenemos

$$v_x^\sigma(z) = \frac{-1}{l_B N_\phi \nu_\sigma^2} \int dz' \rho_\sigma(z') S_1^{\nu\sigma}(z - z') - \frac{1}{2l_B N_\phi} \int dz \int dz' \rho_\sigma(z) \rho_\sigma(z') \frac{\partial (S_1^{\nu\sigma}(z - z')/\nu_\sigma^2)}{\partial \gamma_1^\sigma} \frac{\partial \gamma_1^\sigma}{\partial \rho_\sigma(z)}. \quad (4.43)$$

donde el primer (segundo) término viene de la dependencia explícita (implícita) de e_x en $\rho_\sigma(z)$. La dependencia implícita es fácil de entender: cambiando $\rho_\sigma(z)$, se cambia $v_H(z)$ y $v_x^\sigma(z)$ a través de la ecuación de KS, que a su vez produce un cambio en γ_1^σ . Después de unos cálculos engorrosos, la Ec.(4.43) se convierte en

$$v_x^\sigma(z) = u_x^\sigma(z) + \overline{\Delta v_x^\sigma} , \quad (4.44)$$

donde $u_x^\sigma(z)$ es el primer término en (4.43), $\overline{\Delta v_x^\sigma} = \eta_x^{\nu\sigma} - \bar{u}_x^\sigma$, $\bar{u}_x^\sigma = \int \lambda_1^\sigma(z)^2 u_x^\sigma(z) dz$ y $\eta_x^{\nu\sigma} = -\langle \rho_\sigma | S_2^{\nu\sigma} | \rho_\sigma \rangle / (\nu_\sigma^2 (N_\phi)^2 l_B)$. Además,

$$S_2^{\nu\sigma}(t) = \frac{\sum_{n,m} (\partial n_{n,\sigma}^{2D} / \partial \gamma_1^\sigma) n_{m,\sigma}^{2D} I_n^m(t)}{\sum_n (\partial n_{n,\sigma}^{2D} / \partial \gamma_1^\sigma)} . \quad (4.45)$$

Finalmente tenemos la Ec.(4.39) y la Ec.(4.44) como la energía y potencial de in-

tercambio exacto respectivamente, para un q2DEG con un campo magnético B aplicado. Note que la ecuación no es invariante ante la suma de una constante al potencial $v_x^\sigma(z) \rightarrow v_x^\sigma(z) + C$, dado que estamos considerando el sistema gran-canónico, donde el número de partículas no está fijo. En otras palabras, el potencial de intercambio $v_x^\sigma(z)$ está totalmente determinado por la Ec.(4.44) y no es necesario agregarle una constante fijada por la imposición de condiciones de contorno asintóticas, como es usual en sistemas cerrados similares [61, 63]. Note también que la Ec.(4.44) es igual a la Ec.(4.38) obtenida como caso particular de las ecuaciones EE generales.

Capítulo 5

Tres gases de electrones acoplados

En este Capítulo se presenta un estudio teórico exhaustivo de las configuraciones del estado fundamental, a campo magnético cero, para un sistema de tres 2DEGs acoplados usando una aproximación de Hartree-Fock variacional. Consideraremos los 2DEGs como láminas metálicas, que están acopladas tanto por el efecto túnel como por la interacción de Coulomb entre los electrones en distintas láminas. El estudio presentado en este Capítulo fue publicado en la referencia [64].

5.1. Introducción

Varios 2DEGs acoplados como los sistemas tricapa ofrecen nuevas posibilidades para el estudio teórico [65–67] y experimental [15, 68–73] de la física involucrada, incluso a campo magnético cero, más allá de los 2DEG simples. Nuevos efectos de una partícula como la energía de lámina (sitio), el acoplamiento entre las láminas a través del “tunelaje” (*hopping*) y efectos de muchos cuerpos como el acoplamiento tipo Coulomb inter-lámina deben ser incluidos, donde los últimos dos efectos son fuertemente dependientes de la separación entre las láminas.

La aproximación de Hartree-Fock variacional que emplearemos, ha sido usada anteriormente para sistemas bicapa [74] y también en una versión simplificada del sistema tricapa considerado aquí [66]. El modelo, esquemáticamente ilustrado en la Fig. 5.1, incluye términos de energía cinética intra-lámina e inter-lámina (*hopping*), no considerados en la referencia [66]. Incluye además el término de energía de intercambio intra-lámina e inter-lámina y la usualmente dominante energía electrostática (Hartree). Un parámetro externo adicional es la densidad electrónica total del sistema. Como veremos, a medida que la densidad electrónica disminuye, el sistema es llevado a un régimen dominado por efectos de una partícula como el *hopping*.

5.2. Modelo

Típicamente, un sistema tricapa semiconductor es obtenido experimentalmente confinando tres pozos cuánticos de $GaAs$ con barreras de $Al_xGa_{1-x}As$ con tamaño y altura variables, de modo tal que se pueda controlar el acoplamiento t entre las láminas. Usualmente el pozo central es diseñado con un ancho mayor que los dos laterales con el objetivo de compensar su ocupación, ya que tiende a estar menos ocupado que los pozos laterales [75, 76]. En nuestro modelo, podemos simular esta característica imponiendo, por ejemplo, que $\varepsilon_2 < \varepsilon_1 = \varepsilon_3$ (vea Fig. 5.1).

El modelo para nuestro sistema de tres láminas acopladas está representado en la Fig. 5.1 y definido a través del correspondiente hamiltoniano en la Ec.(5.1). Consiste en tres láminas metálicas bidimensionales separadas una distancia d . Otras dos láminas, localizadas en $z = \pm h$ ($h \gg d$) proveen las densidades de carga positiva de modo que se asegura la neutralidad de carga. Las láminas metálicas consecutivas están acopladas a través del hopping t , mientras que todas las láminas están acopladas a través de la interacción de Coulomb inter-lámina.

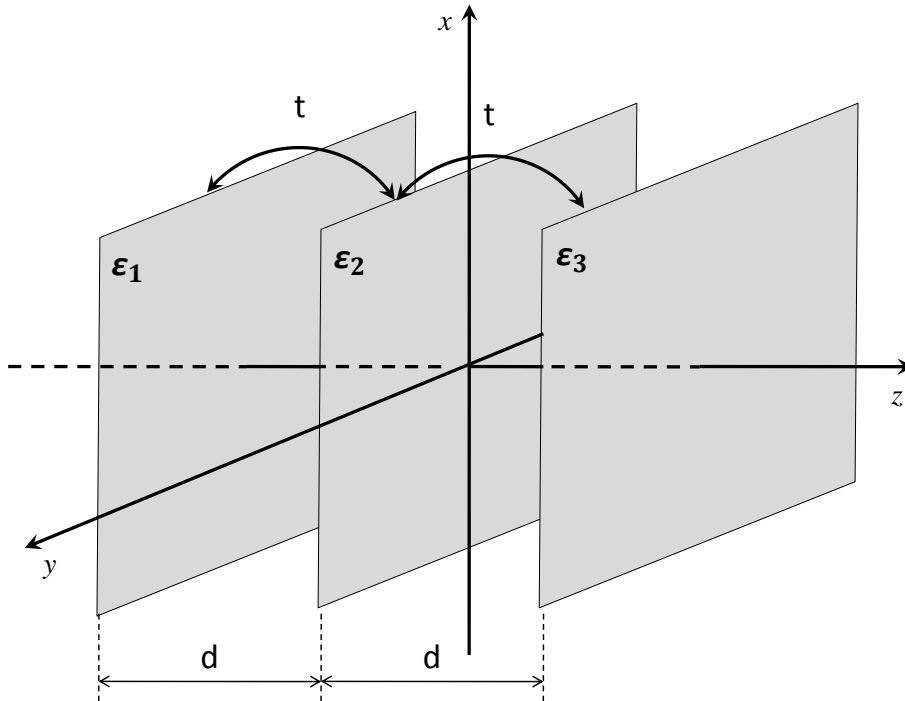


Figura 5.1: Vista esquemática del sistema de tres láminas ubicadas en $z = 0, \pm d$. Cada lámina de área A tiene una densidad electrónica bidimensional dada por $n_1, n_2, y n_3$. La neutralidad de carga está provista por dos láminas cargadas positivamente ubicadas en $z = \pm h$ (no mostradas), con $h \gg d$. Las láminas están acopladas por el hopping t y la interacción de Coulomb. $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ y ε_3 son las energías de lámina o de sitio.

En detalle, en el lenguaje de segunda cuantización, el hamiltoniano de nuestro sistema está dado por

$$\begin{aligned}
\hat{H} = & \sum_{j\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{jk} c_{j\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{j\mathbf{k}\sigma} - t \sum_{\langle j_1, j_2 \rangle \mathbf{k}\sigma} (c_{j_1\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{j_2\mathbf{k}\sigma} + c_{j_2\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{j_1\mathbf{k}\sigma}) - \sum_{j\mathbf{k}\sigma} \sum_m V_{jm}(0) p_m c_{j\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{j\mathbf{k}\sigma} \\
& + \frac{A}{2} \sum_{mn} V_{mn}(0) p_m p_n + \sum_{\substack{j_1\mathbf{k}_1\sigma_1 \\ j_2\mathbf{k}_2\sigma_2 \\ \mathbf{q}}} \frac{V_{j_1j_2}(\mathbf{q})}{2A} c_{j_1\mathbf{k}_1+\mathbf{q}\sigma_1}^\dagger c_{j_2\mathbf{k}_2-\mathbf{q}\sigma_2}^\dagger c_{j_2\mathbf{k}_2\sigma_2} c_{j_1\mathbf{k}_1\sigma_1}, \quad (5.1)
\end{aligned}$$

donde A es el área de cada lámina, $c_{j\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ ($c_{j\mathbf{k}\sigma}$) es el operador de creación (aniquilación) para un electrón en la lámina j ($j = 1, 2, 3$), con momento $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ y proyección de espín σ (\uparrow o \downarrow). Cada uno de los cinco términos en el hamiltoniano representa una contribución diferente a la energía total: el primero corresponde a la suma de la energía de lámina y la energía cinética de los electrones en cada lámina, $\varepsilon_{jk} = \varepsilon_j + \hbar^2 k^2 / 2m^*$ (m^* es la masa electrónica efectiva). El segundo término representa el hopping de los electrones entre las láminas, con una amplitud t (> 0); $j_1 \neq j_2$ y la suma solo actúa entre láminas adyacentes. Los últimos tres términos representan la interacción atractiva ion (láminas positivas) - electrón, la interacción ion-ion y la interacción electrón-electrón, respectivamente. p_m ($m = L, R$) representan las densidades (uniformes) de las dos láminas ubicadas a la izquierda ($z = -h$) y derecha ($z = h$) de las tres láminas centrales. El sistema cumple con la condición de neutralidad global de carga, $N = n_1 + n_2 + n_3 = p_L + p_R$, donde N representa la densidad bidimensional total y n_j ($j = 1, 2, 3$) son las densidades de cada una de las láminas metálicas. Finalmente, $V_{ij}(\mathbf{q}) = 2\pi e^2 e^{-q d_{ij}} / \epsilon q$, donde d_{ij} es la distancia entre las láminas i, j ; ϵ es la constante dieléctrica del semiconductor. Para $t = 0$ y $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3$, el modelo se reduce al estudiado previamente en la referencia [66]. Las energías de las láminas pueden ser modificadas en muestras reales cambiando los voltajes de compuerta, que en nuestro caso está representado por las dos láminas positivas situadas en $\pm h$. En este Capítulo solo consideraremos configuraciones simétricas, es decir, $p_L = p_R$ y $\varepsilon_1 = \varepsilon_3 > \varepsilon_2$.

La presencia en el hamiltoniano del último término de interacción electrón-electrón implica que no hay solución exacta para el modelo, esto nos fuerza a buscar una solución aproximada. Para ello utilizamos la aproximación de Hartree-Fock variacional, usada con frecuencia en sistemas de dos láminas, tanto a campo magnético cero [74] como a campo magnético finito [77–79], y también empleada en el estudio previo [66]. Pero antes es conveniente hacer una transformación exacta del hamiltoniano, definiendo los siguientes operadores:

$$\begin{aligned}
a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger &= \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\phi} c_{1\mathbf{k}\sigma}^\dagger + \sqrt{2} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) c_{2\mathbf{k}\sigma}^\dagger + \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\phi} c_{3\mathbf{k}\sigma}^\dagger, \\
b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger &= -\frac{\sin\theta}{\sqrt{2}} e^{-i\phi} c_{1\mathbf{k}\sigma}^\dagger + \cos\theta c_{2\mathbf{k}\sigma}^\dagger + \frac{\sin\theta}{\sqrt{2}} e^{i\phi} c_{3\mathbf{k}\sigma}^\dagger, \\
c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger &= \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\phi} c_{1\mathbf{k}\sigma}^\dagger - \sqrt{2} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) c_{2\mathbf{k}\sigma}^\dagger + \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\phi} c_{3\mathbf{k}\sigma}^\dagger, \quad (5.2)
\end{aligned}$$

con $0 \leq \theta \leq \pi$ y $0 \leq \phi < 2\pi$. Los nuevos operadores satisfacen relaciones de anticonmutación fermiónicas $\{\alpha_{\mathbf{k}\sigma}, \alpha_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger\} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \delta_{\sigma,\sigma'}$, mientras todos los otros anti-conmutadores son cero. La transformación de la base de "láminas" $c_{1\mathbf{k}\sigma}^\dagger, c_{2\mathbf{k}\sigma}^\dagger, c_{3\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ a la base de "sub-banda" $a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger, b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger, c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ está definida por dos ángulos θ y ϕ . Para $\theta = 0$, ambas bases son iguales.

La transformación canónica de la Ec.(5.2) puede ser considerada como una rotación en el espacio de Hilbert de un pseudo-espín apuntando en la dirección $\hat{\mathbf{n}} = (\sin\theta \cos\phi, \sin\theta \sin\phi, \cos\phi)$, con el índice de lámina j jugando el papel de las componentes del pseudo-espín. En el estado fundamental, la dirección de $\hat{\mathbf{n}}$ está determinada por el mínimo en la energía total. Los coeficientes en la matriz de transformación (5.2) se obtienen de los autovectores de la matriz $\hat{\mathbf{n}}(\phi, \theta) \cdot \mathbf{S} = n_x(\phi, \theta)S_x + n_y(\phi, \theta)S_y + n_z(\phi, \theta)S_z$, donde S_x, S_y y S_z son las componentes de las matrices de momentos angulares de 3×3 correspondientes a un pseudo-espín unitario (o momento angular) [80].

Después de expresar el hamiltoniano (5.1) en la nueva base, hemos tomado el valor de expectación del hamiltoniano transformado con el siguiente "ansatz" Hartree-Fock variacional para el estado fundamental

$$|\Psi_0\rangle = \prod_{\mathbf{k}_6}^{k_6 \leq k_{c\downarrow}} c_{\mathbf{k}_6\downarrow}^\dagger \prod_{\mathbf{k}_5}^{k_5 \leq k_{c\uparrow}} c_{\mathbf{k}_5\uparrow}^\dagger \prod_{\mathbf{k}_4}^{k_4 \leq k_{b\downarrow}} b_{\mathbf{k}_4\downarrow}^\dagger \prod_{\mathbf{k}_3}^{k_3 \leq k_{b\uparrow}} b_{\mathbf{k}_3\uparrow}^\dagger \prod_{\mathbf{k}_2}^{k_2 \leq k_{a\downarrow}} a_{\mathbf{k}_2\downarrow}^\dagger \prod_{\mathbf{k}_1}^{k_1 \leq k_{a\uparrow}} a_{\mathbf{k}_1\uparrow}^\dagger |0\rangle. \quad (5.3)$$

Aquí, $k_{a\sigma}, k_{b\sigma}$ y $k_{c\sigma}$ son los vectores de onda de Fermi bidimensionales para los electrones con espín σ en las sub-bandas a, b y c , respectivamente. Si alguno de los seis $k_{\alpha\sigma} = 0$, significa que la sub-banda correspondiente está vacía. Luego de algunos cálculos obtenemos

$$\begin{aligned}
\frac{\langle \Psi_0 | \hat{H} | \Psi_0 \rangle}{\text{Ry}^* N} &= \frac{2}{r_s^2} [E_0(\eta_{a\uparrow}, \eta_{a\downarrow}, \eta_{b\uparrow}, \eta_{b\downarrow}, \eta_{c\uparrow}, \eta_{c\downarrow}, \theta, \phi)] \\
&= \frac{2}{r_s^2} [E_0^K + E_0^T + E_0^H + E_0^{X\text{-intra}} + E_0^{X\text{-inter}}], \quad (5.4)
\end{aligned}$$

donde $r_s = r_0/a_0^* = 1/(a_0^* \sqrt{\pi N})$ es el radio de Wigner Seitz, que lo usamos como pa-

rámetro adimensional para caracterizar la densidad bidimensional, $a_0^* = \epsilon \hbar^2 / e^2 m^*$ es el radio de Bohr efectivo para el semiconductor y $Ry^* = m^* e^4 / (2 \epsilon^2 \hbar^2)$ es el Rydberg efectivo. Además, $\eta_\alpha = \sum_\sigma \eta_{\alpha\sigma}$, $\eta_{\alpha\sigma} = \sum_{\mathbf{k}} \langle \alpha_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}\sigma} \rangle / AN$ ($\alpha = a, b, c$) son los factores de ocupación de sub-banda discriminados en espín (para $\alpha = c_1, c_2, c_3$ se definen los factores de ocupación de láminas). Hemos normalizado la Ec.(5.4) de manera que $0 \leq \eta_{\alpha\sigma} \leq 1$ y $\sum_{\alpha\sigma} \eta_{\alpha\sigma} = 1$.

El primer término en la Ec.(5.4),

$$\begin{aligned}
E_0^K &= \sum_{\alpha\sigma} \eta_{\alpha\sigma}^2 + \frac{r_s^2}{2} \left\{ \varepsilon_2^* \left[(\eta_a + \eta_c) \frac{\sin^2 \theta}{2} + \eta_b \cos^2 \theta \right] \right. \\
&+ \varepsilon_1^* \left[\eta_a \cos^4 \left(\frac{\theta}{2} \right) + \eta_b \frac{\sin^2 \theta}{2} + \eta_c \sin^4 \left(\frac{\theta}{2} \right) \right] \\
&+ \left. \varepsilon_3^* \left[\eta_a \sin^4 \left(\frac{\theta}{2} \right) + \eta_b \frac{\sin^2 \theta}{2} + \eta_c \cos^4 \left(\frac{\theta}{2} \right) \right] \right\}, \quad (5.5)
\end{aligned}$$

corresponde a la suma de los términos cinéticos intra-lámina y la energía de las láminas,

$$E_0^T = -\frac{r_s^2}{\sqrt{2}} t^* (\eta_a - \eta_c) \sin \theta \cos \phi \quad (5.6)$$

es el término de hopping o energía cinética inter sub-banda y es el único donde aparece el ángulo ϕ ,

$$\begin{aligned}
E_0^H &= -2d^* \left\{ \eta_b (\eta_a + \eta_c) + 2\eta_a \eta_c + \frac{\sin^2 \theta}{2} [(\eta_a - \eta_c)^2 + 2\eta_b^2 - \eta_b (\eta_a + \eta_c)] \right. \\
&- \left. \frac{\sin^4 \theta}{8} (\eta_a - 2\eta_b + \eta_c)^2 \right\} \quad (5.7)
\end{aligned}$$

es la energía electrostática (Hartree), mientras que

$$E_0^{X\text{-intra}} = -\frac{8 r_s}{3\pi} \sum_{\alpha\sigma} \eta_{\alpha\sigma}^{3/2}, \quad (5.8)$$

y

$$\begin{aligned}
E_0^{X\text{-inter}} &= r_s \sin^2 \theta \sum_{\sigma} \int_0^{\infty} dq (1 - e^{-2d^*q/r_s}) (I_{aa\sigma} + 2I_{bb\sigma} + I_{cc\sigma} - 2I_{ab\sigma} - 2I_{cb\sigma}) \\
&- \frac{r_s \sin^4 \theta}{8} \sum_{\sigma} \int_0^{\infty} dq (3 - 4e^{-2d^*q/r_s} + e^{-4d^*q/r_s}) \\
&\times (I_{aa\sigma} + 4I_{bb\sigma} + I_{cc\sigma} + 2I_{ac\sigma} - 4I_{ab\sigma} - 4I_{cb\sigma}) .
\end{aligned} \tag{5.9}$$

son las contribuciones intra sub-banda e inter sub-banda a la energía de intercambio, respectivamente. $d^* = d/a_0^*$ es la distancia entre la lámina central y las dos laterales (en unidades de radio de Bohr efectivo a_0^*), $t^* = t/\text{Ry}^*$ y $\varepsilon_i^* = \varepsilon_i/\text{Ry}^*$. La expresión para $I_{\alpha\beta\sigma}(q)$ está dada en el Apéndice A.2.

Para una combinación dada de parámetros ($r_s, d^*, t^*, \varepsilon_1^*, \varepsilon_2^*, \varepsilon_3^*$), la energía del estado fundamental E_0 depende de ocho parámetros $\eta_{a\uparrow}, \eta_{a\downarrow}, \eta_{b\uparrow}, \eta_{b\downarrow}, \eta_{c\uparrow}, \eta_{c\downarrow}, \theta, \phi$. Sin embargo, la condición de neutralidad de carga $\eta_a + \eta_b + \eta_c = 1$ nos permite eliminar unos de los seis factores de ocupación de sub-banda. En el caso del término de hopping, ya que $\sin \theta \geq 0$ para $0 \leq \theta \leq \pi$, para tener $E_0^T \leq 0$, se debe cumplir que $(\eta_a - \eta_c) \cos \phi \geq 0$. Se puede ver que la Ec.(5.4) para la energía es invariante ante el intercambio de "a" y "c". Entonces, como el ángulo ϕ solo interviene a través del término de hopping E_0^T , su valor está determinado por el signo de $\eta_a - \eta_c$. Por ejemplo, si consideramos que estamos restringidos a las configuraciones $\eta_a > \eta_c$, el valor óptimo es $\phi = 0$. En caso contrario, $\eta_a < \eta_c$, el valor óptimo es $\phi = \pi$. Ambas elecciones son equivalentes y hemos adoptado aquí la primera: $\eta_a \geq \eta_c, \phi = 0$.¹ Bajo estas condiciones, la energía E_0 ha sido minimizada numéricamente con respecto a los restantes seis parámetros variacionales: cinco factores de ocupación y el ángulo θ . Los resultados correspondientes se muestran en las Figs. (5.2)-(5.4).

La forma en que dependen las diferentes contribuciones a la energía con los parámetros r_s y d^* merece algunos comentarios. En el límite de bajas densidades, r_s es grande ya que es inversamente proporcional a la raíz cuadrada de la densidad, entonces la física es dominada por el hopping y las contribuciones de las energías de las láminas, que son efectos de una partícula. Por otro lado en el límite de altas densidades r_s es pequeño, y la principal contribución a la energía total viene del término cinético intra-lámina y el término de Hartree, que favorecen configuraciones bicapa efectivas con el pozo central vacío y los electrones distribuidos equitativamente entre los dos pozos laterales [75, 76]. La interacción de intercambio intra-lámina (5.8) depende linealmente con r_s , es siempre negativa y favorece configuraciones del estado fundamental polarizadas en espín. Con respecto a la interacción de intercambio

¹Note que si $\eta_a = \eta_c$ el valor de ϕ es irrelevante

inter-lámina, su dependencia con r_s y d^* es menos trivial, principalmente debido a la presencia del término d^*/r_s en las exponenciales. Como se discute en el Apéndice A.2, en el límite $d^*/r_s \ll 1$, desarrollando las exponenciales, este término se comporta de manera lineal en d^* , como la contribución de Hartree. En el límite opuesto $d^*/r_s \gg 1$, los términos exponenciales son pequeños y el término de intercambio depende linealmente con r_s . De acuerdo a nuestra evidencia numérica, este término es siempre positivo por lo que su configuración óptima es $\theta = 0$ o el caso balanceado $\eta_{a\sigma} = \eta_{b\sigma} = \eta_{c\sigma}$, ya que en ambos casos $E_0^{X\text{-inter}} = 0$.

5.3. Resultados

La energía total de la Ec.(5.4) como función de los seis parámetros variacionales presenta muchos mínimos locales, esto convierte el problema de encontrar un mínimo global en un problema numérico complicado. Además de esto, tenemos que minimizar la energía total manteniendo la condición $0 \leq \eta_i \leq 1$, con el mínimo global situado en algunos casos sobre la frontera. Para llevar a cabo la minimización hemos particionado el espacio 6-dimensional de parámetros en (típicamente) 10^6 regiones. Comenzando por el punto central de cada región, se busca un mínimo local usando el algoritmo Simplex [81]. Entonces tomamos el mínimo global como el mínimo entre todas las regiones. Este procedimiento es fácil de paralelizar, en particular lo hemos implementado usando MPI (Message Passing Interface)[82].

Antes de discutir los resultados numéricos es conveniente analizar algunos límites particulares del sistema tricapa, que admiten soluciones analíticas y semi-analíticas. Muchas de las configuraciones del estado fundamental que aparecen en estos límites ayudan al entendimiento de los casos más generales que discutiremos más adelante.

5.3.1. Límite $d^* = 0$

En el límite de distancias pequeñas entre las láminas, la expresión (5.4) para la energía del estado fundamental se simplifica notablemente,

$$\begin{aligned} \frac{E_0(d^* = 0)}{2/r_s^2} = & \sum_{\alpha\sigma} \left(\eta_{\alpha\sigma}^2 - \frac{8 r_s}{3\pi} \eta_{\alpha\sigma}^{3/2} \right) - \frac{t^* r_s^2}{\sqrt{2}} (\eta_a - \eta_c) \sin \theta \\ & + \frac{\varepsilon_2^* r_s^2}{2} \left[(\eta_a + \eta_c) \frac{\sin^2 \theta}{2} + \eta_b \cos^2 \theta \right] \end{aligned} \quad (5.10)$$

donde hemos tomado $\varepsilon_1^* = \varepsilon_3^* = 0$, $\varepsilon_2^* \neq 0$. Este límite idealizado será útil para entender las fases que aparecen más adelante en el caso general.

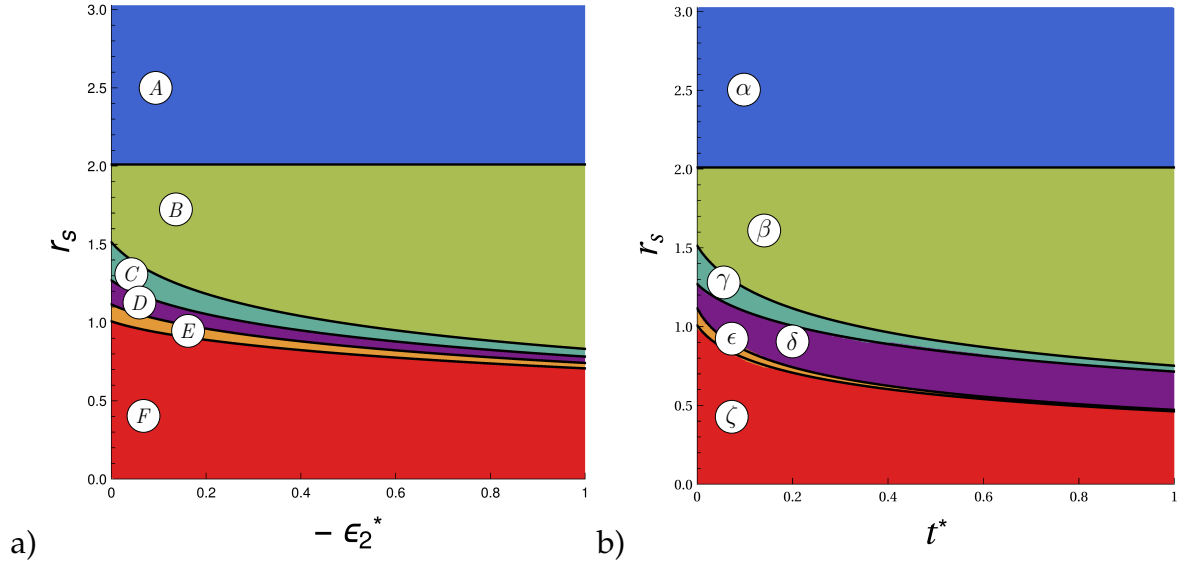


Figura 5.2: Estado fundamental en el espacio de parámetros: (a) $r_s - \epsilon_2^*$, para $d^* = t^* = 0$, (b) $r_s - t^*$, para $d^* = \epsilon_2^* = 0$. El significado de los diferentes símbolos en las figuras (a) y (b) está dado en la 5.1 y 5.2 respectivamente.

Tabla 5.1: Configuraciones del estado fundamental para $d^* = t^* = 0$. En todos los casos $\theta = 0$. Note que para $\theta = 0$, los factores de ocupación de sub-banda son los mismos que los factores de ocupación de láminas. El símbolo "sp" identifica los estados polarizados en espín, mientras que "ml", "bl" y "tl" identifican las configuraciones monocapa, bicapa y tricapa, respectivamente. Los parámetros x, y caracterizan las configuraciones con factores de ocupación que toman valores continuos.

Configuración	$\eta_{a\uparrow}$	$\eta_{a\downarrow}$	$\eta_{b\uparrow}$	$\eta_{b\downarrow}$	$\eta_{c\uparrow}$	$\eta_{c\downarrow}$
A: sp, ml	0	0	1	0	0	0
B: ml	0	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	0
C: sp,bl	$1 - 2x$	0	x	x	0	0
D: bl	$\frac{1-2x}{2}$	$\frac{1-2x}{2}$	x	x	0	0
E: sp,tl	y	y	x	x	$1 - 2x - 2y$	0
F: tl	$\frac{1-2x}{4}$	$\frac{1-2x}{4}$	x	x	$\frac{1-2x}{4}$	$\frac{1-2x}{4}$

En la Fig. 5.2(a) se muestra el diagrama de fases para el estado fundamental que resulta de la minimización numérica de la Ec.(5.10), para el caso $t^* = 0$. Lo más notable en el gráfico es el crecimiento de la configuración B ($\eta_{b\uparrow} = \eta_{b\downarrow} = 1/2$) con respecto a las demás, para valores pequeños de r_s , a medida que $-\epsilon_2^*$ aumenta. Esto es claro físicamente: como $\theta = 0$, la configuración B es equivalente a $\eta_{2\uparrow} = \eta_{2\downarrow} = 1/2$ y para valores negativos de ϵ_2^* favorece el llenado del pozo central. La frontera entre las configuraciones A y B no depende de ϵ_2^* , ya que la energía del término proporcional a ϵ_2^* es la misma en ambas configuraciones (ver Ec.(5.10)). El valor $r_s = 2.011$, que representa la frontera entre A y B , está determinado por el balance entre la energía cinética intra-lámina y la energía de intercambio intra-lámina. Para $t^* = 0$ (el caso analizado en la Fig. 5.2(a)), existe la simetría $\eta_a \leftrightarrow \eta_c$. Esto significa, por ejemplo, que la configuración C , correspondiente a $\eta_{b\uparrow} = \eta_{b\downarrow} = x$ y $\eta_{a\uparrow} = 1 - 2x$, es degenerada con

la configuración $\eta_{a\downarrow} = 1 - 2x$, o $\eta_{c\uparrow} = 1 - 2x$, o $\eta_{c\downarrow} = 1 - 2x$. Para t^* finito, veremos cómo se rompen algunas de estas degeneraciones. Las configuraciones A y B son las únicas donde todos los electrones están en una sola lámina, en este caso, la lámina central. Debido a la interacción de intercambio, que favorece las configuraciones polarizadas en espín, la configuración totalmente polarizada en espín A es preferida sobre la configuración no polarizada B para densidades tales que $r_s \geq 2.011$. Como en la mayoría de las transiciones mostradas en este Capítulo, en la frontera entre las configuraciones A y B , los factores de ocupación cambian abruptamente.

Tabla 5.2: Configuraciones del estado fundamental para $d^* = \varepsilon_2^* = 0$. En todos los casos $\theta = \pi/2$. Los parámetros x, y caracterizan las configuraciones con factores de ocupación que toman valores continuos.

Configuraciones	$\eta_{a\uparrow}$	$\eta_{a\downarrow}$	$\eta_{b\uparrow}$	$\eta_{b\downarrow}$	$\eta_{c\uparrow}$	$\eta_{c\downarrow}$
α : sp, tl	1	0	0	0	0	0
β : tl	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	0	0	0
γ : sp, tl	x	x	$1 - 2x$	0	0	0
δ : tl	x	x	$\frac{1-2x}{2}$	$\frac{1-2x}{2}$	0	0
ϵ : sp, tl	x	x	y	y	$1 - 2x - 2y$	0
ζ : tl	x	x	y	y	$\frac{1-2x-2y}{2}$	$\frac{1-2x-2y}{2}$

A modo de entender el efecto de parámetro de hopping t^* , en la Fig. 5.2(b) se muestran las configuraciones del estado fundamental en el espacio de parámetros $r_s - t^*$, para $d^* = \varepsilon_2^* = 0$. De la Ec.(5.10) para $\varepsilon_2^* = 0$, podemos ver que la energía de hopping alcanza su óptimo valor cuando $\theta = \pi/2$, $\eta_a > \eta_c$. En el límite de bajas densidades $r_s \gg 1$, el término de hopping es la contribución dominante y todos los electrones están en la sub-banda a (configuraciones α y β). En el límite de altas densidades $r_s \ll 1$, la física es dominada por el término de energía cinética intra sub-banda, que alcanza su óptimo valor cuando los electrones se distribuyen entre todas las sub-bandas a, b y c . La energía de intercambio intra sub-banda, que depende linealmente con r_s , tiene el rol dominante a densidades intermedias favoreciendo configuraciones polarizados en espín y pseudo espín sobre las no polarizadas, a medida que r_s aumenta (i.e., $\beta \rightarrow \alpha, \delta \rightarrow \gamma, \zeta \rightarrow \epsilon$). Aumentando t^* , la configuración β se vuelve más estable y gana estabilidad en el espacio de parámetros.

A primera vista no queda claro porqué las configuraciones del estado fundamental $d^* = t^* = \varepsilon_2^* = 0$ mostradas en las Figs. 5.2(a) y 5.2(b) no son las mismas. El punto aquí es que en la Fig. 5.2(a) (Fig. 5.2(b)) se muestran las configuraciones para valores finitos de ε_2^* (t^*). El caso donde los tres parámetros d^*, t^* y ε_2^* son estrictamente nulos está de alguna manera indefinido, puesto que la energía total se reduce al primer término en la Ec.(5.10), y el ángulo θ queda indeterminado. Ya que cualquier valor de θ está permitido, la configuración del estado fundamental no es única. Este misma consideración vale también para el resultado mostrado en la Figura 2 de la

[66].

5.3.2. Resultados numéricos para el modelo general

En la Fig. 5.3 se muestran las configuraciones del estado fundamental en el plano $r_s - d^*$, con un hopping dependiente de la distancia $t^*(d^*) = \exp(-\frac{\beta^* d^*}{2})$, donde $\beta^* \simeq 2.97$ [64]. Para $d^* \ll 1$, el hopping es considerable ($t^*(0) \simeq 1$) y las configuraciones del estado fundamental son las mismas que en la 5.2(b). Para $d^* \gg 1$, el término de Hartree pasa a ser el predominante y se obtienen las configuraciones para $t^* = \varepsilon_2^* = 0$ de la referencia [66]. Como el término E_0^T depende cuadráticamente en r_s , para valores suficientemente grandes de r_s el sistema entra en un régimen dominado por el hopping. La configuración $P2'$, que es diferente del estado con coherencia espontánea inter-lámina $P1$ encontrada previamente ($\eta_{b\uparrow} = 1, \theta = \pi/2$) [66], resulta de una competencia entre los términos de hopping e intercambio inter sub-banda.

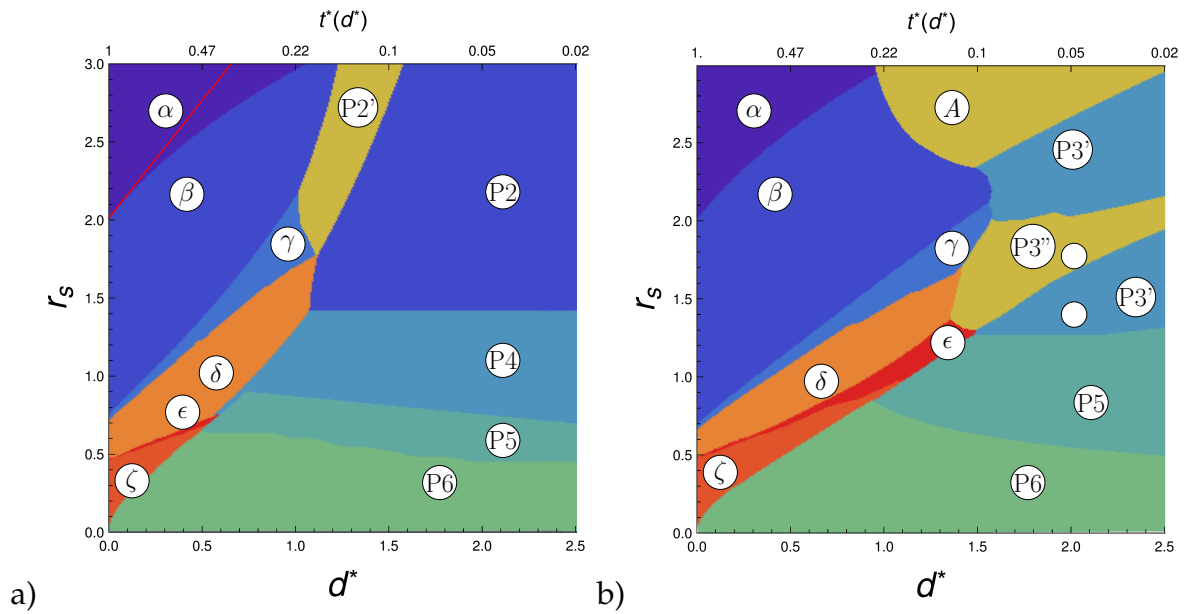


Figura 5.3: Estado fundamental en el espacio de parámetros $r_s - d^*$, para: (a) $\varepsilon_2^* = 0$, (b) $\varepsilon_2^* = -0.8$, con el parámetro de hopping $t^*(d^*)$ dependiente de la distancia. El significado de los diferentes símbolos está dado en 5.3. La línea recta en (a) corresponde a la aproximación dada en la 5.11 para la frontera entre las configuraciones α y β . Los dos círculos vacíos en (b) corresponden a la muestra experimental de la referencia [70] (ver texto).

Otra característica interesante en las Figs. 5.3 ((a) y (b)) es el comportamiento de la frontera entre configuraciones α (polarizada en espín) y β (no polarizada en espín). Para $d^* = 0$, el límite está en el valor esperado $r_s = 2.011$ (como en la Fig. 5.2(b)). Sin embargo, cuando d^* aumenta y $t^*(d^*)$ disminuye, la frontera entre configuraciones polarizadas y no polarizadas en espín se mueve a densidades bajas. Incluso para la densidad más baja considerada ($r_s = 3.0$), es posible encontrar situaciones donde el sistema se estabiliza en una fase paramagnética. Esto es debido a

Tabla 5.3: Configuración del estado fundamental para $\varepsilon_2^* = 0$, con el parámetro de hopping $t^*(d^*)$ dependiente de la distancia. La configuración $P3$ está presente entre $P4$ y $P5$, pero no es visible en la Fig. 5.3(a) porque es muy estrecha. El símbolo "sp*" se usa para indicar que esta configuración es degenerada con la configuración no-polarizada obtenida de invertir el espín de una componente. Los parámetros x, y caracterizan las configuraciones con factores de ocupación que toman valores continuos.

Configuración	$\eta_{a\uparrow}$	$\eta_{a\downarrow}$	$\eta_{b\uparrow}$	$\eta_{b\downarrow}$	$\eta_{c\uparrow}$	$\eta_{c\downarrow}$	θ
$P2'$: sp, tl	x	0	$1 - x$	0	0	0	$\pi/2$
$P2$: sp*, bl	$\frac{1}{2}$	0	0	0	$\frac{1}{2}$	0	0
$P3$: bl	x	$1 - 2x$	0	0	x	0	0
$P3'$:tl	x	0	$1 - 2x$	0	x	0	0
$P3''$:tl	x	0	y	0	$1 - x - y$	0	$\pi/2$
$P4$: bl	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	0	0	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	0
$P5$: tl	x	x	$1 - 4x$	0	x	x	0
$P6$: tl	x	x	$\frac{1-4x}{2}$	$\frac{1-4x}{2}$	x	x	0

la dependencia con d^* del término de intercambio inter sub-banda. Como se explica en el Apéndice A.2, en el límite $d^*/r_s \rightarrow 0$ se obtiene una dependencia lineal con d^* para este término, como se ve en la Ec.(A.18). Considerando que las energías de hopping y Hartree son las mismas en las configuraciones α y β , la frontera entre ambas puede ser obtenida igualando la suma de las contribuciones cinética intra sub-banda e intercambio en ambas fases. En el límite $d^*/r_s \rightarrow 0$, usando el desarrollo en la Ec.(A.18) para el término de intercambio inter sub-banda, obtenemos la ecuación para la frontera

$$r_s^{\alpha\beta}(d^*) = \frac{3\pi}{8} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\right) \left(1 + \frac{3d^*}{4}\right) \simeq 2.011 \left(1 + \frac{3d^*}{4}\right), \quad (5.11)$$

válida a primer orden en d^* . La estabilización de la fase β está inducida por la optimización del término de intercambio inter sub-banda, cuando el ángulo $\theta \neq 0$. A su vez este ángulo $\theta \neq 0$ es una consecuencia de que el hopping entre las láminas es finito. Para valores más grandes de d^* , el sistema pasa de la fase β a la $P2'$. Cuando las láminas están más separadas, el ángulo θ pasa de $\pi/2$ a 0, el sistema pierde energía de hopping y la configuración con mínima energía pasa a ser $P2$.

La única diferencia entre la Fig. 5.3(a) y la Fig. 5.3(b) es que en la primera $\varepsilon_2^* = 0$, mientras que en la segunda $\varepsilon_2^* = -0.8$. Las principales consecuencias son, en primer lugar, la desaparición de las configuraciones $P2$, $P2'$ y $P4$ de la Fig. 5.3(a) en la Fig. 5.3(b), siendo reemplazadas por las configuraciones $P3'$ y $P3''$, y en segundo lugar, el crecimiento de la estabilidad de la fase inducida por el hopping en el lado izquierdo del diagrama. Esta última característica es fácil de entender: puesto que $\varepsilon_2^* < 0$, la ocupación de la lámina central aumenta y esto favorece particularmente la estabilidad de las configuraciones α y β . Este efecto también se refleja en las configuraciones $\gamma, \delta, \epsilon, \zeta$, aunque con menos intensidad, debido a la menor influencia del

término de hopping y las energías de la lámina para valores menores de r_s . Respecto a la desaparición de las configuraciones $P2$ y $P4$ que están presentes en la Fig. 5.3(a) pero no en la Fig. 5.3(b), podemos decir que esto es debido a que ambas configuraciones tiene la lámina central vacía, entrando en conflicto directo con el hecho de que $\varepsilon_2^* < 0$. Por otra parte las nuevas ocupaciones $P3'$ y $P3''$ sí tienen el pozo central ocupado.

Como en el caso $\varepsilon_2^* = 0$, la configuración no polarizada en espín β está aún presente a bajas densidades ($r_s > 2.0$) cuando la distancia entre las láminas no es grande. Sin embargo cuando d^* aumenta (el hopping disminuye) la configuración A es estabilizada. Esta configuración implica que todos los electrones están en la lámina central con la misma proyección del espín. Para valores aún mayores de d^* , la energía de Hartree pasa a ser importante y configuraciones con las tres láminas ocupadas, como $P3'$, presentan menor energía.

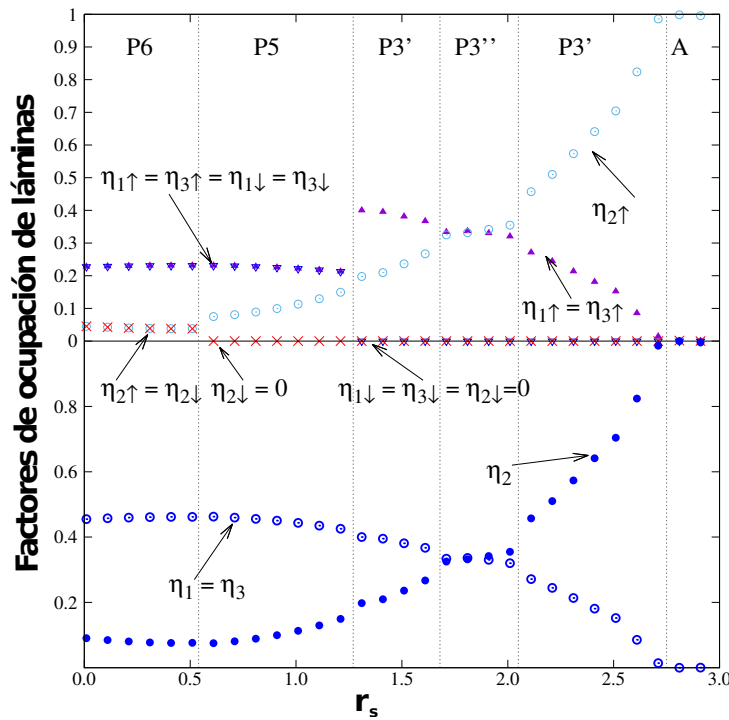


Figura 5.4: Factores de ocupación de láminas para $d^* = 2$, $\varepsilon_2^* = -0.8$ y $t^*(d^* = 2) = 0.05$. En el panel superior (inferior) se muestran los factores de ocupación discriminados (indiscriminados) en espín. Las líneas finas verticales muestran la zona donde hay un cambio en la configuración del estado fundamental.

Finalmente, mostramos en la Fig. 5.4 la ocupación de las láminas como función de r_s , para valores fijos de d^* ($\simeq 2$), t^* ($\simeq 0.05$) y ε_2^* ($\simeq -0.8$) [70]. Para $r_s \rightarrow 0$, la ocupación de las láminas en la figura son cercanos a los estimados analíticamente en referencia [66], de acuerdo a la cual los factores de ocupación por lámina en la configuración $P6$ están dados por

$$\eta_a = \eta_c = \frac{1}{3} \left(1 + \frac{\xi}{2} \right) \quad \eta_b = \frac{1}{3} (1 - \xi) , \quad (5.12)$$

con $\xi(d^*) = (1 + 3/4d^*)^{-1}$. Evaluando estas expresiones para $d^* = 2$, obtenemos que $\eta_a = \eta_c = 5/11 \simeq 0.45$, $\eta_b = 1/11 \simeq 0.09$, muy cercanos a los valores a $r_s = 0$ en la Fig. 5.4. Estos estimados analíticos se obtienen considerando solamente las interacciones cinética intra-lámina y de Hartree. La redistribución abrupta de carga entre las láminas recuerda la transferencia abrupta de electrones entre el estado fundamental y el primer estado excitado de un pozo cuántico semiconductor, observado experimentalmente en referencia [83] y discutido teóricamente en referencia [60].

Aumentando r_s , las secuencias de transiciones son como sigue: $P6 \rightarrow P5 \rightarrow P3' \rightarrow P3'' \rightarrow P3' \rightarrow A$. Las transiciones $P6 \rightarrow P5$ y $P5 \rightarrow P3'$ son claramente discontinuas. Por su parte, en la secuencia "reentrante" $P3' \rightarrow P3'' \rightarrow P3'$, solo hay pequeños cambios de ocupaciones en las fronteras. Esta secuencia "reentrante" es interesante, ya que refleja una vez más la importancia de la energía de intercambio inter-lámina $E_0^{\text{X-inter}}$ y su competencia con el término de hopping E_0^{T} . En la configuración $P3'$, $\theta = 0$, que es una de las formas posibles en las que se cancela la contribución positiva en $E_0^{\text{X-inter}}$, aunque esto lleva a una pérdida en la energía de hopping también. Pero para $1.68 \lesssim r_s \lesssim 2.05$, la configuración "balanceada" $P3''$ se convierte en la de menor energía; ya que $\eta_{1\uparrow} \simeq \eta_{2\uparrow} \simeq \eta_{3\uparrow}$, $E_0^{\text{X-inter}}$ se minimiza usando la segunda forma de optimizarse: igual ocupación de las sub-bandas. Esto permite que $\theta \neq 0$ y lleva a una ganancia en la energía de hopping. Aumentando aún más r_s , la condición de igual ocupación no puede mantenerse y el sistema regresa a la fase no "balanceada" $P3'$, pero ahora con la lámina central más ocupada.

Los parámetros d^* , t^* y ε_2^* usados en la Fig. 5.4 fueron obtenidos directamente del triple pozo cuántico semiconductor estudiado experimentalmente en la referencia [70], como se explica en la referencia [64]. Después de ajustar estos parámetros, nuestro modelo reproduce cualitativamente las principales características de cálculos más elaborados reportados en la referencia [70], usando Teoría de la Funcional Densidad en la aproximación LDA. En particular, en la referencia [70] se reporta que $\eta_1 \simeq \eta_2 \simeq \eta_3 \simeq 1/3$ cuando $N \simeq 10.8 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ ($r_s \simeq 1.74$, que corresponde al círculo vacío de arriba en la 5.3(b)), y que $\eta_1/\eta_2 \simeq \eta_3/\eta_2 \simeq 2$ cuando $N \simeq 16.7 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ ($r_s \simeq 1.4$, correspondiente al círculo vacío de abajo en la 5.3(b)). Estos resultados en la aproximación LDA coinciden cualitativamente con los resultados de nuestro modelo, como se muestra en la Fig. 5.4. Esto nos da cierta confianza en nuestro modelo simple, ya que puede reproducir resultados de cálculos más complicados. También podría ser útil en el diseño de muestras reales y para el entendimiento de la física de sistemas semiconductores tricapa.

5.4. Conclusiones

Se han determinado las principales configuraciones del estado fundamental de un sistema semiconductor tricapa en el marco de la aproximación de Hartree-Fock variacional. Las láminas metálicas están acopladas a través del hopping y coulombianamente por la interacción de Hartree e intercambio. A densidades altas el sistema se hace simple, ya que los únicos términos que contribuyen a la energía total son el término de energía cinética intra-lámina y el término de Hartree. El límite de bajas densidades está determinado por dos efectos de una partícula introducidos en este trabajo: el hopping entre láminas y la energía de láminas. Se obtuvo que la interacción de intercambio inter-lámina juega un papel fundamental, ayudando en la estabilización de configuraciones balanceadas, en cuya vecindad son diseñadas muchas de las muestras experimentales. Se espera que los resultados presentados en este Capítulo, para un amplio rango de parámetros, puedan servir como una guía cualitativa en el diseño de muestras experimentales, y que además sean útiles en el entendimiento de la física de los sistemas de tres capas semiconductoras a campo magnético cero.

Capítulo 6

Anisotropía de pseudo-espín para un semiconductor tricapa

Cuando dos niveles del Landau están cercanos a coincidir en energía cerca del potencial químico en el IQHE, éstos pueden: a) mostrar comportamiento tipo “anti-cruce” o b) mantenerse cercanos en una situación de cuasi-degeneración mientras variamos alguno de los parámetros que los indujo a cruzarse. En este Capítulo, estudiaremos teóricamente todos los posibles cruces de LLs en un sistema tricapa semiconductor, usando una aproximación de Hartree-Fock variacional similar a la empleada en el Capítulo anterior. El modelo que utilizamos incluye hopping entre láminas vecinas, efectos del campo eléctrico externo (bias) e interacción de Coulomb intra e inter-lámina. El estudio presentado en este Capítulo fue publicado en la referencia [84].

6.1. Introducción

Como habíamos mencionado anteriormente, el efecto Hall cuántico entero es esencialmente un fenómeno de una partícula [85, 86]. Sin embargo, efectos de muchos cuerpos pueden ser aún importantes para la física en este régimen, principalmente en las regiones donde se cruzan dos LLs. La aparición de estados con ruptura espontánea de simetría similares a los estados eje-fácil (easy-axis de aquí en adelante) o plano-fácil (easy-plane de aquí en adelante) del ferromagnetismo ha llevado a nombrar estas situaciones de cruce entre niveles de Landau como ferromagnetismo Hall cuántico (QHF, del inglés *Quantum Hall Ferromagnetism*) [87]. En las vecindades del cruce entre LLs en un campo magnético inclinado respecto a la normal al plano del gas de electrones, la resistividad longitudinal ρ_{xx} como función del valor de la componente de campo magnético perpendicular al plano presenta picos con histéresis, que indican la ocurrencia de QHF [88]. Los picos en la resistividad fueron

discutidos teóricamente en las referencias [89, 90], usando un esquema de cálculo auto-consistente basado en RPA/Hartree-Fock (RPA del inglés Random Phase Approximation). En sistemas bicapa o monocapas con dos sub-bandas, podemos tener cruces entre LLs sin necesidad de inclinar el campo magnético, como se ha observado experimentalmente [11, 91, 92] y discutido teóricamente [78, 79, 93–95] en muchos trabajos previos. En particular, en la referencia [79], basados en un método de HF variacional, se hace una clasificación exhaustiva de las posibles anisotropías ferromagnéticas: dependiendo de los números cuánticos de los LLs el sistema puede presentar estados ferromagnéticos tipo isotrópico (I), eje-fácil (EA) o plano-fácil (EP).

6.2. Modelo y estados de una partícula

Teniendo en cuenta lo discutido en el Capítulo 2 para un q2DEG con un campo magnético aplicado según la dirección z , podemos escribir los estados electrónicos en la forma:

$$\Psi_{i,n,k}^{\sigma}(x, y, z) = \phi_{n,k_y}(x) \frac{e^{iyk}}{\sqrt{L_y}} \lambda_{\xi}(z) \eta_{\sigma}, \quad (6.1)$$

donde $\phi_{n,k_y}(x)$ está dada por la Ec.(2.10), ξ es el índice de sub-banda y σ es el índice de espín, que puede tomar valores ± 1 . η_{σ} es un espinor, tal que

$$\eta_{+} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \eta_{-} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (6.2)$$

En este modelo simple, como se ilustra en la Fig. 6.1, la función de onda de la sub-banda i según z se escribe como

$$\lambda_{\xi}(z) = a_{\xi} \sqrt{\delta(z+d)} + b_{\xi} \sqrt{\delta(z)} + c_{\xi} \sqrt{\delta(z-d)}, \quad (6.3)$$

donde $\xi = -1, 0, 1$ y los coeficientes a_i, b_i, c_i son los autovalores de la matriz de 3×3

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_1 & -t & 0 \\ -t & \varepsilon_2 & -t \\ 0 & -t & \varepsilon_3 \end{pmatrix}. \quad (6.4)$$

$\varepsilon_1, \varepsilon_2$ y ε_3 son las energías de los electrones en las láminas 1, 2 y 3, respectivamente. En el presente modelo, igual que en Capítulo previo, hemos considerado gases de electrones 2D estrictos, por lo que en adelante hablaremos de 2DEG (en lugar de q2DEG). Cada uno de los tres 2DEG es representado por una lámina metálica estrictamente bidimensional, ésta es la aproximación expresada detrás de la Ec.(6.3).

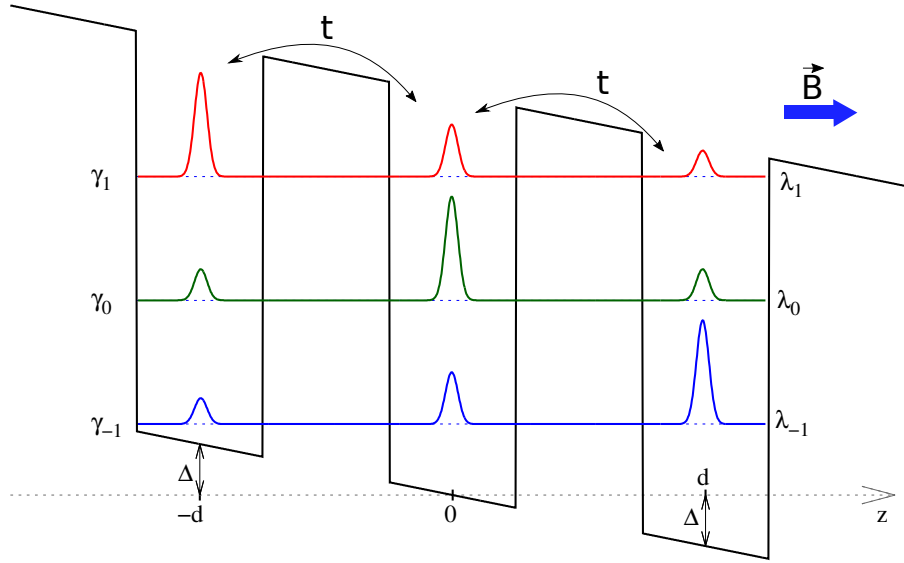


Figura 6.1: Vista esquemática del sistema tricapa. γ_{-1} ($\lambda_{-1}(z)$), γ_0 ($\lambda_0(z)$) y γ_1 ($\lambda_1(z)$) son los autovalores (autovectores) de la matriz de 3×3 en (6.4). t y Δ representan el hopping y bias entre láminas vecinas, respectivamente. d es la distancia entre los centros de los pozos cuánticos. Un campo magnético de intensidad B es aplicado a lo largo del eje z (flecha gruesa).

Llamando $\gamma_\xi(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, t)$ a los autovalores correspondientes a la matriz definida en (6.4) ($\gamma_{-1} \leq \gamma_0 \leq \gamma_1$), la solución asociada a la función de onda en la Ec.(6.1) tiene energía $E_{\xi n}^\sigma = \gamma_\xi + (n + 1/2) \hbar\omega_c + g\mu_B B\sigma/2$ (Ec.(2.12)).

La interacción de Coulomb entre los electrones, cuyo efecto será analizado ahora, mezcla (en principio) todos los niveles de Landau, por lo que los índices ξ , n , σ pierden la propiedad de ser los "buenos" números cuánticos. En este Capítulo, estamos interesados en analizar los estados de muchos cuerpos que pueden ocurrir cuando dos niveles de Landau están cerca de alinearse, mientras se mantienen suficientemente alejados del resto de los LLs. Siguiendo la estrategia de la referencia [79] para el caso de un sistema bicapa, simplificaremos el sistema totalmente interactuante descrito anteriormente considerando explícitamente solo la interacción de Coulomb entre los dos niveles de Landau que se encuentran cerca del potencial químico, mientras incluimos los efectos de los niveles de menor energía (totalmente llenos) en la forma de un campo efectivo de una partícula. Denotaremos con el símbolo $p = \uparrow, \downarrow$ a cada uno de los niveles de Landau que se alinean y nos referiremos a éste como el índice de pseudo-espín. Estos dos niveles que se alinean tendrán números cuánticos $\xi(\uparrow), n(\uparrow), \sigma(\uparrow)$ y $\xi(\downarrow), n(\downarrow), \sigma(\downarrow)$.

Dentro de este modelo truncado, el conjunto total de funciones de una partícula se reduce a las siguientes funciones de onda,

$$\psi_{p,k_y}(\mathbf{r}) = \lambda_{\xi(p)}(z) \phi_{n(p),\sigma(p),k_y}(x) \frac{\exp(iyk_y)}{\sqrt{L_y}}, \quad (6.5)$$

donde $\phi_{n(p),\sigma(p),k_y}(x) = \phi_{n(p),k_y}(x) \times \eta_{\sigma(p)}$. Debido a la presencia del término $\eta_{\sigma(p)}$, $\psi_{p,k_y}(\mathbf{r})$ es un espinor de dos componentes.

En el formalismo de segunda cuantización, el operador que crea una partícula en un estado con orientación de pseudo-espín arbitraria $\hat{m} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$ esta dado por

$$\hat{c}_{\hat{m},k_y}^\dagger = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \hat{c}_{\uparrow,k_y}^\dagger + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\varphi} \hat{c}_{\downarrow,k_y}^\dagger, \quad (6.6)$$

donde $\hat{c}_{p,k}^\dagger$ crea una partícula en el estado cuya función de onda está dada por la Ec.(6.5). Como veremos, el valor de \hat{m} en el cruce entre dos niveles de Landau nos permitirá establecer un esquema general de clasificación para todos los posibles cruces de niveles en sistemas tricapa. Note que para $\theta = 0$ ($m_z = +1$) o $\theta = \pi$ ($m_z = -1$), el electrón está en un estado puro de pseudo-espín \uparrow o \downarrow , mientras que para cualquier otro valor de θ el electrón estará en un estado mezclado.

6.3. Hamiltoniano de muchos cuerpos

El hamiltoniano de muchos cuerpos que describe la interacción entre los niveles de Landau que se cruzan, teniendo en cuenta a los niveles llenos como una contribución de campo medio, puede ser escrito en el espacio de Hilbert 2D de la siguiente forma compacta:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & - \sum_{i=1,x,y,z} \sum_{k=1}^{N_\phi} \sum_{\alpha,\alpha'=1}^2 b_i \sigma_i^{\alpha',\alpha} \hat{c}_{p(\alpha'),k}^\dagger \hat{c}_{p(\alpha),k} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1,x,y,z} \sum_{\substack{k_1,k'_1 \\ k_2,k'_2=1}}^{N_\phi} \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha'_1 \\ \alpha_2,\alpha'_2=1}}^2 W_{i,j}^{k'_1,k'_2,k_1,k_2} \sigma_i^{\alpha'_1,\alpha_1} \sigma_j^{\alpha'_2,\alpha_2} \hat{c}_{p(\alpha'_1),k'_1}^\dagger \hat{c}_{p(\alpha'_2),k'_2}^\dagger \hat{c}_{p(\alpha_2),k_2} \hat{c}_{p(\alpha_1),k_1}, \end{aligned} \quad (6.7)$$

donde $p(1) = \uparrow, p(2) = \downarrow, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ son las matrices de Pauli y σ_1 es la matriz identidad de 2×2 . b_i son los términos de un cuerpo, que incluyen las contribuciones no interactuantes presentes en la ecuación para la energía de los LLs $E_{\xi n}^\sigma$, además de las interacciones con los electrones en los LLs llenos. El potencial $W_{i,j}$ representa diferentes combinaciones (ver Ec.(6.13)) de los elementos matriciales de la interacción de Coulomb $V_{p'_1,p'_2,p_1,p_2}$

$$V_{p'_1,p'_2,p_1,p_2}^{k'_1,k'_2,k_1,k_2} = \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \psi_{p'_1,k'_1}^*(\mathbf{r}_1) \psi_{p'_2,k'_2}^*(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{\epsilon |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \psi_{p_1,k_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{p_2,k_2}(\mathbf{r}_2). \quad (6.8)$$

ϵ es la constante dieléctrica del semiconductor. Aproximando el estado de muchos cuerpos como un determinante de Slater con orientación de pseudo-espín \hat{m} , tenemos,

$$|\psi[\hat{m}]\rangle = \prod_{k=1}^{N_\phi} c_{\hat{m}k}^\dagger |0\rangle, \quad (6.9)$$

donde $\hat{c}_{\hat{m},k}^\dagger$ está definido por la Ec.(6.6). Podemos así encontrar la energía por partícula en la aproximación de Hartree-Fock como,

$$e_{HF}(\hat{m}) \equiv \frac{\langle \psi[\hat{m}] | \hat{H} | \psi[\hat{m}] \rangle}{N_\phi} \quad (6.10)$$

$$= - \sum_{i=x,y,z} \left(b_i - \frac{1}{2} U_{1,i} - \frac{1}{2} U_{i,1} \right) m_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j=x,y,z} U_{i,j} m_i m_j, \quad (6.11)$$

donde

$$U_{i,j} = \frac{1}{N_\phi} \sum_{k_1, k_2=1}^{N_\phi} \left(W_{i,j}^{k_1, k_2, k_1, k_2} - W_{i,j}^{k_2, k_1, k_1, k_2} \right). \quad (6.12)$$

Las cantidades $W_{i,j}^{k'_1, k'_2, k_1, k_2}$ en la Ec.(6.12) están relacionadas con los $V_{p'_1, p'_2, p_1, p_2}^{k'_1, k'_2, k_1, k_2}$ a través de la siguiente ecuación,

$$W_{i,j}^{k'_1, k'_2, k_1, k_2} = \sum_{p'_1, p'_2, p_1, p_2} \alpha_{i,j}^{p'_1, p'_2, p_1, p_2} V_{p'_1, p'_2, p_1, p_2}^{k'_1, k'_2, k_1, k_2}, \quad (6.13)$$

donde los coeficientes $\alpha_{i,j}^{p'_1, p'_2, p_1, p_2}$ están definidos en la Tabla 6.1. Reemplazando esta relación en la Ec.(6.12), tenemos

$$\begin{aligned} U_{i,j} &= \frac{1}{N_\phi} \sum_{p'_1, p'_2, p_1, p_2} \alpha_{i,j}^{p'_1, p'_2, p_1, p_2} \sum_{k_1, k_2=1}^{N_\phi} \left(V_{p'_1, p'_2, p_1, p_2}^{k_1, k_2, k_1, k_2} - V_{p'_1, p'_2, p_1, p_2}^{k_2, k_1, k_1, k_2} \right) \\ &= \sum_{p'_1, p'_2, p_1, p_2} \alpha_{i,j}^{p'_1, p'_2, p_1, p_2} \frac{1}{2\pi} \left(v_{p'_1, p'_2, p_1, p_2}(0) - \int_0^\infty q e^{-q^2/2} v_{p'_1, p'_2, p_1, p_2}(q) dq \right). \end{aligned} \quad (6.14)$$

Al pasar de la primera a la segunda línea en la ecuación anterior hemos usado la representación de Fourier quasi-2D para la interacción de Coulomb, así obtenemos la relación [79]

$$V_{p'_1, p'_2, p_1, p_2}^{k'_1, k'_2, k_1, k_2} = \frac{1}{A} \sum_{\mathbf{q}} \delta_{q_y, k'_1 - k_1} \delta_{-q_y, k'_2 - k_2} e^{iq_x(k'_1 + k_1)/2} e^{-iq_x(k'_2 + k_2)/2} v_{p'_1, p'_2, p_1, p_2}(q),$$

entonces

$$\begin{aligned} \frac{1}{N_\phi} \sum_{k_1, k_2=1}^{N_\phi} \left(V_{p'_1, p'_2, p_1, p_2}^{k_1, k_2, k_1, k_2} - V_{p'_1, p'_2, p_1, p_2}^{k_2, k_1, k_1, k_2} \right) &= \int \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} e^{-q^2/2} \left[v_{p'_1, p'_2, p_1, p_2}(0) - v_{p'_1, p'_2, p_1, p_2}(q) \right] \\ &= \frac{1}{2\pi} \left(v_{p'_1, p'_2, p_1, p_2}(0) - \int_0^\infty q e^{-q^2/2} v_{p'_1, p'_2, p_1, p_2}(q) dq \right). \end{aligned} \quad (6.15)$$

$v_{p'_1, p'_2, p_1, p_2}(q)$ es el producto de dos términos,

$$v_{p'_1, p'_2, p_1, p_2}(q) = v_{p'_1, p'_2, p_1, p_2}^\parallel(q) v_{\xi(p'_1), \xi(p'_2), \xi(p_1), \xi(p_2)}^\perp(q). \quad (6.16)$$

$v_{p'_1, p'_2, p_1, p_2}^\perp(q)$ es el factor de sub-banda y $v_{p'_1, p'_2, p_1, p_2}^\parallel(q)$ es el factor en el plano. Este último factor depende solamente de las funciones de onda en el plano 2D que son las mismas en sistemas bicapas y tricapas. Por esta razón el único término que diferencia respecto a los sistemas bicapas es el factor de sub-banda. A partir de aquí usaremos l_B (longitud magnética) como unidad de longitud y $e^2/\epsilon l_B$ como unidad de energía. El primer factor en (6.14), a $q = 0$, representa la contribución de Hartree y el segundo factor corresponde al intercambio.

El factor de sub-banda está definido por

$$v_{\xi(p'_1), \xi(p'_2), \xi(p_1), \xi(p_2)}^\perp(q) = \int_{-\infty}^{\infty} dz_1 \int_{-\infty}^{\infty} dz_2 e^{-q|z_1 - z_2|} \lambda_{\xi(p'_1)}(z_1) \lambda_{\xi(p'_2)}(z_2) \lambda_{\xi(p_1)}(z_1) \lambda_{\xi(p_2)}(z_2). \quad (6.17)$$

De las Ecs. (6.3) y (6.17) tenemos

$$\begin{aligned} v_{\xi(p'_1), \xi(p'_2), \xi(p_1), \xi(p_2)}^\perp(q) &= a_{\xi(p'_1)} a_{\xi(p'_2)} a_{\xi(p_1)} a_{\xi(p_2)} + b_{\xi(p'_1)} b_{\xi(p'_2)} b_{\xi(p_1)} b_{\xi(p_2)} + c_{\xi(p'_1)} c_{\xi(p'_2)} c_{\xi(p_1)} c_{\xi(p_2)} \\ &+ \left[a_{\xi(p'_1)} b_{\xi(p'_2)} a_{\xi(p_1)} b_{\xi(p_2)} + b_{\xi(p'_1)} a_{\xi(p'_2)} b_{\xi(p_1)} a_{\xi(p_2)} \right] e^{-qd} \\ &+ \left[b_{\xi(p'_1)} c_{\xi(p'_2)} b_{\xi(p_1)} c_{\xi(p_2)} + c_{\xi(p'_1)} b_{\xi(p'_2)} c_{\xi(p_1)} b_{\xi(p_2)} \right] e^{-qd} \\ &+ \left[a_{\xi(p'_1)} c_{\xi(p'_2)} a_{\xi(p_1)} c_{\xi(p_2)} + c_{\xi(p'_1)} a_{\xi(p'_2)} c_{\xi(p_1)} a_{\xi(p_2)} \right] e^{-2qd}. \end{aligned} \quad (6.18)$$

Note que (6.18) reproduce todos los casos del sistema bicapa si tomamos $b_\xi = 0$ y a_ξ, c_ξ como los definidos en la Ec.(1) de la referencia [79].

El factor en el plano está dado por

$$\begin{aligned}
v_{p'_1, p'_2, p_1, p_2}^{\parallel}(q) &= \frac{e^{q^2/2}}{q} \int d\Omega \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 e^{iq_x x_1} \phi_{n(p'_1), \sigma(p'_1), q_y/2}^{\dagger}(x_1) \phi_{n(p_1), \sigma(p_1), -q_y/2}(x_1) \\
&\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 e^{-iq_x x_2} \phi_{n(p'_2), \sigma(p'_2), -q_y/2}^{\dagger}(x_2) \phi_{n(p_2), \sigma(p_2), q_y/2}(x_2) \\
&= \delta_{\sigma(p'_1), \sigma(p_1)} \delta_{\sigma(p'_2), \sigma(p_2)} \delta_{n(p'_1) - n(p_1), n(p_2) - n(p'_2)} \left(\frac{n_1^{\leq}! n_2^{\leq}!}{n_1^{\geq}! n_2^{\geq}!} \right)^{1/2} \\
&\quad \times \frac{2\pi}{q} \left(\frac{q^2}{2} \right)^{n_1^{\geq} - n_1^{\leq}} L_{n_1^{\leq}}^{n_1^{\geq} - n_1^{\leq}} \left(\frac{q^2}{2} \right) L_{n_2^{\leq}}^{n_2^{\geq} - n_2^{\leq}} \left(\frac{q^2}{2} \right), \tag{6.19}
\end{aligned}$$

donde $d\Omega$ es el ángulo sólido 2D. $L_n^m(x)$ son los polinomios de Laguerre generalizados, $n_i^{\leq} \equiv \min[n(p_i), n(p'_i)]$ y $n_i^{\geq} \equiv \max[n(p_i), n(p'_i)]$. Cuando $m = 0$, tenemos $L_n^{(0)}(x) = L_n(x)$ que son los polinomios de Laguerre.

Es importante dejar claro el contenido físico del estado de Hartree-Fock en la Ec.(6.9): representa un determinante de Slater de N_{ϕ} electrones, donde todos tienen el mismo valor de \hat{m} . Como los ángulos θ y φ no están fijos, nos proveen de parámetros para minimizar la energía. Es importante remarcar que en los resultados derivados hasta este punto hemos usado la expresión general para la función de onda $\psi_{p, k_y}(\mathbf{r})$ en la Ec.(6.5); solo en la Ec.(6.18) hemos usado la expresión particular dada por (6.3) para la función de onda de sub-banda $\lambda_{\xi}(z)$. En particular, la factorización en la Ec.(6.16) es válida mientras se pueda factorizar también la Ec.(6.5). El uso de otras aproximaciones para $\lambda_{\xi}(z)$ solo impactará en $v_{\xi(p'_1), \xi(p'_2), \xi(p_1), \xi(p_2)}^{\perp}(q)$, que como veremos más adelante solo llevaría a cambios cuantitativos en los resultados.

6.4. Anisotropía magnética

Los resultados de la sección anterior llevan naturalmente al concepto de anisotropía magnética en ferromagnetos bidimensionales. En nuestro caso de QHF, la Ec.(6.11) es fundamental y los posibles tipos de anisotropías magnéticas están incorporados en los coeficientes cuadráticos $U_{i,j}$. En esta sección obtendremos las expresiones generales para los coeficientes de anisotropía U_{ij} , incluyendo todos los posibles cruces entre niveles de Landau. Para calcular estos coeficientes usaremos la Ec.(6.14), Ec.(6.16) y la Tabla 6.1. Comenzaremos considerando el cruce de niveles de Landau que pertenecen a la misma sub-banda.

	1	x	y	z
1	$\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow = \downarrow\downarrow\downarrow\downarrow$ $= \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow = \downarrow\uparrow\downarrow\uparrow$	$\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow = \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$ $= \downarrow\uparrow\downarrow\uparrow = \downarrow\downarrow\downarrow\uparrow$	$\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow = -\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow$ $= \downarrow\uparrow\downarrow\uparrow = -\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow$ $(-i)$	$\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow = -\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow$ $= -\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow = \downarrow\uparrow\downarrow\uparrow$
x	$\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow = \downarrow\uparrow\uparrow\uparrow$ $= \uparrow\downarrow\downarrow\downarrow = \downarrow\downarrow\downarrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow = \downarrow\uparrow\uparrow\downarrow$ $= \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow = \downarrow\downarrow\uparrow\uparrow$	$\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow = -\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow$ $= -\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow = \downarrow\downarrow\uparrow\uparrow$ $(-i)$	$\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow = \downarrow\uparrow\uparrow\uparrow$ $= -\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow = -\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow$
y	$\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow = -\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow$ $= \uparrow\downarrow\downarrow\downarrow = -\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow$ $(-i)$	$\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow = -\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow$ $= \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow = -\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow$ $(-i)$	$\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow = \downarrow\uparrow\uparrow\downarrow$ $= -\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow = -\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow$	$\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow = -\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow$ $= -\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow = \downarrow\downarrow\downarrow\downarrow$ $(-i)$
z	$\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow = -\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow$ $= \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow = -\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow$	$\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow = \uparrow\downarrow\uparrow\uparrow$ $= -\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow = -\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow$	$\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow = -\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow$ $= -\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow = \downarrow\downarrow\downarrow\uparrow$ $(-i)$	$\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow = \downarrow\downarrow\downarrow\downarrow$ $= -\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow = -\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow$

Tabla 6.1: Cada elemento en la tabla define el coeficiente $4\alpha_{ij}^{p'_1, p'_2, p_1, p_2}$. Solo se muestran los cuatro índices de pseudo-espín como flechas hacia arriba y hacia abajo, estos deben ser multiplicados por $-i$ cuando se indique. Por ejemplo, para $i = j = z$, los únicos coeficientes distintos de cero son $\alpha_{zz}^{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow} = \alpha_{zz}^{\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow} = 1/4$ y $\alpha_{zz}^{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow} = \alpha_{zz}^{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow} = -1/4$. Los restantes 12 coeficientes (para este ejemplo) son nulos.

6.4.1. Cruce de niveles de Landau provenientes de la misma subbanda : $\xi(\downarrow) = \xi(\uparrow)$

En este caso solo se pueden alinear niveles de Landau con espín opuesto.¹ De la 6.19 vemos que se debe cumplir que $p'_1 = p_1 = \pm p$ y $p'_2 = p_2 = \pm p$. Esta condición se deriva de las deltas de Kronecker, que imponen la conservación del espín en el proceso de "scattering", mientras que las otras funciones delta, relacionadas con los números cuánticos orbitales se cumplen automáticamente: $n(p'_1) - n(p_1) = n(\pm p) - n(\pm p) = 0 = n(\pm p) - n(\pm p) = n(p'_2) - n(p_2)$. Finalmente obtenemos que

$$v_{p,p,p,p}^{\parallel}(q) = \frac{2\pi}{q} \left[L_{n(p)} \left(\frac{q^2}{2} \right) \right]^2, \quad (6.20)$$

$$v_{p,-p,p,-p}^{\parallel}(q) = \frac{2\pi}{q} L_{n(p)} \left(\frac{q^2}{2} \right) L_{n(-p)} \left(\frac{q^2}{2} \right), \quad (6.21)$$

mientras que para el resto de los casos $v_{p'_1, p'_2, p_1, p_2}^{\parallel}(q) = 0$. Usando ahora la Ec.(6.14) y la Tabla 6.1, es fácil llegar a la conclusión de que el único término de anisotropía distinto de cero es

$$U_{zz} = -\frac{1}{4} \int_0^{\infty} dq e^{-\frac{q^2}{2}} v_{\xi, \xi, \xi, \xi}^{\perp}(q) \left[L_{n(p)} \left(\frac{q^2}{2} \right) - L_{n(-p)} \left(\frac{q^2}{2} \right) \right]^2. \quad (6.22)$$

¹Esta alineación puede ser inducida por la energía de intercambio, que en general es distinta para ambos niveles.

Si los dos LLs tienen el mismo número cuántico orbital ($n(p) = n(-p)$), entonces $U_{zz} = 0$ y el estado ferromagnético en el cruce es isotrópico. Un ejemplo de esta situación es cuando $\nu = 1$ con $\xi(\downarrow) = \xi(\uparrow) = -1, n(\downarrow) = n(\uparrow) = 0, \sigma(\downarrow) \neq \sigma(\uparrow)$. Por otra parte, ya que $v_{\xi,\xi,\xi,\xi}^{\perp}(q) > 0$, para $n(\uparrow) \neq n(\downarrow)$ la Ec.(6.22) implica que $U_{zz} < 0$ y el sistema presenta una anisotropía con el eje z como easy-axis ($m_z = \pm 1$). Este es el caso, por ejemplo, del cruce a $\nu = 2$, donde $\xi(\downarrow) = \xi(\uparrow) = -1, n(\downarrow) = 0, n(\uparrow) = 1, \sigma(\downarrow) = -\frac{1}{2}, \sigma(\uparrow) = \frac{1}{2}$. En este caso, la única diferencia respecto al caso bicapa es el factor $v_{\xi,\xi,\xi,\xi}^{\perp}(q)$, que sin embargo en ambas situaciones es positivo.²

6.4.2. Cruce de niveles de Landau provenientes de distintas sub-bandas: $\xi(\downarrow) \neq \xi(\uparrow)$

Analizaremos ahora el cruce entre LLs pertenecientes a distintas sub-bandas. En este caso, tenemos varias posibilidades:

Espín y número cuántico orbital iguales: $\sigma(\downarrow) = \sigma(\uparrow), n(\downarrow) = n(\uparrow)$

En esta situación se satisfacen las tres condiciones impuestas por las deltas de Kronecker en la Ec.(6.19), entonces

$$v_{p'_1, p'_2, p_1, p_2}^{\parallel}(q) = \frac{2\pi}{q} \left[L_n \left(\frac{q^2}{2} \right) \right]^2, \quad (6.23)$$

para todos las posibles elecciones de los cuatro índices de pseudo-espín. Usando nuevamente la Ec.(6.14) y la Tabla 6.1, obtenemos cuatro términos de anisotropía distintos de cero,

²Note que $v_{\xi,\xi,\xi,\xi}^{\perp}(q) > 0$ siempre, más allá de la aproximación 2D estricta para la función de onda de sub-banda $\lambda_{\xi}(z)$.

$$U_{zz} = \frac{d}{2l_B} \left[(a_{\xi(\uparrow)}^2 - a_{\xi(\downarrow)}^2)^2 + (c_{\xi(\uparrow)}^2 - c_{\xi(\downarrow)}^2)^2 \right] - \frac{1}{4} \int_0^\infty dq e^{-\frac{q^2}{2}} \left[L_n \left(\frac{q^2}{2} \right) \right]^2 \\ \times (v_{\xi(\uparrow),\xi(\uparrow)\xi(\uparrow)\xi(\uparrow)}^\perp + v_{\xi(\downarrow),\xi(\downarrow)\xi(\downarrow)\xi(\downarrow)}^\perp - 2v_{\xi(\uparrow),\xi(\downarrow)\xi(\uparrow)\xi(\downarrow)}^\perp) \quad (6.24)$$

$$U_{xx} = \frac{2d}{l_B} (a_{\xi(\uparrow)}^2 a_{\xi(\downarrow)}^2 + c_{\xi(\uparrow)}^2 c_{\xi(\downarrow)}^2) - \int_0^\infty dq e^{-\frac{q^2}{2}} \left[L_n \left(\frac{q^2}{2} \right) \right]^2 v_{\xi(\uparrow),\xi(\downarrow),\xi(\uparrow),\xi(\downarrow)}^\perp(q), \quad (6.25)$$

$$U_{xz} = \frac{d}{2l_B} [a_{\xi(\uparrow)} a_{\xi(\downarrow)} (a_{\xi(\uparrow)}^2 - a_{\xi(\downarrow)}^2) + b_{\xi(\uparrow)} b_{\xi(\downarrow)} (b_{\xi(\uparrow)}^2 - b_{\xi(\downarrow)}^2) + c_{\xi(\uparrow)} c_{\xi(\downarrow)} (c_{\xi(\uparrow)}^2 - c_{\xi(\downarrow)}^2)] \\ - \frac{1}{2} \int_0^\infty dq e^{-\frac{q^2}{2}} \left[L_n \left(\frac{q^2}{2} \right) \right]^2 (v_{\xi(\uparrow),\xi(\uparrow),\xi(\uparrow),\xi(\downarrow)}^\perp(q) - v_{\xi(\downarrow),\xi(\downarrow),\xi(\downarrow),\xi(\uparrow)}^\perp(q)), \quad (6.26)$$

$$U_{zx} = U_{xz}. \quad (6.27)$$

En este caso, la contribución cuadrática en la Ec.(6.11) se reduce a

$$\sum_{i,j=x,y,z} U_{i,j} m_i m_j = U_{xx} m_x^2 + 2U_{xz} m_x m_z + U_{zz} m_z^2. \quad (6.28)$$

Esta última ecuación puede ser minimizada bajo la condición $m_x^2 + m_y^2 + m_z^2 = 1$, usando multiplicadores de Lagrange. Si se cumple que a) $U_{xz}^2 - U_{xx} U_{zz} \leq 0$ y b) $U_{xx}, U_{zz} > 0$, el sistema tendrá un mínimo cuando c) $U_{xx} m_x + U_{xz} m_z = 0$ y d) $U_{zz} m_z + U_{xz} m_x = 0$. Dado que las condiciones c) y d) definen cada una un plano en el espacio m_x, m_y, m_z , estas se satisfacen simultáneamente solo en la línea de intersección entre ambos planos, que es justamente el eje m_y . Suponiendo que se cumplen las restantes condiciones, el sistema presentará en este caso una anisotropía con el eje y como easy-axis: $m_x = m_z = 0, m_y = \pm 1$. La aparición de este tipo de anisotropía, con el eje y como easy-axis, es nueva respecto a los resultados previos en sistemas bicapa. En este caso tenemos dos estados degenerados que son combinaciones lineales fijas ($\theta = \pi/2, \varphi = \pm\pi/2$) de los estados de pseudo-espín up y down.

El caso $U_{xz}^2 = U_{xx} U_{zz}$ es particular, ya que la Ec.(6.28) se puede simplificar a

$$\sum_{i,j=x,y,z} U_{i,j} m_i m_j = \left(\sqrt{U_{xx}} m_x + \sqrt{U_{zz}} m_z \right)^2, \quad (6.29)$$

cuyo mínimo está dado por la ecuación $\sqrt{U_{xx}} m_x + \sqrt{U_{zz}} m_z = 0$. Esta ecuación define un plano, por lo que el sistema presenta una anisotropía easy-plane. Geométricamente, este caso se produce cuando los dos planos del caso anterior se alinean formando un único plano. Hemos chequeado numéricamente que siempre se cumplen las condiciones a) y b), por lo que el sistema en este caso ($\sigma(\downarrow) = \sigma(\uparrow), n(\downarrow) = n(\uparrow)$)

manifestará una anisotropía tipo easy-axis o easy-plane.

Número cuántico orbital igual y espín diferente: $n(\downarrow) = n(\uparrow), \sigma(\downarrow) \neq \sigma(\uparrow)$

Cuando el cruce es entre niveles de Landau con igual número cuántico orbital y espín diferente tenemos, siguiendo los mismos argumentos que en el cruce entre niveles de la misma sub-banda, que la única componente de anisotropía distinta de cero es U_{zz} , con el mismo valor que en la Ec.(6.24). U_{zz} es siempre no-negativa, por lo que tendremos una anisotropía tipo easy-plane cuando $U_{zz} > 0$. Cuando $U_{zz} = 0$, el estado es isotrópico, ya que todas las direcciones del pseudo-espín son equivalentes.

Espín igual y número cuántico orbital diferente: $\sigma(\downarrow) = \sigma(\uparrow), n(\downarrow) \neq n(\uparrow)$

Aplicando una vez más la Ec.(6.19) y conociendo que los niveles que se cruzan tienen el mismo espín, las deltas de Kronecker para los espines se satisfacen automáticamente. Teniendo en cuenta la condición para los números cuánticos orbitales, obtenemos que solamente los factores $v_{p,p,p,p}^{\parallel}(q)$, $v_{p,-p,p,-p}^{\parallel}(q)$ y $v_{p,-p,-p,p}^{\parallel}(q)$ son diferentes de cero. Anteriormente habíamos encontrado las expresiones para los dos primeros, mientras que el tercero queda de la forma

$$v_{p,-p,-p,p}^{\parallel}(q) = \frac{2\pi}{q} \frac{n_{<}!}{n_{>}!} \left(\frac{q^2}{2}\right)^{n_{>}-n_{<}} \left[L_{n_{<}}^{n_{>}-n_{<}} \left(\frac{q^2}{2}\right) \right]^2. \quad (6.30)$$

De la Ec.(6.14) y la Ec.(6.1), tenemos únicamente tres términos cuadráticos distintos de cero:

$$\begin{aligned} U_{zz} = & \frac{d}{2l_B} \left[(a_{\xi(\uparrow)}^2 - a_{\xi(\downarrow)}^2)^2 + (c_{\xi(\uparrow)}^2 - c_{\xi(\downarrow)}^2)^2 \right] \\ & - \frac{1}{4} \int_0^\infty dq e^{-\frac{q^2}{2}} \left\{ \left[L_{n(\uparrow)} \left(\frac{q^2}{2}\right) \right]^2 v_{\xi(\uparrow),\xi(\uparrow),\xi(\uparrow),\xi(\uparrow)}^\perp(q) \right. \\ & \left. + \left[L_{n(\downarrow)} \left(\frac{q^2}{2}\right) \right]^2 v_{\xi(\downarrow),\xi(\downarrow),\xi(\downarrow),\xi(\downarrow)}^\perp(q) 2L_{n(\downarrow)} \left(\frac{q^2}{2}\right) L_{n(\uparrow)} \left(\frac{q^2}{2}\right) v_{\xi(\uparrow),\xi(\downarrow),\xi(\uparrow),\xi(\downarrow)}^\perp(q) \right\}, \end{aligned} \quad (6.31)$$

$$U_{xx} = U_{yy} = -\frac{1}{2} \frac{n_{<}!}{n_{>}!} \int_0^\infty dq e^{-\frac{q^2}{2}} \left(\frac{q^2}{2}\right)^{n_{>}-n_{<}} \left[L_{n_{<}}^{n_{>}-n_{<}} \left(\frac{q^2}{2}\right) \right]^2 v_{\xi(\uparrow),\xi(\downarrow),\xi(\downarrow),\xi(\uparrow)}^\perp(q). \quad (6.32)$$

Usando $m_x^2 + m_y^2 = 1 - m_z^2$, la contribución cuadrática a la energía queda de la

forma

$$\sum_{i,j=x,y,z} U_{i,j} m_i m_j = (U_{zz} - U_{xx}) m_z^2 + U_{xx} . \quad (6.33)$$

Si $U_{zz} - U_{xx} < 0$ el sistema presenta anisotropía easy-axis mientras que para $U_{zz} - U_{xx} > 0$ tendrá anisotropía tipo easy-plane. La condición $U_{zz} = U_{xx}$ define la frontera entre los dos posibles cruces. En la siguiente sección haremos un estudio numérico de este caso, ya que corresponde a $\nu = 3$, relevante desde el punto de vista experimental.

Número cuántico orbital y espín diferentes: $n(\downarrow) \neq n(\uparrow), \sigma(\downarrow) \neq \sigma(\uparrow)$

Para $n(\uparrow) \neq n(\downarrow)$ y $\sigma(\uparrow) \neq \sigma(\downarrow)$, la única diferencia con el caso anterior es que $v_{p,-p,-p,p}^{\parallel}(q) = 0$. El único termino cuadrático distinto de cero es U_{zz} y viene dado por la Ec.(6.31). Analizando el signo de U_{zz} se determina el tipo de anisotropía: $U_{zz} > 0$ representa anisotropía tipo easy-plane, $U_{zz} < 0$ representa anisotropía con el eje z como easy-axis, mientras que $U_{zz} = 0$ corresponde al caso isotrópico. Este tipo de cruce es el que se manifiesta a $\nu = 4$, y en la siguiente sección haremos un estudio detallado de este caso debido a su relevancia experimental.

6.4.3. Resultados numéricos para el caso general

Para valores arbitrarios de $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$ y t , los autovalores y autovectores de la Ec.(6.4) deben ser obtenidos numéricamente. Esto implica que las funciones de onda de sub-banda en la Ec.(6.3) también tienen que ser manipuladas numéricamente. Un caso particular con solución analítica para la Ec.(6.4) es cuando no hay campo eléctrico aplicado sobre el sistema (cero bias), puesto que entonces $\varepsilon_1 = \varepsilon_3$. Analicemos primeramente este caso, considerando que es una situación experimental estándar.

Sistema a cero bias: $\varepsilon_1 = \varepsilon_3 = 0$

Para las energías de sub-banda (autovalores) γ_{ξ} , tenemos $\gamma_0 = 0$ y

$$\gamma_{\pm 1} = \frac{1}{2} \left\{ \varepsilon_2^* \pm [(\varepsilon_2^*)^2 + 8]^{1/2} \right\} , \quad (6.34)$$

con $\varepsilon_i^* = \varepsilon_i/t$. Los autovectores asociados normalizados son

$$a_{-1} = c_{-1} = \frac{1}{(\gamma_{-1}^2 + 2)^{1/2}} , \quad b_{-1} = \frac{\gamma_{-1}}{(\gamma_{-1}^2 + 2)^{1/2}} , \quad (6.35)$$

para $\xi = -1$ (estado fundamental de sub-banda),

$$a_0 = -c_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad b_0 = 0, \quad (6.36)$$

para $\xi = 0$ (primer estado excitado de sub-banda), y

$$a_1 = -c_1 = \frac{1}{(\gamma_1^2 + 2)^{1/2}}, \quad b_1 = -\frac{\gamma_1}{(\gamma_1^2 + 2)^{1/2}}, \quad (6.37)$$

para el último estado excitado ($\xi = 1$).

Usando estas expresiones, podemos evaluar analíticamente el potencial de sub-banda $v_{\xi(p'_1), \xi(p'_2), \xi(p_1), \xi(p_2)}^\perp(q)$ en la Ec.(6.18). A modo de ejemplo, mostramos en la Fig. 6.2(a) el diagrama de fases de anisotropías magnéticas a $\nu = 3$, correspondiente al cruce entre los niveles con números cuánticos $\xi(\downarrow) = -1, n(\downarrow) = 1, \sigma(\downarrow) = +\frac{1}{2}$ y $\xi(\uparrow) = 0, n(\uparrow) = 0, \sigma(\uparrow) = +\frac{1}{2}$, como se muestra esquemáticamente en el inset.

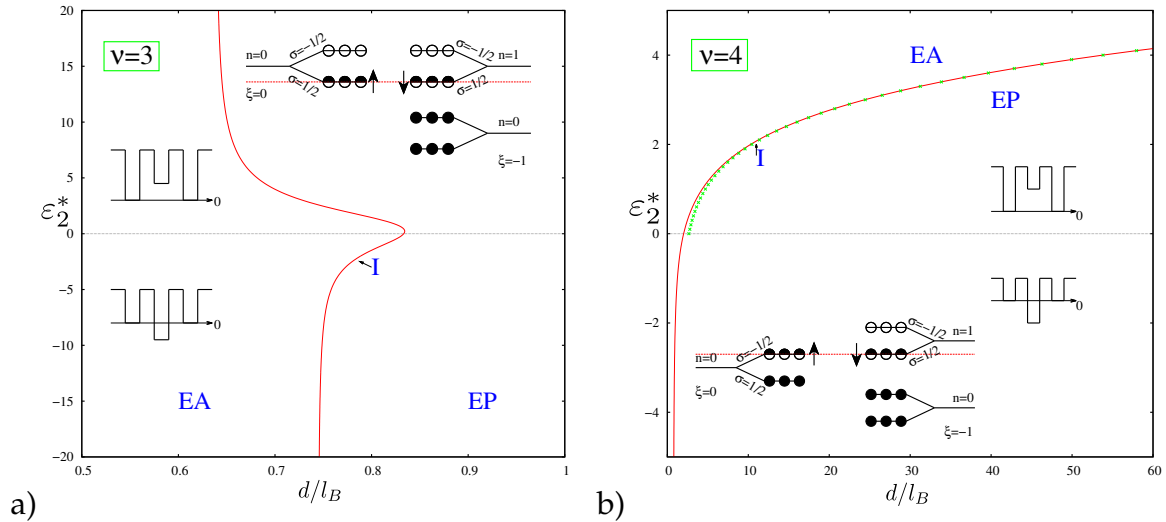


Figura 6.2: Diagrama de fases de anisotropía magnética para: (a) $\nu = 3$, (b) $\nu = 4$, en el plano $\varepsilon_2^* - d/l_B$. La línea isotrópica (I) separa la región easy-axis (EA) a la izquierda de la región easy-plane (EP) a la derecha. Inset: vista esquemática del cruce de los niveles de Landau. μ representa el potencial químico. Los símbolos \uparrow, \downarrow representan los dos estados de pseudo-espín. Los puntos verdes en (b) corresponden a la aproximación analítica dada por la 6.39, válida para $d/l_B \gg 1$.

Como se discutió anteriormente en la Ec.(6.33), el balance energético indica que el sistema presenta anisotropía EA (EP) si $U_{zz} < (>) U_{xx}$, con U_{zz} y U_{xx} dados por las Ecs. (6.31) y (6.32), respectivamente, particularizada en el caso $\xi(\downarrow) = -1, \xi(\uparrow) = 0, n(\downarrow) = 1, n(\uparrow) = 0$. El diagrama de fase resultante puede ser entendido como una competencia entre la energía de Hartree presente en el primer término de U_{zz} y la contribución de intercambio contenida en el segundo término de U_{zz} y en U_{xx} . Cuando el bias es cero (como en el caso presente), la contribución de Hartree, correspondiente al primer término en la Ec.(6.31), puede ser evaluada analíticamente,

$$\begin{aligned}
U_{zz}^H &= \frac{d}{2l_B} \left[(a_0^2 - a_{-1}^2)^2 + (c_0^2 - c_{-1}^2)^2 \right], \\
&= \frac{d}{8l_B} \left(1 - \frac{4}{(\varepsilon_2^*)^2 + 8} - \frac{\varepsilon_2^*}{\sqrt{(\varepsilon_2^*)^2 + 8}} \right). \tag{6.38}
\end{aligned}$$

Como función de ε_2^* , esta contribución alcanza su máximo valor $d/4l_B$ para valores negativos de ε_2^* , mientras que tiende a cero para $\varepsilon_2^* \gg 1$; siendo siempre positivo, es quien estabiliza la configuración con anisotropía EP. Esto explica porqué para valores suficientemente grandes de d/l_B , la anisotropía EP domina el diagrama de fases. Por el contrario, para valores pequeños de d/l_B , el balance energético es dominado por la contribución de intercambio, que induce anisotropía tipo EA en la región izquierda del diagrama de fases. Para valores grandes de ε_2^* , el sistema se mueve gradualmente a una región donde se comporta efectivamente como un sistema bicapa y recuperamos el valor crítico para d/l_B encontrado en la referencia [79] a cero bias, después de considerar que en nuestro caso la distancia entre las láminas ocupadas es $2d$.

La gran estabilidad de la anisotropía EA para $\varepsilon_2^* \sim 0$ puede ser entendida como sigue. Si separamos U_{zz} dado por la Ec.(6.31) en las contribuciones de Hartree (U_{zz}^H) e intercambio (U_{zz}^X),³ la condición $U_{zz} < U_{xx}$ se reescribe como $U_{zz}^H - U_{xx} < -U_{zz}^X$, los signos aquí son $U_{zz}^H, -U_{zz}^X, -U_{xx} > 0$. Por otro lado, aumentando ε_2^* , $U_{zz}^H(-U_{xx})$ decrece (crece) de forma monótona, mientras $-U_{zz}^X$ muestra decrecimiento leve, con un pequeño mínimo cerca de $\varepsilon_2^* \sim 0$. Lo importante aquí es que $U_{zz}^H - U_{xx}$ tiene un mínimo cuando $\varepsilon_2^* \sim 0$, lo que explica el comportamiento reentrante en el diagrama de fase de la Fig. 6.2(a).

En la Fig. 6.2(b) se muestra el diagrama de fases de anisotropía magnética para $\nu = 4$. En este caso los dos LLs que se cruzan tiene números cuánticos $\xi(\downarrow) = -1, n(\downarrow) = 1, \sigma(\downarrow) = +\frac{1}{2}$ y $\xi(\uparrow) = 0, n(\uparrow) = 0, \sigma(\uparrow) = -\frac{1}{2}$, como se muestra en el inset. Siendo diferentes los espines, el balance energético dice que cuando $U_{zz} < (>) 0$ el sistema estará en una situación EA (EP). Una vez más la estabilidad de la fase EP es inducida por el término de Hartree (6.38). Aumentando d , la región EP crece a expensas de la región EA. Para valores suficientemente grandes de d/l_B , la frontera entre las fases EA e EP, correspondiente a la condición de anisotropía $U_{zz} = 0$ o $U_{zz}^H = -U_{zz}^X$, puede ser obtenida analíticamente.

³Para esto recordemos que en la Ec.(6.14) para $U_{i,j}$ el primer término (independiente de q) se origina de la interacción de Hartree, mientras que el segundo término (dependiente de q) proviene de la interacción de intercambio.

$$d(\varepsilon_2^*)/l_B = \frac{\sqrt{\frac{\pi}{2}}}{8} \frac{\left(13 - \frac{36}{8+(\varepsilon_2^*)^2} - \frac{7\varepsilon_2^*}{\sqrt{8+(\varepsilon_2^*)^2}}\right)}{\left(1 - \frac{4}{8+(\varepsilon_2^*)^2} - \frac{\varepsilon_2^*}{\sqrt{8+(\varepsilon_2^*)^2}}\right)}. \quad (6.39)$$

Esta ecuación es un ejemplo explícito del delicado ajuste en los parámetros necesarios para estabilizar la fase isotrópica. Para valores suficientemente grandes de ε_2^* , recuperamos nuevamente el límite del sistema bicapa a bias cero de la referencia [79], donde $d(\varepsilon_2^*)$ diverge y el sistema muestra una anisotropía EA para todos los valores de d/l_B .

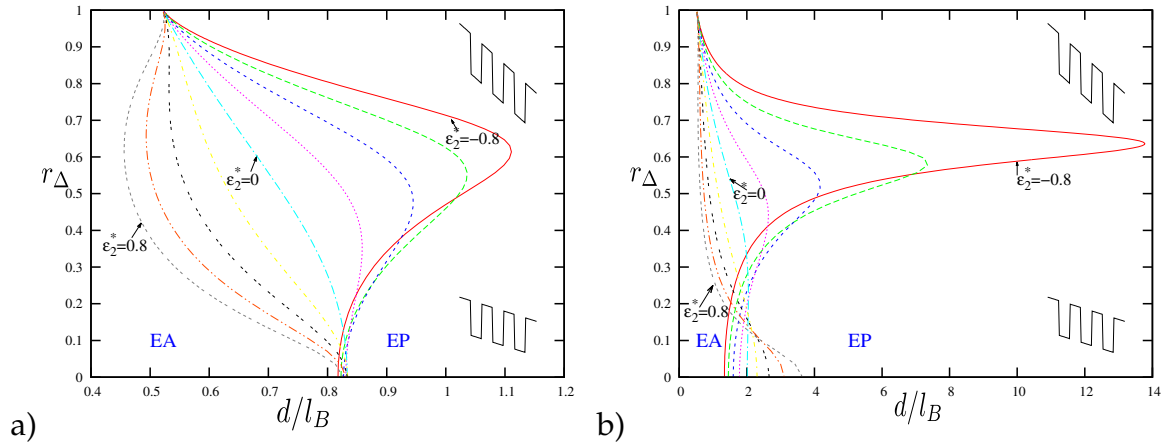


Figura 6.3: Diagrama de fases de anisotropía para: (a) $\nu = 3$, (b) $\nu = 4$, en el plano r_Δ - d/l_B , para algunos valores de ε_2^* . De izquierda a derecha, $\varepsilon_2^* = 0.8, 0.6, 0.4, 0.2, 0, -0.2, -0.4, -0.6, -0.8$. Los dos insets muestran esquemáticamente el sistema tricapa a bias pequeño ($r_\Delta \sim 0$) y grande ($r_\Delta \sim 1$).

Sistema con bias aplicado

Mientras el caso donde $\varepsilon_1^* + \varepsilon_3^* = 0$, $\varepsilon_2^* = 0$ también permite una diagonalización analítica de la matriz (6.4) en presencia de bias, para entender un poco mejor las posibles anisotropías hemos resuelto numéricamente el caso $\varepsilon_1^* = -\varepsilon_3^* = \Delta$ para valores arbitrarios de ε_2^* . $\Delta \neq 0$ significa que el sistema tiene un bias aplicado de valor 2Δ (vea Fig. 6.1). Los resultados correspondientes se muestran en la Fig. 6.3.

Para la discusión del sistema tricapa con bias hemos introducido un nuevo parámetro adimensional r_Δ , definido como

$$r_\Delta = \frac{\Delta^*}{\sqrt{(\Delta^*)^2 + 2}}, \quad (6.40)$$

con $\Delta^* = \Delta/t$. $r_\Delta = 0$ cuando el bias es cero, mientras que $r_\Delta \rightarrow \pm 1$ cuando $|\Delta^*| \gg 1$.

El diagrama de fases para $\nu = 3$ está dado en la Fig. 6.3(a). Como antes, para valores suficientemente grandes de d/l_B , el aumento de la energía de Hartree estabiliza la fase EP. Por otra parte, para valores pequeños de d/l_B , el término de intercambio en U_{xx} estabiliza la fase EA. Es interesante que la frontera entre ambas fases muestra un comportamiento no trivial como función de ε_2^* . En particular, para $\varepsilon_2^* < 0$ (la situación común en muestras reales) y $d/l_B \sim 1$, el sistema muestra anisotropía tipo EP a bias pequeños, luego entra en un régimen EA aumentando el bias y finalmente vuelve a tener anisotropía EP aumentando aún más el bias. Una situación similar, aunque menos pronunciada se observa para $\varepsilon_2^* > 0$. Se puede ver que U_{zz}^H , para $\varepsilon_2^* < 0$ presenta un mínimo para valores intermedios de r_Δ , que se convierte cada vez más profundo a medida que ε_2^* se hace más negativo.

En la Fig. 6.3(b) se muestra el diagrama de fases para $\nu = 4$. Se observa el mismo comportamiento reentrante que en el caso a $\nu = 3$, pero más pronunciado aún: para valores intermedios de r_Δ , el sistema muestra anisotropía EA para valores grandes de d/l_B , y también para valores negativos de ε_2^* como en la Fig. 6.3(a). La física es la misma que en el caso anterior: $U_{zz}^H(r_\Delta)$ tiene un mínimo en algún $r_\Delta \neq 0$ y estabiliza la anisotropía EA. Sin embargo, dado que para $\nu = 4$ solo importa el signo de U_{zz} , el impacto de este comportamiento no monótono de $U_{zz}^H(r_\Delta)$ tiene más impacto en la estabilidad de la anisotropía EA que para el caso $\nu = 3$.

Tomando el límite apropiado, nuestro sistema tricapa se puede reducir al sistema bicapa, esto se muestra explícitamente en la Fig. 6.4. Para hacer la comparación más directa hemos cambiado el parámetro r_Δ por

$$r_\Delta^B = \frac{\Delta^B}{\sqrt{(\Delta^B)^2 + 4}}, \quad (6.41)$$

donde $\Delta^B = \Delta^* + \varepsilon_2^*$. La idea aquí es que Δ^B puede ser pequeño, incluso en el límite $\Delta^*, -\varepsilon_2^* \gg 1$. En este límite una de las láminas estará vacía (ya que tendrá una energía $\Delta^* \gg 1$), mientras que las otras dos láminas estarán más o menos igualmente ocupadas, si ambas tienen energías similares. De esta manera recreamos la física de los sistemas bicapa a partir del modelo tricapa, en el límite de bias grande.

La evolución tricapa \rightarrow bicapa es fácil de seguir en el caso $\nu = 3$. En particular, se ve bastante claro como la frontera entre las anisotropías EA y EP se mueven desde valores para el sistema tricapa tales que $d/l_B < 1$ al valor del sistema bicapa $d/l_B \simeq 1.25$, a medida que ε_2^* se hace negativo.

En el caso $\nu = 4$, la evolución tricapa \rightarrow bicapa no es tan directa. La región donde hay comportamiento reentrante mostrada en la Fig. 6.3(b) se extiende a valores muy grandes de d/l_B , si ε_2^* es suficientemente negativo. Esto se observa en la Fig. 6.3(b) y aún más en la Fig. 6.4, para los casos $\varepsilon_2^* = -10$ y $\varepsilon_2^* = -80$, para los cuales el punto de retorno en el comportamiento reentrante se va más allá de $d/l_B = 5$.

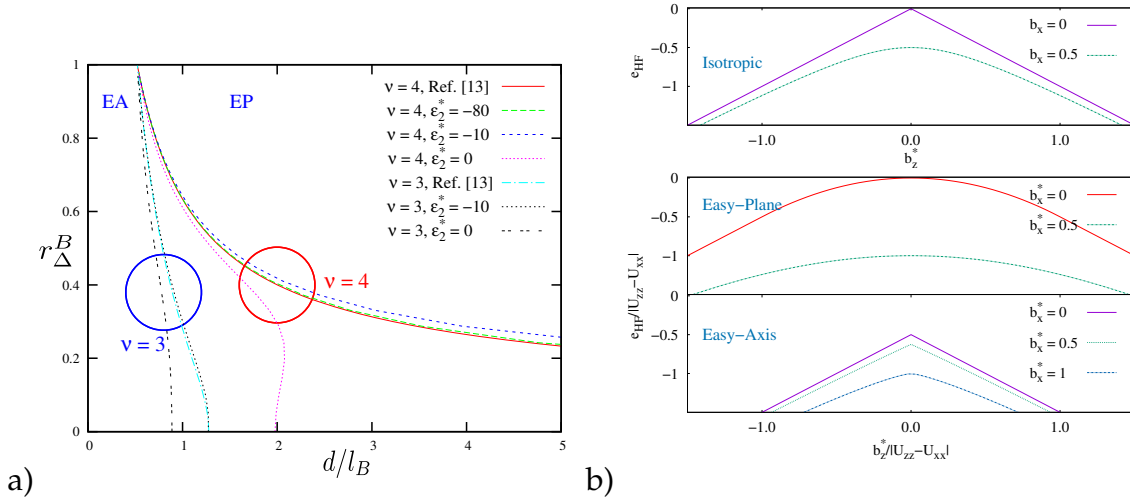


Figura 6.4: a) Límite bicapa para el modelo tricapa, cuando $\nu = 3$ y $\nu = 4$. Note que el eje y (r_{Δ}^B) no es el mismo que en las dos figuras anteriores (r_{Δ}). b) Energía de Hartree-Fock como función de el campo de pseudo-espín b_z^* : panel superior, caso isotrópico; panel intermedio, caso easy-plane; panel inferior, caso easy-axis.

6.5. Términos de una partícula

En la sección anterior hemos analizado el cruce entre dos LLs suponiendo la ausencia de términos lineales en la Ec.(6.11). En el caso general algunos términos lineales estarán presentes por lo que se modifica el esquema de minimización simple de la sección anterior. En esta sección mostraremos la influencia de estos términos de una partícula en los casos donde $\nu = 3$ y $\nu = 4$.

Cuando $\nu = 3$, el cruce es entre niveles de Landau provenientes de distintas sub-bandas, con número cuántico orbital diferente e igual espín. Podemos seleccionar el estado $\xi = 0, n = 0, \sigma = 1/2$ como pseudo-espín up y $\xi = -1, n = 1, \sigma = 1/2$ como pseudo-espín down (vea Inset en Fig. 6.2(a)). Entonces podemos escribir los términos lineales en la Ec.(6.11) como

$$b_z = -\frac{1}{2} (\gamma_0 - \gamma_{-1} - \hbar\omega_c + \Delta_z^H + \Delta_z^X) , \quad (6.42)$$

$$b_x = \frac{1}{2} \Delta_x^H , \quad (6.43)$$

y $b_y = 0$. $\gamma_0 - \gamma_{-1} > 0$ es la diferencia entre las energías de sub-banda y Δ_z^X es la diferencia entre las energías de intercambio de los estados pseudo-espín up y down con los electrones en los niveles de menor energía (totalmente llenos), en este caso con el nivel $\xi = -1, n = 0, \sigma = 1/2$. Para calcular esta energía de intercambio podemos usar (6.21) y (6.23), obteniendo

$$\Delta_z^X = \int_0^\infty dq e^{-\frac{q^2}{2}} \left[\frac{q^2}{2} v_{-1,-1,-1,-1}^\perp(q) - v_{0,-1,-1,0}^\perp(q) \right]. \quad (6.44)$$

Siguiendo una idea similar, la diferencia de energía electrostática (Hartree) entre láminas causada por los electrones en los niveles de menor energía ($\xi = -1, n = 0, \sigma = \pm 1/2$) son $V_{12} = (2d/l_B)(a_{-1}^2 - b_{-1}^2 - c_{-1}^2)$, $V_{23} = (2d/l_B)(a_{-1}^2 + b_{-1}^2 - c_{-1}^2)$ y $V_{13} = V_{12} + V_{23} = (4d/l_B)(a_{-1}^2 - c_{-1}^2)$. Esta diferencia de energía electrostática puede ser incluida como un bias efectivo (Δ_z^H) y un hopping efectivo (Δ_x^H) que actúan sobre los estados con pseudo-espín up y down. La expresión resultante para estas contribuciones de Hartree son

$$\Delta_x^H = \frac{8d}{l_B} [a_0 a_{-1}(c_{-1}^2 - a_{-1}^2) - b_0 b_{-1}(a_{-1}^2 + b_{-1}^2 - c_{-1}^2)/2], \quad (6.45)$$

y

$$\Delta_z^H = \frac{4d}{l_B} [(a_0^2 - a_{-1}^2)(c_{-1}^2 - a_{-1}^2) - (b_0^2 - b_{-1}^2)(a_{-1}^2 + b_{-1}^2 - c_{-1}^2)/2]. \quad (6.46)$$

Es importante notar que Δ_x^H es cero en los límites de hopping y bias cero. En el caso $t = 0$, esto pasa ya que en este límite las sub-bandas y las láminas son equivalentes, entonces productos como $a_0 a_{-1}$ y $b_0 b_{-1}$ son cero. Cuando el bias es cero, $a_{-1}^2 = c_{-1}^2$ y $b_0 = 0$, por lo que Δ_x^H es cero. Sin embargo, en general este parámetro de hopping efectivo será distinto de cero, aunque se puede hacer pequeño aumentando la distancia entre láminas [64]. Por su parte, el término Δ_z^H , que es finito incluso en el caso de bias cero, es una función par del bias y alcanza su mínimo valor cuando hay una sola lámina mayormente ocupada (por ejemplo, cuando $\varepsilon_2^* < 0$ o en el límite de bias grande).

La Ec.(6.11) para la energía también incluye contribuciones a los términos lineales que vienen de la interacción de Coulomb entre los electrones en los dos LLs que se cruzan. Cuando $\nu = 3$ solo $U_{1,z}$ y $U_{z,1}$ son distintos de cero:

$$U_{1,z} = U_{z,1} = -\frac{1}{4} \int_0^\infty dq e^{-\frac{q^2}{2}} \left[v_{0,0,0,0}^\perp(q) - v_{-1,-1,-1,-1}^\perp(q) \left(1 - q^2 + \frac{q^4}{4} \right) \right]. \quad (6.47)$$

Entonces, la energía por electrón (6.11) cuando $\nu = 3$ puede ser escrita sin incluir los términos constantes en la forma:

$$e_{HF}(\hat{m}) = -b_x m_x - b_z^* m_z + \frac{1}{2} (U_{zz} - U_{xx}) m_z^2, \quad (6.48)$$

donde $b_z^* = b_z - U_{1,z}$.

El comportamiento de la energía de HF alrededor de un campo de pseudo-espín

perfectamente alineado, $b_z^* = 0$, depende del tipo de anisotropía. En la Fig. 6.4(b) mostramos este comportamiento para los diferentes tipos de anisotropía. El panel superior corresponde al caso isotrópico $U_{xx} = U_{zz}$. La Ec.(6.48) queda $e_{HF}(\hat{m}) = -b_x m_x - b_z^* m_z$ y la minimización con respecto a m_x y m_z se puede hacer analíticamente, obteniendo $m_x^0 = \text{sign}(b_x) \sqrt{1/[1 + (b_z^*/b_x)^2]}$, $m_z^0 = \text{sign}(b_z^*) \sqrt{1/[1 + (b_x/b_z^*)^2]}$ y

$$e_{HF}(m_x^0, m_z^0) = -\frac{|b_x|}{\sqrt{1 + (b_z^*/b_x)^2}} - \frac{|b_z^*|}{\sqrt{1 + (b_x/b_z^*)^2}}. \quad (6.49)$$

En el límite $|b_z^*/b_x| \gg 1$, $e_{HF}(m_x^0, m_z^0) \rightarrow -|b_z^*|$, note que este límite incluye el caso $b_x = 0$. En el límite opuesto $|b_z^*/b_x| \ll 1$, la energía de HF tiene un comportamiento cuadrático con el campo de pseudo-espín b_z^* alrededor de la región de alineación perfecta, $e_{HF}(m_x^0, m_z^0) \rightarrow -|b_x| - |b_z^*|^2/(2|b_x|)$. Para cualquier valor $b_x \neq 0$, el pseudo-espín rota en el plano $x-z$, de acuerdo a la ecuación $\tan \theta = \text{sign}(b_x) \text{sign}(b_z^*) |b_x/b_z^*|^{1/2}$ y el cruce isotrópico lleva a una "transición" suave desde $m_z^0 \simeq -1$ a $m_z^0 \simeq +1$. Esta situación corresponde a un "colapso" de los LLs en el cruce.

El panel intermedio corresponde a la anisotropía EP ($U_{zz} - U_{xx} > 0$) y en este caso la energía siempre muestra un comportamiento cuadrático en b_z^* , alrededor del punto de máxima alineación. En el límite $b_z^* \rightarrow 0$, obtenemos

$$\frac{e_{HF}(m_x^0, m_z^0)}{U_{zz} - U_{xx}} = -b_x^* - \frac{[b_z^*/(U_{zz} - U_{xx})]^2}{2(1 + b_x^*)}, \quad (6.50)$$

con $b_x^* = b_x/|U_{zz} - U_{xx}|$. A medida que b_x^* aumenta, la curvatura disminuye como se observa en la figura.

Finalmente en el panel inferior se muestra el comportamiento de la energía de HF cuando tenemos anisotropía EA. Interesantemente, en este caso cuando b_x^* es menor que cierto valor crítico, la energía pasa de tener un comportamiento cuadrático en b_z^* a un comportamiento lineal. Una vez más en el límite de perfecto alineamiento $b_z^* \rightarrow 0$, $m_x^0 \rightarrow b_x^* - \varepsilon$ y $m_z^0 \rightarrow \pm \sqrt{1 - (b_x^*)^2}$. Reemplazando en la Ec.(6.48) se obtiene un comportamiento lineal en b_z^* , dado aproximadamente por $-b_z^* m_z^0 \sim -|b_z^*| \sqrt{1 - (b_x^*)^2}$. Al valor crítico $b_x^* = 1$, la energía pasa de una dependencia lineal en b_z^* a una cuadrática.

Cuando $\nu = 4$ el cruce es entre LLs de distintas sub-bandas, diferentes números cuánticos orbitales y diferentes espines. Eligiendo $\xi = 0, n = 0, \sigma = -1/2$ como pseudo-espín up y $\xi = -1, n = 1, \sigma = 1/2$ como pseudo-espín down (vea Inset en Fig. 6.2(b)), podemos obtener los términos de una partícula análogamente al caso donde $\nu = 3$. La única diferencia en este caso es que como los LLs tienen espín diferente aparece el término de Zeeman $|g|\mu_B B$ dentro del paréntesis de la Ec.(6.42). Teniendo esto en cuenta obtenemos un comportamiento similar al mostrado en la

Fig. 6.4(b) alrededor de $b_z^* = 0$, considerando en este caso que $U_{xx} = 0$.

En la Fig. 6.5 se muestra esquemáticamente la clasificación de las anisotropías obtenidas en este Capítulo. Las principales diferencias respecto al sistema bicapa están resaltadas.

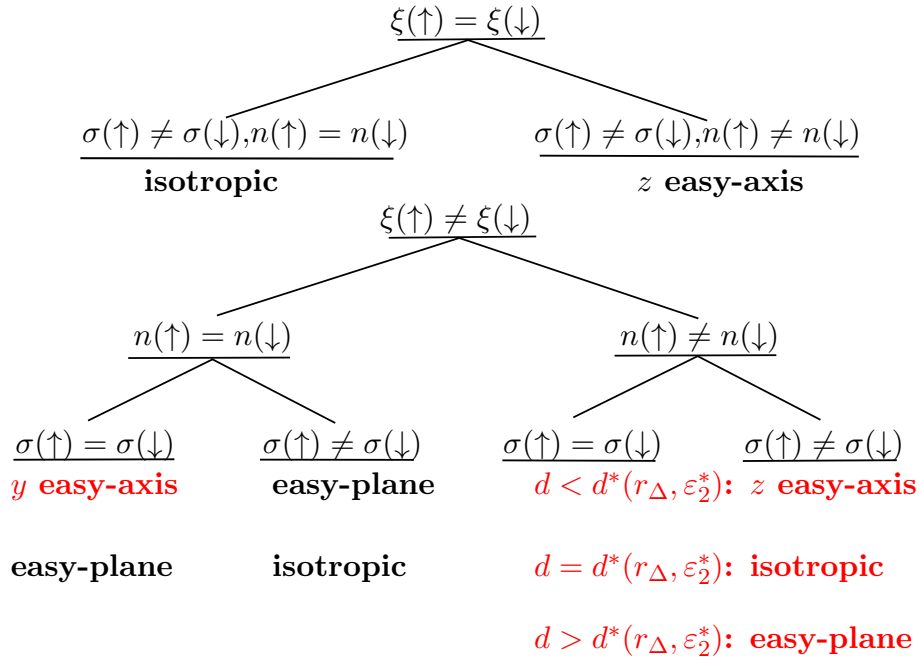


Figura 6.5: Clasificación general de las anisotropías magnéticas para los diferentes casos de cruce entre niveles de Landau. $d^*(r_\Delta, \varepsilon_2^*)$ denota la frontera entre las fases EA y EP en las figuras anteriores.

6.6. Conclusiones

Usando la aproximación de Hartree-Fock variacional, se han estudiado teóricamente todos los posibles cruces de niveles de Landau en la vecindad del potencial químico, para un sistema semiconductor tricapa, en el régimen del efecto Hall cuántico entero. El sistema fue modelado por tres gases estrictamente bidimensionales de electrones, acoplados a través del hopping entre los gases vecinos e interacción de Coulomb intra e inter-lámina entre los electrones del sistema. El sistema de tres láminas está bajo los efectos de un campo magnético perpendicular a los planos de estas y bajo los efectos de un bias externo que simula el efecto de las compuertas de potencial en los experimentos reales.

Hemos encontrado que el esquema de clasificación general encontrado para sistemas bicapa también puede ser extendido a sistemas tricapa, donde el simple cruce entre niveles corresponde a una anisotropía tipo easy-axis y el colapso entre niveles corresponde a una anisotropía easy-plane. Si bien nuestros resultados son válidos para cualquier factor de llenado ν ($=1,2,3,\dots$), hemos analizado en detalle los casos

donde $\nu = 3$ y 4 , donde hemos dado claras predicciones que pueden ayudar en la búsqueda experimental. Por ejemplo, hemos encontrado que aumentando el bias aplicado sobre el sistema, éste puede mostrar primero anisotropía tipo easy-plane, luego easy-axis y nuevamente easy-plane, tanto a $\nu = 3$ como a $\nu = 4$.

Dado que una de las principales técnicas usadas en sistemas bicapa para caracterizar los posibles tipos de anisotropías magnéticas ha sido la medición de la energía de activación en la región de cruce, aquí también hemos obtenido una energía de Hartree-Fock en la región de perfecta alineación entre los niveles, a $\nu = 3$ y $\nu = 4$. Mientras la energía de HF en los estados easy-plane siempre presenta un comportamiento cuadrático con el campo de pseudo-espín, los estados easy-axis tienen una dependencia lineal solo si la energía de Hartree que mezcla ambos pseudo-espines es menor que cierto valor. Por su parte, en los estados isotrópicos, la energía de Hartree puede tener un comportamiento lineal o cuadrático alrededor de la región de alineación, dependiendo del factor de llenado y de los números cuánticos de los niveles que se alinean.

Capítulo 7

Teoría de la funcional densidad e intercambio exacto en el efecto Hall cuántico

En este Capítulo, aprovechando las simplificaciones que brinda el régimen de solo una sub-banda ocupada, estudiamos el potencial de intercambio exacto para distintos valores del factor de llenado ν . En una primera parte del Capítulo nos concentramos en el sistema quasi-2D. Como caso particular estudiamos un pozo cuántico semiconductor cuya ocupación electrónica es regulada por dos láminas positivas (dopaje) en cada extremo del sistema. En la segunda parte obtenemos el potencial exacto para un sistema 2D estricto. Aprovechando la ventaja de este límite se obtienen expresiones analíticas más compactas. Además, se obtiene de manera analítica el potencial de intercambio para el gas homogéneo en el límite de campo cero. Los resultados presentados en este Capítulo fueron publicados en las referencias [57, 58].

7.1. Intercambio exacto para sistemas quasi-2D

El presente esquema de DFT- EE está formulado de modo que se pueda aplicar a cualquier sistema electrónico con simetría de traslación en el plano xy . En esta sección, desarrollamos los resultados para un q2DEG confinado en un pozo cuántico semiconductor con dopaje tipo delta y con un campo magnético B perpendicular al plano, como se muestra en la Fig. 7.1.

En el presente Capítulo aplicaremos la aproximación de intercambio exacto, suponiendo que los efectos de correlación son despreciables alrededor de los valores enteros de ν (IQHE), ya que los niveles de Landau llenos están en una situación de bloqueo del espacio de fases que impide la existencia de efectos de baja energía inducidos por correlación. En otras palabras, como el número de electrones en los LL

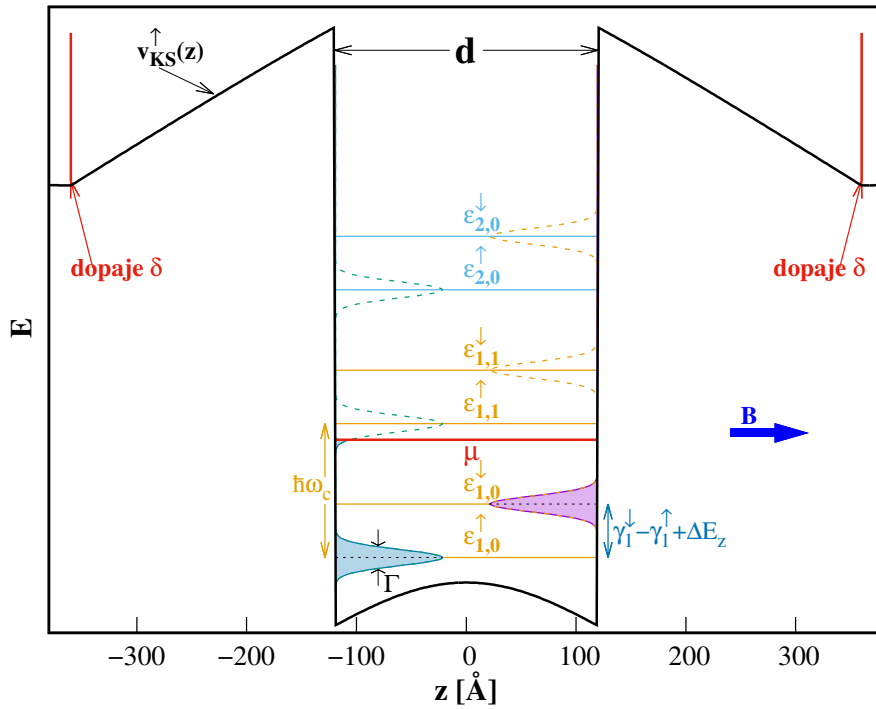


Figura 7.1: Vista esquemática del sistema q2DEG para un pozo cuántico de $GaAs$ con $d = 240$ Å, y dos láminas de dopajes tipo delta ubicadas en las barreras de $Al_xGa_{1-x}As$. $v_{KS}^\sigma(z)$ es el potencial auto-consistente de KS, $\epsilon_{i,n}^\sigma$ es la energía en el centro de un nivel de Landau ensanchando y ΔE_z es el desdoblamiento de Zeeman. Solo la sub-banda fundamental $i = 1$ está ocupada. μ es el potencial químico.

está cerca de su completa ocupación, solo unos pocos determinantes de Slater contribuirían a la función de onda, por lo que la energía de intercambio domina sobre los efectos de correlación

7.1.1. Resultados y discusión

Recordamos que en general la ecuación de KS debe ser resuelta numéricamente y autoconsistentemente: cada ν , $v_H(z)$ y $v_x^\sigma(z)$ determinan y son determinados por $\lambda_1^\sigma(z)$ y γ_1^σ , lo que nos lleva a un ciclo auto-consistente. Para las simulaciones numéricas usamos los siguientes parámetros: $m^* = 0.067m_0$ (m_0 es masa del electrón libre), $\epsilon = 12.85$, $g = -0.44$, correspondientes al $GaAs$. La temperatura $T = 340$ mK y $\Gamma(B) = 0.150\sqrt{B}$ meV. La altura de la barrera en la banda de conducción para $GaAs - Al_xGa_{1-x}As$ relativo al $GaAs$ la hemos tomado igual a 228 meV, que corresponde a $x \simeq 0.3$ [35].

Analizaremos ahora la dependencia en ν de $e_x(\nu)$ y $v_x^\sigma(z)$, manteniendo la densidad electrónica total constante. Por tanto, el factor de llenado $\nu = N\Phi_0/B$ sólo dependerá (de manera continua) del campo magnético. En la Fig. 7.2 se muestran los resultados para $e_x(\nu)$ dada por (4.39). $e_x(\nu)$ se aproxima asintóticamente a un valor constante en el límite de ν grandes (B pequeños). Esto se puede entender fácilmente

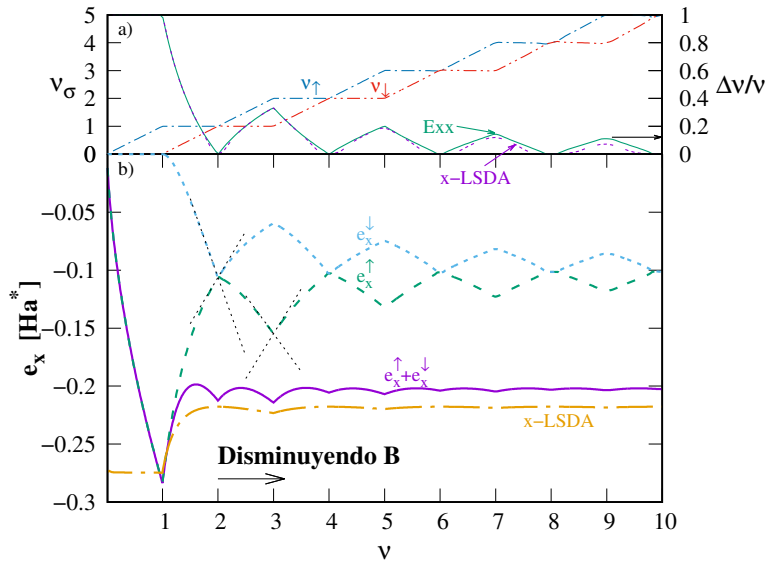


Figura 7.2: (a) Factor de llenado por espín ν_σ (escala de la izquierda) y polarización de espín relativa $\Delta\nu/\nu$ (escala derecha) para diferentes valores del factor de llenado ν ; $\Delta\nu = \nu_\uparrow - \nu_\downarrow$. (b) Energía de intercambio por partícula $e_x(\nu)$ vs ν , para una densidad fija $r_s = 2.5$ ($\sim 10^{-10} \text{ cm}^{-2}$). Se muestran también las componentes de energía $e_x^\uparrow(\nu)$ y $e_x^\downarrow(\nu)$ discriminadas en espín. Las líneas rectas a $\nu = 2$ y $\nu = 3$ representan las aproximaciones analíticas asociadas con las discontinuidades en las pendientes de $e_x^\downarrow(\nu)$ y $e_x^\uparrow(\nu)$, respectivamente. Se muestran además los resultados del potencial en la aproximación x -LSDA para comparar.

te: cuando $B \rightarrow 0$, a densidad fija, los electrones se redistribuyen entre un número creciente de niveles de Landau, de tal manera que el solapamiento entre muchas DOS tipo gaussianas provocan asintóticamente una DOS constante del q2DEG en el límite de campo cero.

Sin embargo, la característica más interesante son las oscilaciones en $e_x(\nu)$: a cada valor entero de ν , $e_x(\nu)$ alcanza un mínimo local de forma no analítica, formando un cúspide invertida. Además, a cada valor impar de ν ($= \nu^o$), $e_x^\uparrow(\nu)$ tiene un mínimo local mientras $e_x^\downarrow(\nu)$ tiene un máximo, pero la suma de ambos resulta en un mínimo $e_x(\nu)$. Una situación equivalente pasa a valores pares de ν ($= \nu^e$), pero con el rol de $e_x^\uparrow(\nu)$ y $e_x^\downarrow(\nu)$ intercambiados. El comportamiento cualitativo de $e_x^\uparrow(\nu)$ y $e_x^\downarrow(\nu)$ alrededor de cada ν^o y ν^e se puede entender de una manera sencilla. Por ejemplo, en cada ν^o la polarización relativa de espín (panel superior) alcanza su máximo valor $\Delta\nu/\nu = 1/\nu^o$ y esto optimiza la componente de energía con espín up. Sin embargo, para $e_x^\downarrow(\nu)$ ésta es la peor configuración y exhibe entonces un máximo local. Por otra parte, en cada valor ν^e se cumple que $\Delta\nu/\nu = 0$, que corresponde a una situación con los espines compensados y esto optimiza la componente down de la energía en detrimento de la up. Independientemente de las consideraciones cualitativas, podemos obtener los mismos resultados analíticamente a partir de (4.39), expandiendo alrededor de ν^o y ν^e . De esta forma obtenemos un comportamiento lineal $e_x^\uparrow(\nu)$ y $e_x^\downarrow(\nu)$ alrededor de cada valor entero de ν , estas aproximaciones analíticas se repre-

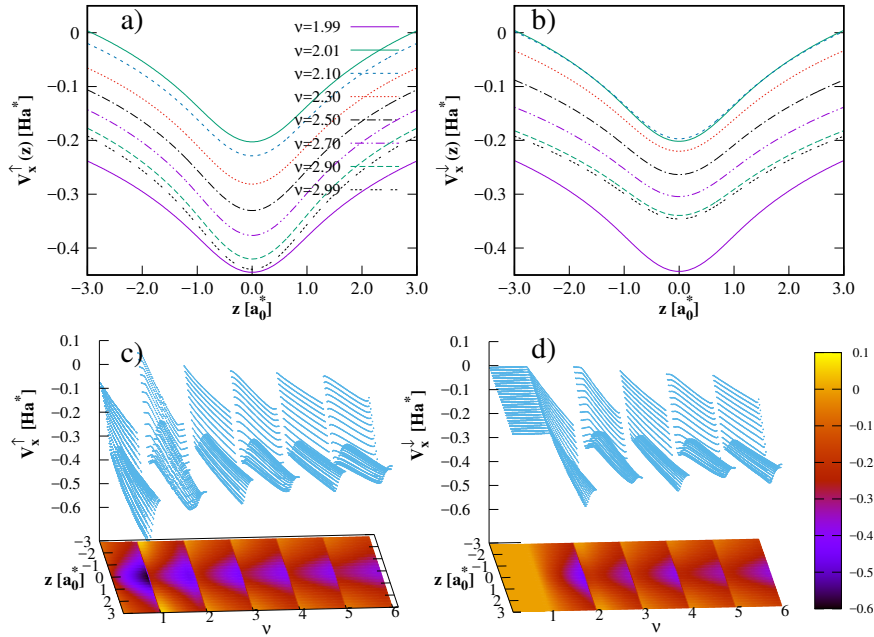


Figura 7.3: Potencial de intercambio exacto $v_x^\uparrow(z)$ y $v_x^\downarrow(z)$ como función de z para algunos valores de ν (panel superior) alrededor del intervalo $2 \lesssim \nu \lesssim 3$, y como función de z y ν (panel inferior). La escala de colores en el plano $z - \nu$ corresponde a la proyección bidimensional del potencial. Ambos potenciales de EE presentan discontinuidades abruptas en los valores enteros de ν . La densidad está fija en $r_s = 2.5$.

sentan por líneas rectas en la Fig. 7.2 cuando $\nu^e = 2$ y $\nu^o = 3$. En la Fig. 7.2 se muestra también el resultado usando la aproximación x -LSDA. La energía por partícula en esta aproximación se obtiene a través de la Ec.(7.23).

Para valores grandes de ν (B pequeños), la aproximación x -LSDA sobrestima la energía de intercambio, pero esto no es un comportamiento general. En el límite $B \rightarrow 0$ para este sistema se recupera el resultado de campo cero correspondiente, obtenido en las referencias [27, 28]. Es interesante notar que la energía de intercambio en la aproximación x -LSDA también presenta cúspides con comportamiento no analítico, pero solo a valores impares de ν , donde la polarización del espín es mayor Fig. 7.2(a).

El comportamiento de $v_x^\uparrow(z)$ y $v_x^\downarrow(z)$ como función de z para algunos valores de ν se muestra en la Fig. 7.3. La característica crucial a notar en la Fig. 7.3 es el salto abrupto (rígido) de $v_x^\uparrow(z)$ y $v_x^\downarrow(z)$ cuando ν pasa por valores enteros. Después del salto y a medida que se comienza a llenar el LL correspondiente, $v_x^\uparrow(z)$ y $v_x^\downarrow(z)$ comienzan a descender nuevamente. Como se muestra en el panel superior, para $\nu = 2.99$ ambos potenciales de EE están nuevamente cerca del valor que tenían a $\nu = 1.99$, justo antes del salto. Sin embargo, debemos notar aquí, que solo cuando $p_\sigma \rightarrow 0$, la diferencia $v_x^\sigma(z)[\nu = [\nu] + p_\sigma] - v_x^\sigma(z)[\nu = [\nu] - p_\sigma]$ es una constante que no depende

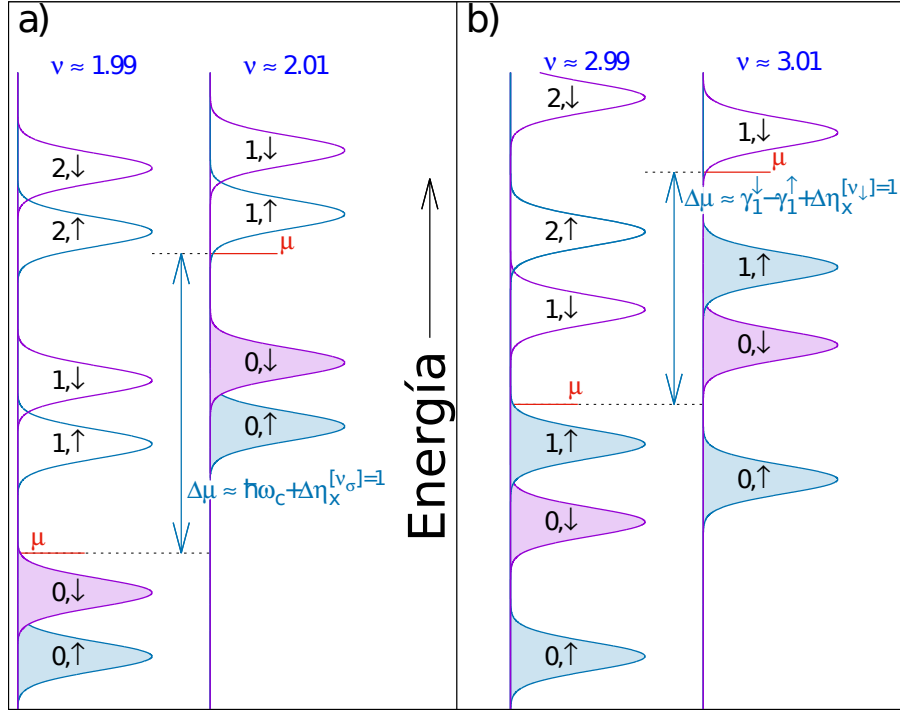


Figura 7.4: Vista esquemática de los LLs cerca de valores enteros de ν : a) cerca de $\nu = 2$ y b) cerca de $\nu = 3$. Las líneas rectas horizontales corresponde a las diferentes posiciones del potencial químico μ .

de z . Para valores finitos de p_σ , la diferencia consiste en una función que depende de z .

La discontinuidad a valores entero de ν tiene su origen en una discontinuidad en $S_2^{[\nu_\sigma]}(t)$, que a su vez induce una discontinuidad en $\eta_x^{[\nu_\sigma]}$ (vea las Ecs.(4.43)-(4.45)). Para explicar esto debemos retornar a la expresión para $S_2^{[\nu_\sigma]}(t)$ en (4.45), suponiendo que ν esta cerca de algún valor entero, entonces solo un factor de ocupación $n_{n,\sigma}^{2D}$ contribuye a la derivada respecto a γ_1^σ . Esa situación se muestra esquemáticamente en (7.4), para valores del factor de llenado cercanos a $\nu = 2$ (panel izquierdo) y $\nu = 3$ (panel derecho). Bajo estas condiciones, la derivada respecto a γ_1^σ la podemos escribir como $\partial n_{n,\sigma}^{2D} / \partial \gamma_1^\sigma \simeq \delta_{n, [\nu_\sigma]} (\partial n_{[\nu_\sigma], \sigma}^{2D} / \partial \gamma_1^\sigma)$, y la Ec.(4.45) se simplifica

$$S_2^{[\nu_\sigma]}(t) \simeq \sum_n n_{n,\sigma}^{2D} I_n^{[\nu_\sigma]}(t) . \quad (7.1)$$

Enfatizamos que (7.1) es válida solo para ν cercanos a valores enteros, mientras que (4.45) es válida para valores arbitrarios del factor de llenado. Para la disconti-

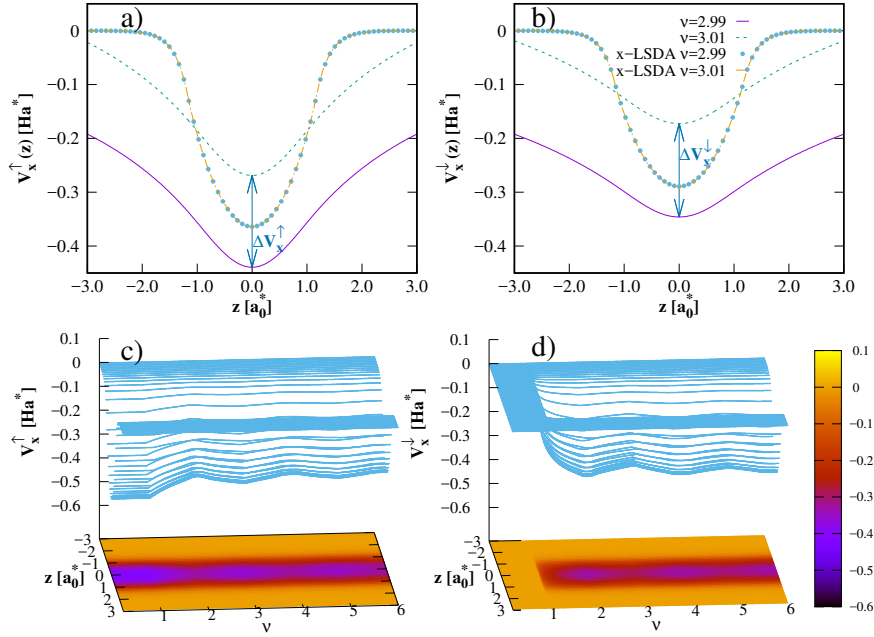


Figura 7.5: Potenciales de intercambio x -LSDA $v_x^\uparrow(z)$ y $v_x^\downarrow(z)$ como función de z para valores seleccionados de ν (panel superior) alrededor de $\nu = 3$ y como función de z y ν (panel inferior). La escala de colores en el plano $z - \nu$ corresponden a la proyección del potencial. Los resultados dentro de la aproximación x -LSDA son continuos cuando ν pasa por valores enteros. La densidad está fija en $r_s = 2.5$.

nuidad en $S_2^{[\nu_\sigma]}$ obtenemos entonces

$$\begin{aligned} \Delta S_2^{[\nu_\sigma]}(t) &\equiv \lim_{p_\sigma \rightarrow 0} \left[S_2^{[\nu_\sigma] + p_\sigma}(t) - S_2^{[\nu_\sigma] - p_\sigma}(t) \right] \\ &= \sum_{n=0}^{[\nu_\sigma] - 1} (I_n^{[\nu_\sigma]}(t) - I_n^{[\nu_\sigma] - 1}(t)) < 0. \end{aligned} \quad (7.2)$$

De esta última expresión obtenemos la discontinuidad en $\eta_x^{[\nu_\sigma]}$,

$$\begin{aligned} \Delta \eta_x^{[\nu_\sigma]} &\equiv \lim_{p_\sigma \rightarrow 0} [\eta_x^{[\nu_\sigma] + p_\sigma} - \eta_x^{[\nu_\sigma] - p_\sigma}] = - \frac{\langle \rho_\sigma | \Delta S_2^{[\nu_\sigma]} | \rho_\sigma \rangle}{\nu_\sigma^2 (N_\phi)^2 l_B} > 0, \\ &= \frac{-1}{r_s \sqrt{\nu/2}} \iint dz dz' (\lambda_1^\sigma(z) \lambda_1^\sigma(z'))^2 \Delta S_2^{[\nu_\sigma]}(z - z'), \end{aligned} \quad (7.3)$$

con un signo positivo, de acuerdo con los resultados numéricos mostrados en la Fig. 7.3.

El caso más simple a analizar es la discontinuidad a $\nu = 1$. En este caso, $[\nu_\uparrow] = 1$, $[\nu_\downarrow] = 0$ y la Ec.(7.2) se reduce a

$$\Delta S_2^{[\nu_\uparrow] = 1}(t) = I_0^1(t) - I_0^0(t), \quad (7.4)$$

que admite una simple interpretación física. $I_0^0(t)$ es proporcional a la energía de intercambio entre los electrones en el nivel del Landau lleno (intercambio intra-LL), mientras $I_0^1(t)$ es proporcional a la interacción entre los electrones en el nivel de Landau fundamental y los del primer excitado (intercambio inter-LL). Dado que la interacción intra-LL es mayor que la inter-LL, $I_0^0(t) > I_0^1(t)$ para todos los valores de t , se obtiene un signo negativo de $\Delta S_2^{[\nu_\uparrow]=1}$, que a su vez provoca un salto positivo en $v_x^\uparrow(z)$ mostrado en la Fig. 7.3 para $\nu = 1$. El próximo caso simple es la discontinuidad a $\nu=2$. Aquí $[\nu_\uparrow] = [\nu_\downarrow] = 1$, por tanto $\Delta S_2^{[\nu_\uparrow]=1}(t) = \Delta S_2^{[\nu_\downarrow]=1}(t) = I_0^1(t) - I_0^0(t)$, al igual que antes. Esto implica que las discontinuidades de $v_x^\uparrow(z)$ y $v_x^\downarrow(z)$ son iguales a $\nu = 2$, como se observa en la Fig. 7.3. Sin embargo, note que como $\Delta\eta_x^{[\nu_\sigma]}$ depende de la forma $\nu^{-1/2}$ a r_s fijo (vea la Ec.(7.3)), la discontinuidad a $\nu = 2$ en $v_x^\uparrow(z)$ y $v_x^\downarrow(z)$ es aproximadamente un factor $1/\sqrt{2}$ más pequeña que la discontinuidad en $v_x^\uparrow(z)$ a $\nu = 1$. El próximo caso interesante es cuando $\nu = 3$. Aquí $[\nu_\uparrow] = 2$ y $[\nu_\downarrow] = 1$, entonces

$$\Delta S_2^{[\nu_\uparrow]=2}(t) = I_0^2(t) + I_1^2(t) - I_0^1(t) - I_1^1(t), \quad (7.5)$$

mientras que $\Delta S_2^{[\nu_\downarrow]=1}(t)$ está dado por la Ec.(7.4). Cuando reemplazamos en (7.3) obtenemos distintas discontinuidades para $v_x^\uparrow(z)$ y $v_x^\downarrow(z)$ a $\nu = 3$, como se puede apreciar en el panel superior de la Fig. 7.5; donde también se muestra una comparación entre los potenciales EE y x -LSDA. Mientras los potenciales de EE presentan claras discontinuidades, la diferencia entre los potenciales de intercambio en la aproximación x -LSDA para $\nu = 2.99$ y $\nu = 3.01$ no se puede distinguir. Otra diferencia importante está en el comportamiento asintótico del potencial en ambas aproximaciones: mientras en el potencial x -LSDA decae exponencialmente, el potencial EE decae mucho más lentamente, de la forma $-1/z$ que es el comportamiento físico correcto. En el panel inferior de la Fig. 7.5 se muestra el potencial de intercambio exacto como función de z y ν . Ya que el potencial x -LSDA es proporcional a $(\rho_\sigma(z))^{4/3}$, no presenta discontinuidades en los valores enteros de ν , mostrando en su lugar cambios de pendiente en estos puntos.

En retrospectiva, es importante remarcar que la discontinuidad se origina del término $\eta_x^{\nu_\sigma}$, que a su vez viene de la derivada implícita de la energía de intercambio respecto a la densidad. Éste es el término que incluye la dependencia de la energía de intercambio con la densidad en el plano ($\nu_\sigma N_\phi/A^*$). La inclusión de la derivadas implícitas es también muy importante para recuperar el límite correcto en el caso 2D-estricto a campo magnético cero (ver sección 7.2.2.2).

En la Fig. 7.6 se muestran las energías de los primeros seis LLS $\varepsilon_{1,n}^\sigma(\nu) (\equiv \varepsilon_n^\sigma(\nu))$ como función de ν . Las discontinuidades presentes en los potenciales de EE $v_x^\uparrow(z)$ y $v_x^\downarrow(z)$ en los valores enteros de ν inducen cambios abruptos en la energía de los niveles de Landau y el potencial químico μ . Estos resultados numéricos auto-consistentes

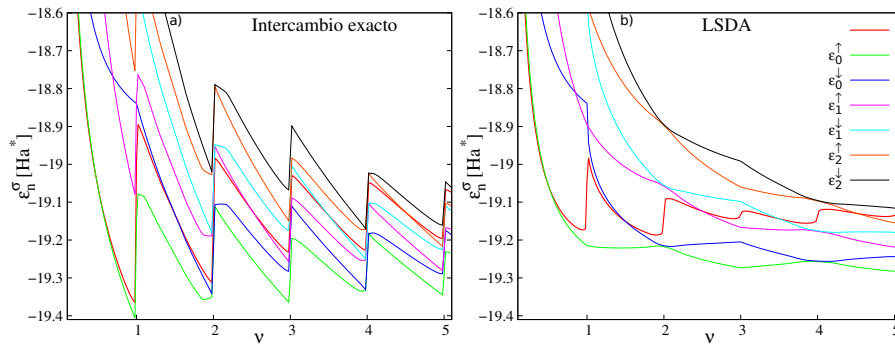


Figura 7.6: Primeros seis niveles de Landau como función del factor de llenado ν . a) Aproximación de intercambio exacto y b) Aproximación x -LSDA. El potencial químico μ se representa con una línea roja más gruesa. $r_s = 2.5$ (densidad constante).

validan la fuerte renormalización que sufre la estructura de los LLs, esquematizada en la Fig. 7.4. Por ejemplo cuando $\nu \simeq 2$, la “pareja” de LLs $\{\varepsilon_n^\uparrow, \varepsilon_n^\downarrow\}$ se puede observar fácilmente en la Fig. 7.6 y se muestra esquemáticamente en el panel izquierdo de la Fig. 7.4. Estas “parejas” de LLs cambian drásticamente cuando $\nu \simeq 3$, en este punto los pares son de la forma $\{\varepsilon_n^\downarrow, \varepsilon_{n+1}^\uparrow\}$ (ver Fig. 7.6), como se muestra esquemáticamente en el panel derecho de la Fig. 7.4. ¿Cómo el q2DEG pasa de una configuración cerca de ν par a una cerca de ν impar? La respuesta está en la evolución de $v_x^\uparrow(z)$ y $v_x^\downarrow(z)$ para $2.01 \leq \nu \leq 2.99$ mostrada en el panel superior de la Fig. 7.3. Se ve como la disminución continua de $v_x^\uparrow(z)$ es mayor que en $v_x^\downarrow(z)$, provocando un corrimiento hacia abajo de los niveles con espín up respecto a los de espín down.

La energía de los LLs en la aproximación x -LSDA se muestra en la Fig. 7.6(b), siendo su comportamiento bastante diferente respecto a la aproximación EE. En primer lugar, dado que el potencial de intercambio x -LSDA es continuo como función de ν , los respectivos autovalores no presentan discontinuidad. Sin embargo, el potencial químico μ sí presenta cierta discontinuidad, proporcional al “gap ciclotrónico” $\hbar\omega_c$ cuando ν es par o proporcional al “gap de espín” $\varepsilon_n^\downarrow(\nu) - \varepsilon_n^\uparrow(\nu)$ cuando ν es impar.

7.1.2. Conclusiones

Se ha obtenido la funcional de intercambio exacto en el efecto Hall cuántico entero (IQHE). Ésta presenta mínimos locales con discontinuidades en la derivada para cada valor entero del factor de llenado ν . En el régimen de una sola sub-banda, cuando solo la sub-banda fundamental del gas electrónico cuasi-bidimensional está ocupada, se ha encontrado una expresión analítica para el potencial de intercambio dependiente del espín. Su característica más sorprendente es que presenta un salto abrupto, constante y positivo, cada vez que ν toma valores enteros. Esto es análogo a las discontinuidades en sistemas finitos y sólidos cuando el número de electro-

nes pasa por valores enteros; solo que en este caso las discontinuidades pueden ser inducidas manteniendo el número de partículas fijo y variando el campo magnético. Este potencial presenta notables diferencias con el potencial x -LSDA usado comúnmente, sobre todo alrededor de valores enteros de ν , y propone una potencial aproximación para el tratamiento de sistemas inhomogéneos, superior en principio a la x -LSDA.

7.2. Intercambio exacto en un sistema 2D estricto

En la sección anterior estudiamos el potencial de intercambio exacto para un gas cuasi-bidimensional de electrones. Debido a su riqueza conceptual, en esta sección nos concentraremos en el límite 2D estricto del q2DEG, que puede ser obtenido reemplazando $|\lambda_1^\sigma(z)|^2 \rightarrow \delta(z)$ en las expresiones para energía (4.39) y potencial (4.43) de intercambio, obteniendo

$$\begin{aligned} e_x(r_s, \nu) \equiv \frac{E_x}{N} &= -\frac{1}{\sqrt{2} r_s \nu^{3/2}} \sum_{\sigma} S_1^{\nu\sigma}(0) , \\ &= e_x^\uparrow(r_s, \nu) + e_x^\downarrow(r_s, \nu) , \end{aligned} \quad (7.6)$$

y

$$v_x^\sigma(z) = \frac{-1}{r_s \nu_\sigma} \sqrt{\frac{2}{\nu}} [S_1^{\nu\sigma}(|z|) + \nu_\sigma S_2^{\nu\sigma}(0) - S_1^{\nu\sigma}(0)] . \quad (7.7)$$

Además,

$$u_x^\sigma(z) = \frac{-1}{r_s \nu_\sigma} \sqrt{\frac{2}{\nu}} S_1^{\nu\sigma}(|z|), \quad (7.8)$$

$$\bar{u}_x^\sigma = u_x^\sigma(0) = \frac{-1}{r_s \nu_\sigma} \sqrt{\frac{2}{\nu}} S_1^{\nu\sigma}(0), \quad (7.9)$$

$$\eta_x^\sigma = -\frac{1}{r_s} \sqrt{\frac{2}{\nu}} S_2^{\nu\sigma}(0). \quad (7.10)$$

En las últimas expresiones hemos usado que $l_B = r_s \sqrt{\nu/2}$, donde r_s es el parámetro adimensional que caracteriza la densidad electrónica $N/A^* = (\pi r_s^2)^{-1}$. Note que las Ecs.(7.7-7.10) son equivalentes a la Ec.(4.38), obtenida a partir de la aproximación KLI. En este límite 2D, los autovalores γ_1^σ se convierten en las energías de referencia. Podemos suponer además que el ensanchamiento de los niveles de Landau Γ es menor que el desdoblamiento de Zeeman ΔE_z entre LLs con espines opuestos y que $\Delta E_z < \hbar\omega_c$ (es decir, $\hbar\omega_c > \Delta E_z > \Gamma \gg k_B T$). De esta manera los niveles de Landau se llenarán de forma secuencial $(n = 0, \uparrow) \rightarrow (n = 0, \downarrow) \rightarrow (n = 1, \uparrow) \rightarrow (n = 1, \downarrow) \dots$,

como consideraremos más adelante. Por otra parte, podemos escribir $S_1^{\nu_\sigma}(0)$ y $S_2^{\nu_\sigma}(0)$ de una manera más simple e intuitiva:

$$\begin{aligned} S_1^{\nu_\sigma}(0) &= \sum_{n_i, n_j=0}^{[\nu_\sigma]-1} I_{n_i}^{n_j}(0) + 2p_\sigma \sum_{n_i=0}^{[\nu_\sigma]-1} I_{n_i}^{[\nu_\sigma]}(0) + p_\sigma^2 I_{[\nu_\sigma]}^{[\nu_\sigma]}(0), \\ &\equiv I_1([\nu_\sigma]) + 2p_\sigma I_2([\nu_\sigma]) + p_\sigma^2 I_3([\nu_\sigma]), \end{aligned} \quad (7.11)$$

y

$$\begin{aligned} S_2^{\nu_\sigma}(0) &= \sum_{n_i=0}^{[\nu_\sigma]-1} I_{n_i}^{[\nu_\sigma]}(0) + p_\sigma I_{[\nu_\sigma]}^{[\nu_\sigma]}(0), \\ &\equiv I_2([\nu_\sigma]) + p_\sigma I_3([\nu_\sigma]). \end{aligned} \quad (7.12)$$

Aquí

$$\begin{aligned} I_1(n+1) &= \int_0^\infty e^{-x^2/2} \left[L_n^1 \left(\frac{x^2}{2} \right) \right]^2 dx, \\ &= \frac{\sqrt{\pi} (2)_n (3/2)_n}{\sqrt{2} (n!)^2} {}_3F_2 \left(-n, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; 2, -n - \frac{1}{2}; 1 \right). \end{aligned} \quad (7.13)$$

Además,

$$\begin{aligned} I_2(n) &= \int_0^\infty e^{-x^2/2} L_{n-1}^1 \left(\frac{x^2}{2} \right) L_n^0 \left(\frac{x^2}{2} \right) dx, \\ &= \frac{\sqrt{\pi} (1)_n (3/2)_{n-1}}{\sqrt{2} n!(n-1)!} {}_3F_2 \left(-n, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; 1, -n + \frac{1}{2}; 1 \right), \end{aligned} \quad (7.14)$$

y

$$\begin{aligned} I_3(n) &= \int_0^\infty e^{-x^2/2} \left[L_n^0 \left(\frac{x^2}{2} \right) \right]^2 dx, \\ &= \frac{\sqrt{\pi} (1)_n (1/2)_n}{\sqrt{2} (n!)^2} {}_3F_2 \left(-n, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1, -n + \frac{1}{2}; 1 \right). \end{aligned} \quad (7.15)$$

Al pasar de la primera a la segunda línea en las Ecs.(7.13-7.15) hemos usado el resultado dado en la referencia [96]. Los coeficientes $(a)_n$ son los símbolos de Pochhammer [97] y entonces ${}_3F_2(a, b, c; d, e; z)$ es la función hipergeométrica generalizada (3,2) [97] evaluada en $z = 1$, para diferentes valores de los parámetros a, b, c, d, e . Estas expresiones analíticas para las cantidades $I_1(n)$, $I_2(n)$ e $I_3(n)$ son muy útiles para analizar el límite de campo magnético cero, donde $n \gg 1$. Además, en las últimas expresiones hemos utilizado las identidades

$$\sum_{n_i, n_j=0}^{[\nu_\sigma]-1} I_{n_i}^{n_j}(0) = \int_0^\infty e^{-x^2/2} \left[L_{[\nu_\sigma]-1}^1 \left(\frac{x^2}{2} \right) \right]^2 dx, \quad (7.16)$$

$$\sum_{n_i=0}^{[\nu_\sigma]-1} I_{n_i}^{[\nu_\sigma]}(0) = \int_0^\infty e^{-x^2/2} L_{[\nu_\sigma]-1}^1 \left(\frac{x^2}{2} \right) L_{[\nu_\sigma]}^0 \left(\frac{x^2}{2} \right) dx. \quad (7.17)$$

La identidad (7.16) se obtiene de igualar el resultado para la energía de intercambio obtenido anteriormente (7.6) y la energía de intercambio obtenida a partir de la matriz densidad de una partícula [45], para valores enteros del factor de llenado ν . Por otra parte, la identidad (7.17) se obtiene utilizando el principio de inducción matemática suponiendo que se cumple la identidad (7.16).

En la Ec.(7.11) para $S_1^{\nu_\sigma}(0)$ podemos identificar el primer término como correspondiente a la energía de intercambio entre electrones en LLs llenos, el segundo término como la energía de intercambio entre los electrones en LLs llenos y en el LL parcialmente lleno y el último término representa la energía de intercambio entre los electrones en el LL parcialmente lleno.

Como observación interesante, se debe tener en cuenta que el potencial de EE en la ubicación del gas de electrones 2D estricto viene dado por

$$v_x^\sigma(z=0) = -\frac{1}{r_s} \sqrt{\frac{2}{\nu}} S_2^{\nu_\sigma}(0) = \eta_x^\sigma. \quad (7.18)$$

Como veremos más adelante, $v_x^\sigma(z=0)$ tiene una dependencia con el campo magnético no trivial a través de la función $S_2^{\nu_\sigma}(0)$.

Como otra pieza de información útil en este contexto, la matriz densidad de una partícula para un gas de electrones 2D estricto en un campo magnético perpendicular se puede definir como

$$\rho_1^\sigma(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = \sum_{n=0}^{[\nu_\sigma]-1} \sum_{k=1}^{N_\phi} \psi_{n,k}(\boldsymbol{\rho})^* \psi_{n,k}(\boldsymbol{\rho}') + \sum_k^{occ.} \psi_{[\nu_\sigma],k}(\boldsymbol{\rho})^* \psi_{[\nu_\sigma],k}(\boldsymbol{\rho}'), \quad (7.19)$$

donde $\psi_{n,k}(\boldsymbol{\rho}) = \phi_{n,k}(x) e^{iky} / \sqrt{L}$. El primer término en (7.19) viene de la contribución de todos los LLs completamente ocupados, mientras que el segundo término representa la contribución del último LL, cuya ocupación puede ser fraccionaria. Con respecto a este último término y considerando que dentro de un LL dado todos los valores de k son igualmente probables, reemplazamos la suma sobre k por un promedio sobre todas las N_c configuraciones posibles $\{k\}$:

$$\sum_k^{occ.} f_k(\sigma) \Rightarrow \frac{1}{N_c} \sum_{\{k\}}^{N_c} \sum_{k \in \{k\}} f_k(\sigma) = p_\sigma \sum_{k=1}^{N_\phi} f_k(\sigma), \quad (7.20)$$

donde p_σ es el factor de ocupación del LL parcialmente ocupado, definido anteriormente. Sustituyendo la suma sobre k en (7.19) tenemos

$$\rho_1^\sigma(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = \sum_{n=0}^{[\nu_\sigma]-1} \sum_{k=1}^{N_\phi} \psi_{n,k}(\boldsymbol{\rho})^* \psi_{n,k}(\boldsymbol{\rho}') + p_\sigma \sum_{k=1}^{N_\phi} \psi_{[\nu_\sigma],k}(\boldsymbol{\rho})^* \psi_{[\nu_\sigma],k}^\sigma(\boldsymbol{\rho}'). \quad (7.21)$$

Finalmente, sumando sobre todos los k y n , tenemos

$$\rho_1^\sigma(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = \frac{N_\phi}{A^*} e^{i \frac{(x'+x)(y'-y)}{2l_B^2}} e^{-\frac{|\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\rho}'|^2}{4l_B^2}} \left[L_{[\nu_\sigma]-1}^1 \left(\frac{|\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\rho}'|^2}{2l_B^2} \right) + p_\sigma L_{[\nu_\sigma]}^0 \left(\frac{|\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\rho}'|^2}{2l_B^2} \right) \right]. \quad (7.22)$$

Podemos ver de esta última ecuación que la densidad electrónica $\rho_1^\sigma(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = (N_\phi/A^*)\nu_\sigma = n_\sigma$, ya que $L_{[\nu_\sigma]-1}^1(0) = [\nu_\sigma]$ y $L_{[\nu_\sigma]}^0(0) = 1$. Note que la densidad electrónica es constante, es decir, el gas electrónico es homogéneo aún en presencia de campo magnético. Sin embargo, veremos a continuación que existen diferencias entre la energía de intercambio y el potencial del gas de electrones homogéneo con y sin campo magnético aplicado. La Ec.(7.22) generaliza una expresión equivalente para la matriz de densidad de una partícula dada en la referencia [45], restringido al caso $p_\sigma = 0$.

7.2.1. La aproximación x -LSDA para un gas de electrones estrictamente 2D

La energía de intercambio por partícula para un gas bidimensional homogéneo a campo magnético cero es [45],

$$e_x^{\text{LSDA}}(r_s, p) = -\frac{2\sqrt{2}}{3\pi r_s} [(1+p)^{3/2} + (1-p)^{3/2}], \quad (7.23)$$

donde $p = (n_\uparrow - n_\downarrow)/(n_\uparrow + n_\downarrow)$ es la polarización de espín. Para un gas 2D inhomogéneo en presencia de un campo magnético B , en la aproximación x -LSDA, se supone que la misma expresión es válida, pero con las densidades $n_\uparrow(\boldsymbol{\rho})$ y $n_\downarrow(\boldsymbol{\rho})$ dependientes explícitamente de la posición e implícitamente del campo magnético, a través de las densidades. Uno de los objetivos de esta sección es analizar la validez de la aproximación x -LSDA en el caso de un gas 2D homogéneo en el régimen del IQHE, a través de su comparación con nuestros resultados para el EE.

Por su parte, el potencial para un gas 2D homogéneo a campo magnético cero puede ser obtenido a partir de la expresión para la energía (7.23), de la forma

$$v_x^{\sigma, \text{LSDA}} \equiv \partial(n e_x^{\text{LSDA}}) / \partial n_\sigma = -4\sqrt{n_\sigma/\pi} = -\frac{2\sqrt{2}}{\pi r_s} \sqrt{1 \pm p}, \quad (7.24)$$

donde deberíamos tomar el signo + para la componente de espín up y el signo – para la componente de espín down. Suponiendo nuevamente que r_s y p son cantidades dependientes de la posición y del campo magnético a través de su dependencia con la densidad, entonces la Ec.(7.24) define el potencial de intercambio para un gas 2D estricto en la aproximación x -LSDA. Las ecuaciones (7.6) y (7.7) no están obviamente relacionadas con sus contrapartes de x -LSDA dadas por (7.23) y (7.24). Más adelante, mostraremos analítica y numéricamente que las expresiones x -LSDA son las contribuciones principales en las expresiones rigurosas correspondientes de EE, en el límite del campo magnético pequeño.

7.2.2. Resultados y discusiones

7.2.2.1. Comparación entre intercambio exacto y x -LSDA a campo magnético finito

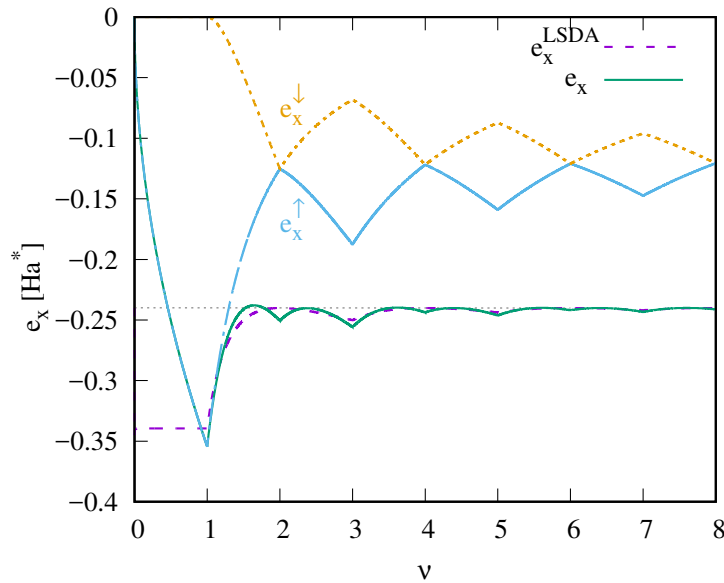


Figura 7.7: Energía de intercambio exacto por partícula $e_x(r_s, \nu)$ y en la aproximación x -LSDA $e_x^{\text{LSDA}}(r_s, p(\nu))$ vs ν , para $r_s = 2.5$. La línea horizontal en $-4\sqrt{2}/(3\pi r_s) \simeq -0.24$ corresponde al límite $\nu \gg 1$ de $e_x(r_s, \nu)$ y $e_x^{\text{LSDA}}(r_s, p(\nu))$. Se muestran también las componentes de energía discriminadas en espín $e_x^\uparrow(r_s, \nu)$ y $e_x^\downarrow(r_s, \nu)$.

La Fig. 7.7 muestra la energía de EE por partícula vs ν , para $r_s = 2.5$. El resultado de x -LSDA también se muestra para comparación, usando (7.23) y haciendo el

reemplazo $p \rightarrow p(\nu) = [\nu_{\uparrow}(\nu) - \nu_{\downarrow}(\nu)]/\nu$. Las diferencias entre ambos resultados aumentan cuando se incrementa el campo magnético (límite de ν pequeño). La energía de intercambio exacto muestra discontinuidades en las derivadas en cada factor de llenado ν entero, mientras que este tipo de discontinuidad está presente en la energía x -LSDA solo en valores impares de ν . En la aproximación x -LSDA, la derivada de la energía de intercambio se puede escribir como $de_x^{\text{LSDA}}/d\nu = de_x^{\text{LSDA}}/dp \times dp(\nu)/d\nu$ y las discontinuidades ingresan a través de $dp/d\nu$ que es discontinua en cada valor entero de ν (ver Fig. 7.2, panel superior). Por otra parte, en los valores de ν pares $de_x^{\text{LSDA}}/dp = 0$, se pierde el efecto de $dp(\nu)/d\nu$ y la derivada es continua en estos puntos. Esta diferencia entre la x -LSDA y la EE está centrada en el hecho de que la x -LSDA es una aproximación de campo magnético cero, reflejada en la propiedad de paridad que $e_x^{\text{LSDA}}(r_s, p) = e_x^{\text{LSDA}}(r_s, -p)$. Esto significa que su expansión en el límite $p \rightarrow 0$ solo involucra potencias pares de p . Esto lleva a la propiedad $de_x^{\text{LSDA}}/dp = 0$ para ν pares. Por otra parte, $e_x(r_s, \nu)$ incluye completamente el efecto del campo magnético. Otra diferencia interesante entre estas dos aproximaciones para la energía de intercambio es que el resultado de EE presenta mínimos locales en *todos* los valores enteros ν , mientras que la energía de intercambio x -LSDA tiene *mínimos* locales solo en ν impares y *máximos* locales en ν pares. En la aproximación x -LSDA, la energía de intercambio solo depende (a densidad constante) de la polarización p y la polarización presenta mínimos locales a ν pares (perdiendo energía de intercambio) y máximos locales a ν impares (ganando energía de intercambio). Sin embargo, el comportamiento de la energía de EE es más complicado: además de p , también depende del factor de ocupación del último LL ocupado. Las energías EE discriminadas por espín también se muestran en la Fig. 7.7. $e_x^{\uparrow}(r_s, \nu)$ se hace más negativa cuando $[\nu] < \nu < [\nu] + 1$, con $[\nu] = \text{par}$, mientras que se hace menos negativa para $[\nu] < \nu < [\nu] + 1$ cuando $[\nu] = \text{impar}$. $e_x^{\downarrow}(r_s, \nu)$ muestra el comportamiento opuesto. Tanto $e_x^{\uparrow}(r_s, \nu)$ como $e_x^{\downarrow}(r_s, \nu)$ tienen apreciables discontinuidades en las derivadas, de signos opuestos en cada ν entero, que casi se compensan para dar las discontinuidades de pendiente mucho más pequeñas, pero aún finitas de $e_x(r_s, \nu)$.

En la Fig. 7.8 mostramos los potenciales de intercambio de EE y x -LSDA para ambas componentes de espín. $v_x^{\uparrow}(0)$ tiene discontinuidades marcadas en cada ν par, mientras que $v_x^{\downarrow}(0)$ tiene las discontinuidades ubicadas en valores impares de ν , exceptuando $\nu = 1$. Todos estos saltos bruscos están relacionados con el llenado de un nuevo LL, como veremos más adelante. Por otro lado, ambas componentes del potencial de intercambio de x -LSDA son continuos y solo exhiben discontinuidades en las derivadas para valores enteros de ν . $v_x^{\uparrow, \text{LSDA}}$ es constante para $0 < \nu < 1$, ya que para este régimen de campo magnético grande todos los electrones están completamente polarizados en el LL fundamental, es decir, $p = 1$. Las discontinuidades en las derivadas de $v_x^{\sigma, \text{LSDA}}$ son solo una consecuencia de su dependencia de $p(\nu)$, que

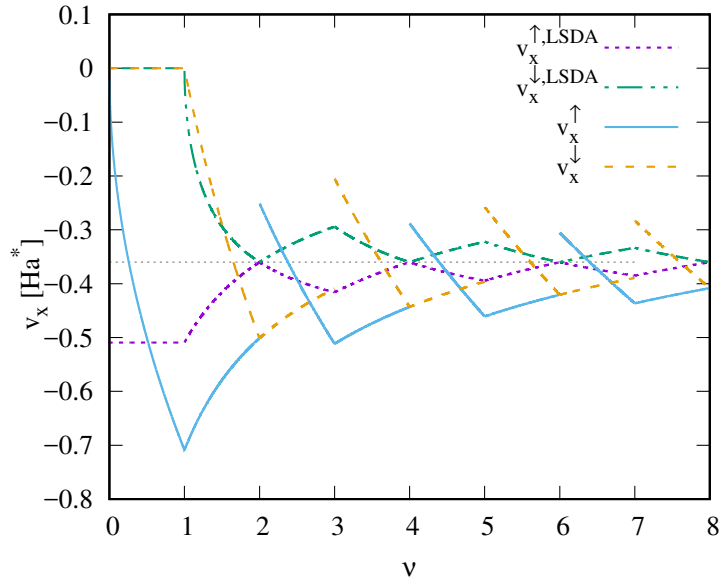


Figura 7.8: Potencial de intercambio exacto $v_x^\sigma(0)$ y su contraparte en la aproximación x -LSDA $v_x^{\sigma,LSDA}$ en $z = 0$ vs ν , para $r_s = 2.5$. La línea horizontal en $-2\sqrt{2}/(\pi r_s) \simeq -0.36$ corresponde al límite $\nu \gg 1$ para $v_x^\sigma(0)$ y $v_x^{\sigma,LSDA}$.

también tiene una derivada discontinua en cada entero ν . Como ya se ha señalado, las discontinuidades en $v_x^\sigma(0)$ en ν entero se deben al comportamiento no trivial con el campo magnético de la función $S_2^{\nu\sigma}(0)$ en (7.7) o equivalentemente la función η_x^σ en (7.18). Partiendo de esta última ecuación, el salto abrupto en el potencial de intercambio exacto en cada ν entero se puede escribir como

$$\begin{aligned} \Delta v_x^\sigma &= \frac{-1}{r_s} \sqrt{\frac{2}{\nu}} \left[S_2^{[\nu\sigma]^+}(0) - S_2^{[\nu\sigma]^-}(0) \right], \\ &= \frac{-1}{r_s} \sqrt{\frac{2}{\nu}} \left[I_2([\nu\sigma]) - I_2([\nu\sigma] - 1) - I_3([\nu\sigma] - 1) \right], \\ &= \frac{1}{r_s} \sqrt{\frac{2}{\nu}} \int_0^\infty e^{-X} L_{[\nu\sigma]-1}^1(X) \left[L_{[\nu\sigma]-1}^0(X) - L_{[\nu\sigma]}^0(X) \right] dx, \end{aligned} \quad (7.25)$$

con $X = x^2/2$. Hemos comprobado numéricamente que la última integral es finita y positiva, para valores de $[\nu\sigma]$ finitos. Por otro lado, para $[\nu\sigma] \gg 1$, la diferencia entre los dos polinomios de Laguerre generalizados dentro de la integral es cada vez más pequeña por lo que la discontinuidad también desaparece asintóticamente en el límite del campo bajo. Sin embargo, note el comportamiento bastante diferente de $e_x(r_s, \nu)$ y de $v_x^\sigma(0)$ en el límite de ν grande: mientras para $\nu \sim 10$ $e_x(r_s, \nu)$ y $e_x^{LSDA}(r_s, p(\nu))$ son esencialmente indistinguibles en la escala del dibujo en la Fig. 7.7, la diferencia entre $v_x^\sigma(0)$ y $v_x^{\sigma,LSDA}$ aún se pueden distinguir claramente en la Fig. 7.8 para valores grandes de ν . Este punto se tratará con más detalle en la siguiente

sección. Se debe enfatizar que el salto dado por Δv_x^σ anteriormente también se aplica a todo el potencial de intercambio $v_x^\sigma(z)$ y no solo a su valor en el 2DEG $v_x^\sigma(0)$, discutido anteriormente. Este tema se analiza más a fondo en la discusión que rodea a la Fig. 7.10.

7.2.2.2. Límite de campo magnético cero

De los resultados anteriores, podemos ver que al disminuir el campo magnético (o aumentar ν) los resultados de EE en cierto modo se vuelven similares a los resultados de x -LSDA. Ahora demostraremos que podemos obtener los resultados de x -LSDA analíticamente como el límite de campo magnético pequeño de nuestras expresiones EE. Esto puede considerarse como una prueba crítica y rigurosa sobre la consistencia del formalismo actual. En primer lugar, la energía EE en la Ec.(7.6) debe reducirse a la expresión (7.23). Para probar esto, podemos escribir la energía EE por partícula en la forma,

$$e_x(r_s, \nu) = -\frac{2\sqrt{2}}{3\pi r_s} \left\{ [1 + p(\nu)]^{3/2} \bar{S}_1^{\nu\uparrow} + [1 - p(\nu)]^{3/2} \bar{S}_1^{\nu\downarrow} \right\}, \quad (7.26)$$

donde $p(\nu) = [\nu_\uparrow(\nu) - \nu_\downarrow(\nu)]/\nu$ y $\bar{S}_1^{\nu\sigma} = (3\pi/8\sqrt{2})S_1^{\nu\sigma}(0)/\nu_\sigma^{3/2}$. La motivación para esto es simplemente que para $\bar{S}_1^{\nu\sigma} = 1$ se recupera la expresión $e_x^{\text{LSDA}}(r_s, p)$ (7.23). Usando que (vea Apéndice A.3, Ec.(A.26))

$$\lim_{\nu_\sigma \rightarrow \infty} \bar{S}_1^{\nu\sigma} \rightarrow 1, \quad (7.27)$$

tenemos

$$\lim_{\nu \rightarrow \infty} e_x(r_s, \nu) = e_x^{\text{LSDA}}(r_s, p). \quad (7.28)$$

Este último resultado es la energía de intercambio del gas de electrones 2D a campo magnético cero presentado anteriormente.

Por otro lado, el límite $\nu \gg 1$ del potencial de EE en $z = 0$, es decir, el potencial en la posición del gas de electrones debe coincidir también con el resultado x -LSDA a campo cero. Para el potencial de EE podemos trabajar de manera similar a la energía, reescribiendo la Ec.(7.18)

$$v_x^\sigma(z = 0) = -\frac{2\sqrt{2}}{\pi r_s} [1 \pm p(\nu)]^{1/2} \bar{S}_2^{\nu\sigma}, \quad (7.29)$$

con $\bar{S}_2^{\nu\sigma} = (\pi/2\sqrt{2})S_2^{\nu\sigma}(0)/\nu_\sigma^{1/2}$. Usando ahora que (vea Apéndice A.3, Ec.(A.27))

$$\lim_{\nu_\sigma \rightarrow \infty} \bar{S}_2^{\nu\sigma} \rightarrow 1, \quad (7.30)$$

obtenemos

$$\lim_{\nu \rightarrow \infty} v_x^\sigma(z=0) = v_x^{\sigma, \text{LSDA}}, \quad (7.31)$$

la misma expresión que en el caso de campo cero. Estas dos cantidades, $\bar{S}_1^{\nu\sigma}$ y $\bar{S}_2^{\nu\sigma}$, pueden considerarse entonces como una especie de factor de "corrección" para ν finito, cuya inclusión "convierte" los resultados de x -LSDA hacia las expresiones de EE.

En la Fig. 7.9, mostramos cómo estos dos factores de "corrección" se aproximan al límite de x -LSDA a medida que aumenta ν para el caso del espín up. Mientras $\bar{S}_1^{\nu\uparrow}$ se aproxima a la unidad, en el límite de ν grande, con bastante rapidez, la aproximación de $\bar{S}_2^{\nu\uparrow}$ al límite es mucho más lento, lo que explica la persistencia de discontinuidades considerables en $v_x^\uparrow(0)$ en la Fig. 7.8, incluso para valores grandes de ν .

El salto abrupto en la expresión para Δv_x^σ (Ec.(7.25)) puede ser analizado también usando el desarrollo asintótico para $I_2(n)$ y $I_3(n)$ dado en el Apéndice A.3. Dado que $I_2([\nu_\sigma]) \sim ([\nu_\sigma])^{1/2}$ e $I_3([\nu_\sigma]) \sim \ln([\nu_\sigma])/([\nu_\sigma])^{1/2}$ para valores grandes de ν_σ , en el límite de campos pequeños Δv_x^σ decrece asintóticamente como $\ln([\nu_\sigma])/[\nu_\sigma]$, que tiende a cero cuando $[\nu_\sigma] \gg 1$. Esto es consistente con el hecho de que el potencial de intercambio x -LSDA, que corresponde al límite $\nu_\sigma \rightarrow \infty$, no tiene discontinuidades en los factores de llenado enteros.

Remarcamos una vez más la importancia de la inclusión del término η_x^σ , que proviene de la derivada implícita de la energía de intercambio con respecto a la densidad. Este término es el origen de la discontinuidad en la derivada (Ec.(7.3)) y sin él no podemos obtener el límite de campo magnético cero correcto.

7.2.2.3. Dependencia en z de $v_x^\sigma(z)$

Hasta este punto, solo hemos considerado el potencial de EE en la posición precisa del gas de electrones $z = 0$. Pero como ya hemos discutido, el presente procedimiento tiene la ventaja de que también proporciona de forma natural su dependencia en z .

La Fig. 7.10 muestra el potencial de EE obtenido en la Ec.(7.7), como una función de z , para varios valores de ν , acercándose a un factor de llenado par desde valores superiores (ν^+), o desde valores inferiores (ν^-). Algunas características interesantes de la Fig. 7.10 merecen ser comentadas: i) ofrece una perspectiva más completa sobre

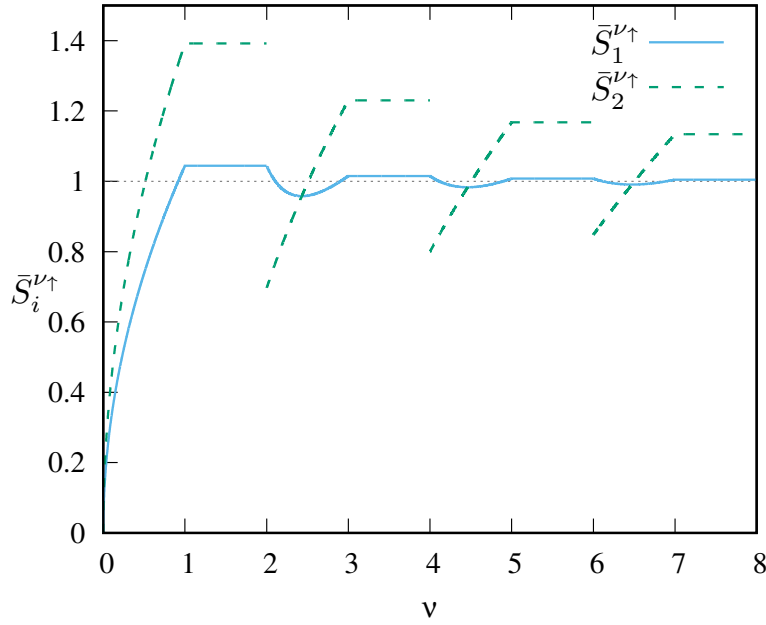


Figura 7.9: $\bar{S}_1^{\nu\uparrow}$ y $\bar{S}_2^{\nu\uparrow}$ como función del factor de llenado ν . El límite x -LSDA, $\nu \gg 1$, está representado por una línea horizontal $\bar{S}_i^{\nu\uparrow} = 1$. $\bar{S}_2^{\nu\uparrow}$ tiene saltos abruptos en los valores pares de ν .

cómo la discontinuidad del potencial de EE presente en cada entero ν en $z = 0$, y que se muestra en la Fig. 7.8; ii) mientras que los potenciales de EE correspondientes a ν^+ se aproximan al límite de campo cero desde arriba para valores crecientes de ν , los correspondientes a ν^- se aproximan al mismo límite desde abajo; y iii) en el límite asintótico $|z|/l_B \gg 1$, el potencial de EE se aproxima a un valor constante no negativo, que depende de la densidad y el campo magnético.

Este último punto no se obtiene directamente de la Fig. 7.10, pero se puede desarrollar analíticamente: el límite $|z|/l_B \gg 1$ para $v_x^\sigma(z)$ viene dado por el límite para $|z|/l_B \gg 1$ de $S_1^{\nu\sigma}(|z|)$ en la Ec.(7.7). Ahora, según (4.40), lo que importa para este límite es cómo se comportan las funciones $I_n^m(t)$ para valores grandes de su argumento. Inspeccionando la Ec.(4.7) vemos que para $|z - z'|/l_B \gg 1$ el integrando decrece rápidamente al aumentar x , por tanto su límite para valores pequeños de x representa la principal contribución a la integral. Considerando que $L_{n_<}^{n_>-n_<}(0) = n_>!/n_<!(n_> - n_<)!$, podemos aproximar

$$\begin{aligned}
 I_n^m \left(\frac{|z|}{l_B} \gg 1 \right) &\rightarrow \frac{n_>!}{n_<![(n_> - n_<)!]^2} \int_0^\infty \left(\frac{x^2}{2} \right)^{n_>-n_<} e^{-x|z|/l_B} dx \\
 &= \frac{n_>![2(n_> - n_<)]!}{n_<![(n_> - n_<)!]^2} \frac{1}{2^{(n_>-n_<)}} \left(\frac{l_B}{|z|} \right)^{1+2(n_>-n_<)} .
 \end{aligned} \tag{7.32}$$

De esta última expresión queda claro que la contribución dominante en $I_n^m(|z|/l_B \gg$

1) corresponde a $n_> = n_<$, entonces para $n = m$: $I_n^m(|z|/l_B \gg 1) \rightarrow I_n^n(|z|/l_B \gg 1) = l_B/|z|$. Dado que $\sum_n^{[\nu_\sigma]-1} I_n^n(|z|/l_B \gg 1) = [\nu_\sigma]$ obtenemos

$$v_x^\sigma(|z|/l_B \gg 1) \rightarrow C(r_s, \nu) - \frac{[\nu_\sigma] + p_\sigma^2}{z\nu_\sigma}, \quad (7.33)$$

donde

$$C(r_s, \nu) = \frac{1}{r_s \nu_\sigma} \sqrt{\frac{2}{\nu}} [S_1^{\nu_\sigma}(0) - \nu_\sigma S_2^{\nu_\sigma}(0)]. \quad (7.34)$$

Hemos chequeado numéricamente que el término $C(r_s, \nu)$ es siempre no-negativo; además, es igual a cero solo cuando $0 < \nu_\sigma < 1$. Es interesante notar que obtenemos el comportamiento asintótico universal $1/z$ [61] solo cuando $p_\sigma \rightarrow 0^+, 1^-$. En la Fig. 7.10 comparamos este comportamiento asintótico con el potencial de EE para $\nu = 2^+$ y se observa cómo se alcanza este límite asintótico para $|z|/l_B \sim 10$.

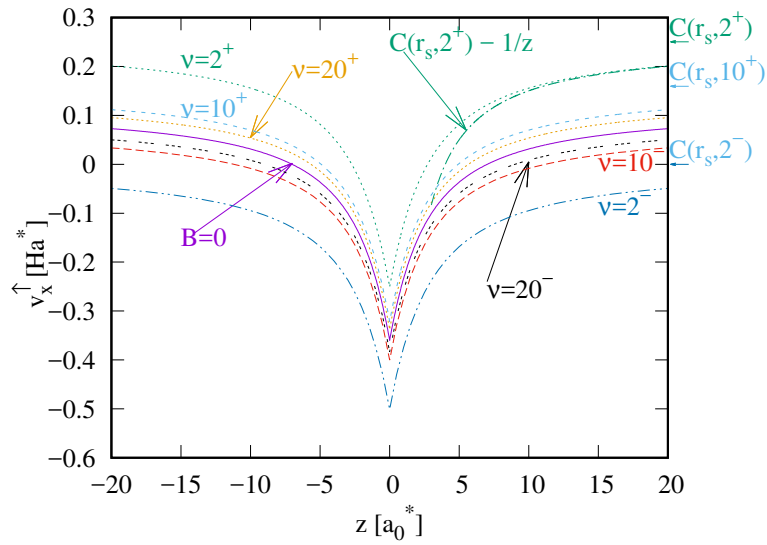


Figura 7.10: Potencial de intercambio exacto vs z para diferentes factores de llenado. El potencial de EE para el gas de electrones 2D no polarizado por espín a campo magnético cero también se muestra para comparación. El resultado para $\nu = 2^+$ se compara con el comportamiento asintótico esperado para z grande. Los límites asintóticos para el mismo potencial se dan en el eje vertical derecho y se marcan con flechas.

En esta metodología para la obtención del potencial de intercambio exacto aparece de manera natural su dependencia en z . Ésta puede resultar muy útil en el estudio de sistemas de 2DEG acoplados como sistemas bicapas y tricapas, de modo tal que la dependencia en z aparece como un término de intercambio inter-láminas, no considerado en la aproximación x -LSDA.

7.2.3. Conclusiones

Partiendo de un formalismo cuasi-2D general de intercambio exacto que describe un gas de electrones confinado en un pozo cuántico semiconductor en el régimen del efecto Hall cuántico entero, hemos obtenido su límite 2D estricto. Los correspondientes cálculos en 2D estrictos son mucho más simples que los asociados con el caso cuasi 2D, ya que en esta última situación los orbitales Kohn-Sham autoconsistentes que describen la física de sub-bandas deben obtenerse numéricamente. En cambio, en nuestra evaluación estricta en 2D, estos orbitales de Kohn-Sham se reemplazan por las funciones delta de Dirac, que restringen la dinámica de los electrones a un plano. A medida que avanza el llenado de los niveles de Landau emergentes, surgen dos características principales: i) la energía de EE se minimiza con una discontinuidad en la derivada en cada factor de llenado entero ν ; y ii) el potencial de EE muestra discontinuidades agudas en cada ν entero. Se debe enfatizar que estas diferencias importantes entre x -LSDA y EE en campos magnéticos finitos están presentes incluso cuando ambos se basan en la misma densidad, que permanece homogénea en el campo magnético finito. Más concretamente, las diferencias se deben al hecho de que la forma funcional de la energía EE incluye completamente el efecto del campo magnético a través de los orbitales Landau, mientras que la x -LSDA es una aproximación de campo cero, y por tanto sin niveles de Landau.

El presente trabajo sugiere, de manera muy natural, cómo ir más allá del x -LSDA 2D-estricto en el régimen de campo magnético fuerte de sistemas de electrones bidimensionales no homogéneos: reemplazar $v_x^{\sigma, \text{LSDA}}$ (7.24) por $v_x^\sigma(0)$ (7.29). En la aproximación x -LSDA estándar, la expresión de campo magnético nulo para el gas de electrones 2D homogéneo, $v_x^{\sigma, \text{LSDA}}$, se aplica a campo magnético finito y al caso no homogéneo haciendo la aproximación de densidad local, que equivale a los reemplazos $r_s \rightarrow r_s(\boldsymbol{\rho}) = 1/\sqrt{\pi n(\boldsymbol{\rho})}$ y $p \rightarrow p(\boldsymbol{\rho}) = (n_\uparrow(\boldsymbol{\rho}) - n_\downarrow(\boldsymbol{\rho}))/n(\boldsymbol{\rho})$. Bajo estas hipótesis, $v_x^{\sigma, \text{LSDA}}$ se convierte en un potencial dependiente de la posición $v_x^{\sigma, \text{LSDA}} \rightarrow v_x^{\sigma, \text{LSDA}}(\boldsymbol{\rho})$. Aquí sugerimos que un procedimiento más fundado será hacer la misma aproximación de densidad local, pero para nuestro potencial de EE: $v_x^\sigma(0) \rightarrow v_x^\sigma(\boldsymbol{\rho}, 0)$. La diferencia crucial entre $v_x^{\sigma, \text{LSDA}}(\boldsymbol{\rho})$ y $v_x^\sigma(\boldsymbol{\rho}, 0)$ es que mientras que en el primero el efecto del campo magnético entra *indirectamente* a través de los cambios inducidos por el campo en la polarización de espín, en $v_x^\sigma(\boldsymbol{\rho}, 0)$ el impacto del campo es directo, ya que la *forma funcional* del EE contiene completamente los efectos del campo magnético. En otras palabras, mientras $v_x^\sigma(\boldsymbol{\rho}, 0)$ es exacto en el caso del gas 2D uniforme en un campo magnético arbitrario, $v_x^{\sigma, \text{LSDA}}(\boldsymbol{\rho})$ solo es exacto para el caso del gas 2D homogéneo a campo magnético cero. La nueva aproximación para $v_x^\sigma(\boldsymbol{\rho}, 0)$ podría tener su aplicación inmediata al estudio de los estados de borde del IQHE (Avalos y Proetto, en curso), en muestras finitas.

Capítulo 8

Efectos de muchos cuerpos en mapas de resistividad

Una de las principales ventajas que ofrecen los sistemas de varias sub-bandas para el estudio del efecto Hall cuántico, es que aumentan la posibilidad de que ocurran cruces de niveles de Landau sin necesidad de inclinar el campo magnético respecto al q2DEG. En este Capítulo estudiaremos el comportamiento de la resistividad longitudinal ρ_{xx} en las regiones alrededor del cruce entre dos niveles de Landau en sistemas de varias sub-bandas. En una primera sección estudiaremos el sistema formado por tres pozos cuánticos semiconductores usando la aproximación LSDA para el potencial de intercambio y correlación. En la segunda parte del Capítulo estudiaremos el sistema de un pozo cuántico con dos sub-bandas como el mostrado en la Fig. 7.1. En esta ocasión, a modo de continuación del trabajo realizado en la referencia [31], utilizaremos el potencial de intercambio y correlación en la aproximación de intercambio exacto.

8.1. Sistema de tres pozos cuánticos en la aproximación LSDA

En esta sección estudiaremos el comportamiento de la resistividad longitudinal ρ_{xx} para un sistema formado por tres pozos cuánticos semiconductores de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ como se muestra en la Fig. 8.1(a). Este trabajo se ha realizado en colaboración con Pablo G. Bolcatto. Los parámetros utilizados en las simulaciones se corresponden al sistema experimental estudiado por Shinichi Amaha y colaboradores en Japón [98]. Para la simulación del sistema hemos usado el esquema iterativo presentado en la sección 4.1, con el potencial del intercambio en la aproximación LSDA. La contribución de correlación la incluimos a través de la parametrización PW92 [99] al igual que en la Ref. [31]. Presentaremos resultados para la resistividad

longitudinal en el plano $(\Delta p, B)$ ($\Delta p = p_L - p_R$, donde p_L, p_R son la densidades de las láminas de dopaje), de modo tal que se mantenga el factor de llenado ν constante, que es la situación experimental más relevante. Al mapa de colores que se origina al hacer el gráfico de resistividad en el espacio de dos parámetros se le conoce como *mapa de resistividad*. Debido a su relevancia experimental nos concentraremos en los casos donde $\nu = 3, 4$. El cálculo de ρ_{xx} se hará a través de la Ec.(2.19), y para los parámetros que caracterizan el ensanchamiento de los LLs consideraremos $\Gamma_{ext} = 170\sqrt{B [T]} meV < \Gamma = 200\sqrt{B [T]} meV$.

Cuando un q2DEG está en el régimen del IQHE, en general tenemos un número entero LL llenos, y la resistividad longitudinal $\rho_{xx} = 0$. A modo de ejemplo, la Fig. 8.2(a) muestra una situación típica a $\nu = 3$, donde tenemos tres LL llenos y el potencial químico cae en una región donde no hay estados extendidos. En este caso, considerando las expresiones (2.19) y (2.17) a temperaturas bajas ($k_B T \ll \Gamma$), obtenemos que $\rho_{xx} = 0$. Variando alguno de los parámetros externos del sistema $(\Delta p, B)$, de modo tal que se mantiene el factor de llenado ν constante, se puede obtener un cruce entre el último LL ocupado y el primero vacío (Fig.8.2(b)). En esta situación, el potencial químico puede caer en una zona donde hay estados extendidos y obtenemos una resistividad longitudinal $\rho_{xx} \neq 0$, puesto que $g_{ext}(\mu) \neq 0$. Es decir, como habíamos mencionado en el Capítulo 2, estos cruces se pueden identificar experimentalmente a través de los valores distintos de cero en las mediciones de resistividad. En estas situaciones decimos que hay una "ruptura" del IQHE.

Para entender la influencia de la interacción electrón-electrón en los mapas de resistividad agregaremos los diferentes términos de interacción de uno en uno. Las siguientes secciones están organizadas como sigue: en la sección 8.1.1 presentamos los resultados de los cálculos sin considerar la interacción electrón-electrón. En la sección 8.1.2.1 incluimos la interacción de Hartree y en la sección 8.1.2.2 incluimos finalmente la contribución de intercambio y correlación. Para entender de una manera más simple la física involucrada en estos mapas de resistividad, en la sección 8.1.3 se introduce un modelo 2D estricto, similar al usado en los Capítulos 5 y 6.

8.1.1. Sistema no interactuante

En este caso, el potencial de KS solo incluye al potencial externo, $v_{KS}^\sigma(z) = v_{ext}(z)$, donde $v_{ext}(z)$ contiene los efectos del potencial de barrera del semiconductor más el potencial electrostático producido por las láminas de dopaje tipo delta (ver Fig. 8.1(a)). En la Fig. 8.3 se muestran los resultados para el sistema no interactuante en las situaciones donde $\nu = 3, 4$. En la Fig. 8.3(b), donde $\nu = 4$, los dos cruces correspondientes a los campos magnéticos B_{c1} y B_{c2} (vea Fig. 8.1(b)) están tan cerca que no es posible distinguirlos. Esto se debe a que el desdoblamiento de Zeeman es mucho

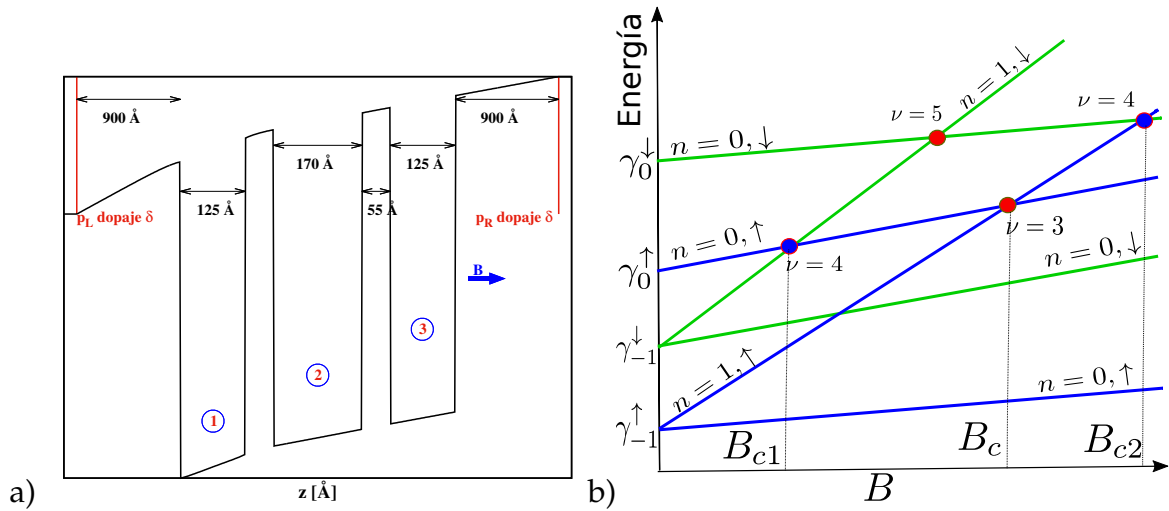


Figura 8.1: Vista esquemática de: a) los tres pozos semiconductores estudiados, y b) los diferentes cruces entre niveles de Landau, en la región de los cruces correspondiente a $\nu = 3$, $\nu = 4$, y $\nu = 5$. B_{c1} y B_{c2} son los campos magnéticos correspondientes a los dos cruces posibles cuando $\nu = 4$, mientras que B_c denota el campo magnético correspondiente al cruce cuando $\nu = 3$.

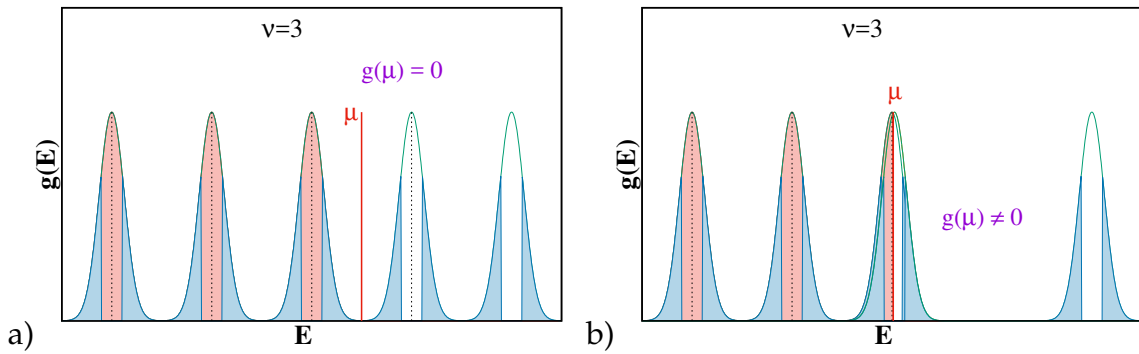


Figura 8.2: Vista esquemática de la densidad de estados en el IQHE a $\nu = 3$, cuando : a) no hay cruces de niveles en el potencial químico, b) hay cruce de niveles en el potencial químico.

más pequeño que la energía cinética. A modo de ejemplo, para el *GaAs* el desdoblamiento Zeeman a un campo magnético de 1 T es aproximadamente 0.01 meV, mientras que $\hbar\omega_c \simeq 1.73$ meV.

8.1.2. Sistema interactuante

8.1.2.1. Contribución de Hartree

En este caso, el potencial de KS está dado por $v_{KS}^g(z) = v_{ext}(z) + v_H(z)$, donde hemos agregado el término de Hartree $v_H(z) = -2\pi \int_{-\infty}^{\infty} |z - z'| \rho(z') dz'$. Al introducir la contribución de Hartree obtenemos los resultados presentes en la Fig. 8.4. Vemos que la inclusión del término Hartree aumenta considerablemente la región de mezcla entre los niveles de Landau (zona donde $\rho_{xx} \neq 0$). Este resultado concuerda con el obtenido en el Capítulo 6 utilizando la aproximación de Hartree-Fock, donde la interacción de Hartree favorecía la mezcla de los niveles de Landau (con-

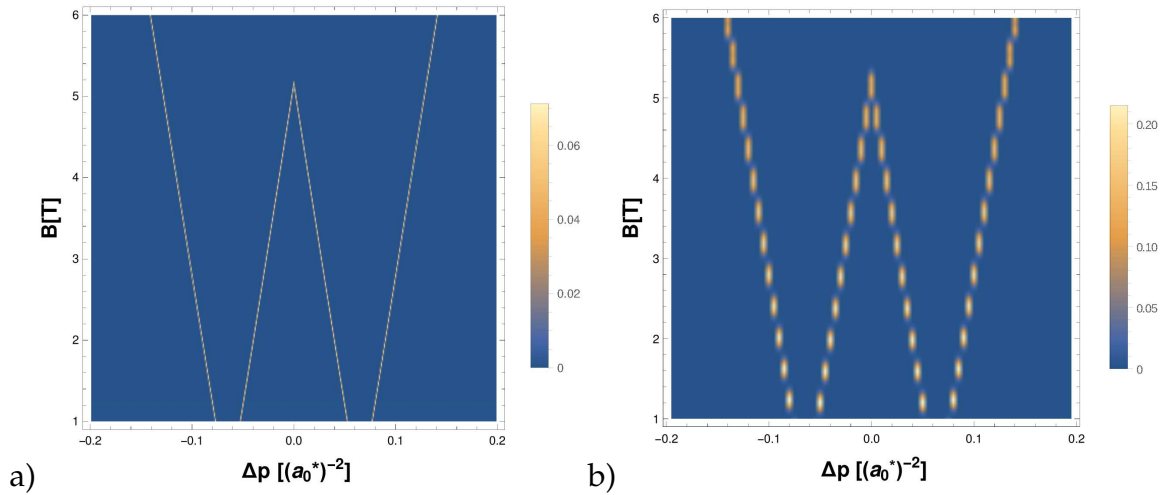


Figura 8.3: Mapas de resistividad no-interactuante para: a) $\nu = 3$ y b) $\nu = 4$, en el plano $(B [T], \Delta p [(a_0^*)^{-2}])$ ($\Delta p = p_L - p_R$). Para el caso donde $\nu = 3$ hemos reajustado el ancho Γ de los LLs de modo que sea menor que el desdoblamiento Zeeman.

figuraciones “easy-plane”, Capítulo 6). Note que hasta este punto aún no es posible distinguir entre los dos posibles cruces a $\nu = 4$. Como se ha mencionado, esto es debido a que el único término dependiente del espín, entre los incluidos hasta ahora, es el término de Zeeman, que para los campos magnéticos típicos es mucho más pequeño que los restantes. Esto provoca que en el caso $\nu = 3$ la resistividad no llega a ser estrictamente cero (vea Fig. 8.4(a)), producto de que el término de Zeeman no es suficientemente grande para separar estados con proyección de espín up y down. Un efecto importante de la interacción es que la región de cruce entre niveles se corre a campos magnéticos más bajos (seis veces menores), cercanos a los resultados experimentales [98].

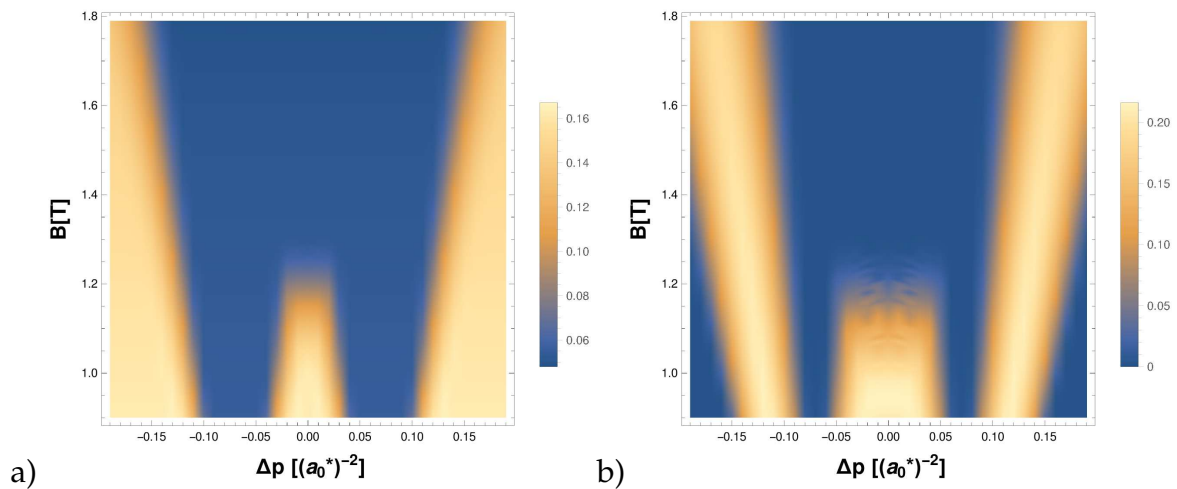


Figura 8.4: Mapas de resistividad en la aproximación de Hartree para: a) $\nu = 3$ y b) $\nu = 4$, en el plano $(B [T], \Delta p [(a_0^*)^{-2}])$.

8.1.2.2. Contribución de Hartree e intercambio y correlación

En este caso, el potencial de KS está dado por $v_{\text{KS}}^\sigma(z) = v_{\text{ext}}(z) + v_{\text{H}}(z) + v_{\text{xc}}^\sigma(z)$, donde hemos agregado el término de intercambio y correlación $v_{\text{xc}}^\sigma(z) = v_{\text{x}}^\sigma(z) + v_{\text{c}}^\sigma(z)$. El término de intercambio se considera en la aproximación LSDA, $v_{\text{x}}^\sigma(z) = -[6\rho_\sigma(z)/\pi]^{1/3}$, y para el potencial de correlación $v_{\text{c}}^\sigma(z)$ se utiliza la parametrización PW92 [99].

Introduciendo la interacción de intercambio y correlación obtenemos los resultados mostrados en la Fig. 8.5. La interacción de intercambio y correlación es fundamental para separar las dos líneas presentes a $\nu = 4$, que aparecen como una sola línea en el caso no-interactuante y en la aproximación de solo Hartree. Estos resultados teóricos están en muy buen acuerdo con los resultados experimentales de S. Amaha y colaboradores [98].

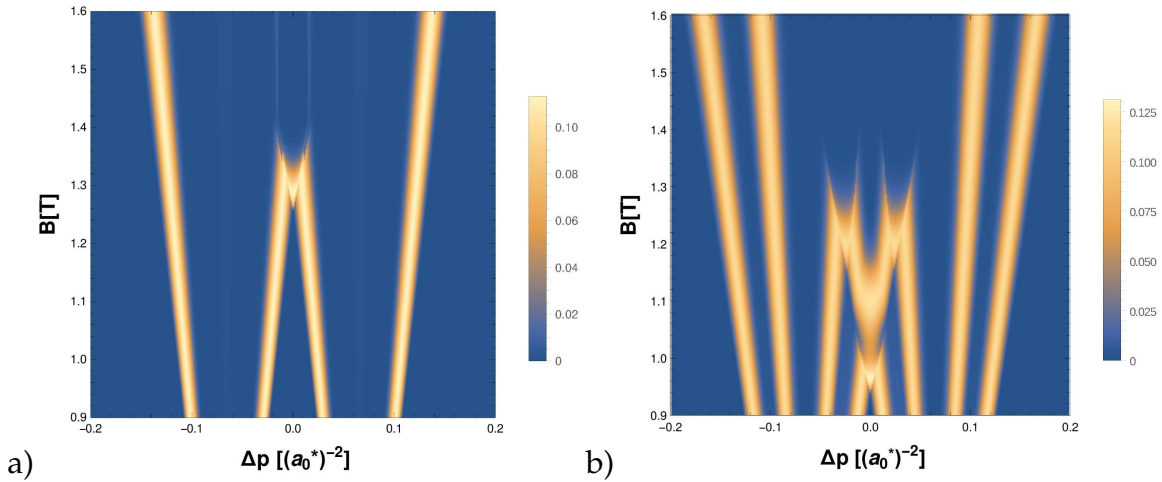


Figura 8.5: Mapas de resistividad para: a) $\nu = 3$ y b) $\nu = 4$, en el plano $(B [\text{T}], \Delta p [(a_0^*)^{-2}])$. El potencial de KS aquí incluye las contribuciones de Hartree, intercambio y correlación.

8.1.3. Modelo estrictamente 2D

Para aclarar la física involucrada en los "mapas de resistividad" anteriores generados a partir de un formalismo de LSDA, proponemos aquí un cálculo simplificado, utilizando un modelo 2D-estricto, convirtiendo el sistema de tres pozos cuánticos en un sistema de tres láminas separadas una distancia d . El modelo es muy similar al empleado en los Capítulos 5 y 6. Esencialmente equivale a reemplazar los autovalores de KS $\gamma_i^\sigma(\nu)$ en la Ec.(4.4) por los autovalores de una matriz "tight-binding" de 3×3

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_1^\sigma & -t & 0 \\ -t & \varepsilon_2^\sigma & -t \\ 0 & -t & \varepsilon_3^\sigma \end{pmatrix}, \quad (8.1)$$

donde t es la amplitud de "tunelaje" (hopping) para los electrones entre capas vecinas, ε_1^σ , ε_2^σ y ε_3^σ son las energías de "sitio" o de lámina definidas como

$$\begin{aligned} \varepsilon_1^\sigma &= 2\pi d [(n_1 - n_3) - \Delta p] + v_x(n_1^\sigma), \\ \varepsilon_2^\sigma &= \varepsilon_b + 2\pi d n_2 + v_x(n_2^\sigma), \\ \varepsilon_3^\sigma &= 2\pi d [(n_3 - n_1) + \Delta p] + v_x(n_3^\sigma), \end{aligned} \quad (8.2)$$

donde n_i^σ es la densidad de electrones con proyección de espín σ en la lámina i ($i = 1, 2, 3$), y $n_i = n_i^\uparrow + n_i^\downarrow$ es la densidad total de electrones en la lámina i . $\Delta p = p_L - p_R$ es la diferencia entre las densidades de las láminas de dopaje, ubicadas en ambos lados del sistema. El sistema cumple con la condición de neutralidad global de carga, $N = n_1 + n_2 + n_3 = p_L + p_R$, donde N representa la densidad bidimensional total. El modelo incluye las interacciones de Hartree¹ (término proporcional a d en las energías de sitio), el intercambio dentro de la capa a través de los potenciales de intercambio dependientes del espín para el gas bidimensional de electrones $v_x(n_i^\sigma) = -4\sqrt{n_i^\sigma/\pi}$ (Ec.(7.24)), y el hopping entre láminas a través de t . A través del término ε_b estamos considerando que el pozo central es distinto de los dos laterales. Cabe aclarar que en este caso no estamos incluyendo términos de correlación, cuyo efecto en el modelo cuasi-2D de la sección anterior era principalmente estabilizar numéricamente el sistema y mejorar el proceso de convergencia.

Como veremos, esta aproximación 2D estricta solo conduce a pequeñas discrepancias cuantitativas en comparación con los cálculos de LSDA más elaborados. Ambos cálculos pueden hacerse coincidir ajustando los parámetros ε_b , t . Para ello, establecemos una correspondencia entre el modelo tricapa no interactuante de la Ec.(8.1) y el triple pozo cuántico no interactuante mostrado en la Fig. 8.1. Como primera aproximación, tomamos la distancia d entre capas como la distancia entre los centros de pozos cuánticos consecutivos. Luego, calculamos numéricamente la diferencia entre la energía de la primera sub-banda y la sub-banda del estado fundamental en el triple pozo cuántico para los valores de Δp en el intervalo $[0, 0.2]$ y finalmente ajustamos los parámetros ε_b , t . Los valores obtenidos son $d = 1.99 a_0^*$,

¹El potencial de Hartree se puede obtener a través de la expresión $v_H(z) = -2\pi \int_{-\infty}^{\infty} |z-z'| \rho(z') dz'$, considerando $\rho(z) = n_1 \delta(z+d) + n_2 \delta(z) + n_3 \delta(z-d)$ o calculando el potencial electrostático en cada una de las láminas.

$\varepsilon_b = -0.83 Ha^*$ y $t = 0.016 Ha^*$. Para explotar las soluciones analíticas para este modelo, consideraremos en las siguientes dos subsecciones el caso de hopping cero ($t = 0$), que parece razonable ya que de acuerdo a la parametrización $t/\varepsilon_b \ll 1$. Cuando $t = 0$ las energías de lámina y sub-banda son equivalentes, es decir, la energía de la sub-banda fundamental es la de la lámina con menor energía, y la energía de la primera sub-banda excitada será la de la segunda lámina con menor energía.

8.1.3.1. Mapa de resistividad a $\nu = 3$

Cuando $\nu = 3$ el cruce es entre LLs con números cuánticos (ξ, n, σ) iguales a $(-1, 1, \uparrow)$ y $(0, 0, \uparrow)$ (vea Fig. 8.1(b)). En el punto de intersección se cumple que $\varepsilon_{-1,1}^\uparrow(\nu = 3) = \varepsilon_{0,0}^\uparrow(\nu = 3)$, es decir, según la Ec.(4.4)

$$\gamma_{-1}^\uparrow + \frac{3}{2}\hbar\omega_c - \frac{1}{2}|g|\mu_B B = \gamma_0^\uparrow + \frac{1}{2}\hbar\omega_c - \frac{1}{2}|g|\mu_B B, \quad (8.3)$$

que después de simplificar se convierte en $\hbar\omega_c = \gamma_0^\uparrow - \gamma_{-1}^\uparrow$ [100]. Cuando $t = 0$, γ_{-1}^\uparrow y γ_0^\uparrow son las energías de la sub-banda fundamental y primera excitada, respectivamente, entre las enumeradas en (8.2). Para $|\Delta p| < -\varepsilon_b/(2\pi d)$, no es difícil ver en (8.2) que en la configuración del estado fundamental todos los electrones están en la lámina central para campos magnéticos bajos: $n_2 = N$, $n_1 = n_3 = 0$. Además, el primer estado excitado (vacío en este caso) es ε_1^\uparrow para $\Delta p \rightarrow 0^+$ y ε_3^\uparrow para $\Delta p \rightarrow 0^-$. Luego, al aumentar el campo magnético, un LL desde la sub-banda fundamental cruza un LL de la primera sub-banda excitada, y en el punto de intersección ($\varepsilon_{-1,1}^\uparrow(\nu = 3) = \varepsilon_{0,0}^\uparrow(\nu = 3) = \mu$) una fracción de los electrones (que estimamos como la mitad de la degeneración de un LL) se ha transferido a la primera sub-banda excitada (lámina 1 para $\Delta p > 0$ y lámina 3 para $\Delta p < 0$).² Por ejemplo, si $\Delta p > 0$ tenemos: $n_2 = 5N/6$, $n_1 = N/6$, $n_3 = 0$.

En consecuencia, a partir de (8.2) obtenemos que $\gamma_{-1}^\uparrow \simeq \varepsilon_2^\uparrow = \varepsilon_b + 2\pi d(5N/6) + v_x(N/2)$, mientras $\gamma_0^\uparrow \simeq 2\pi d(N/6 - |\Delta p|) + v_x(N/6)$.

Reemplazando en la condición de cruce $\hbar\omega_c = \gamma_0^\uparrow - \gamma_{-1}^\uparrow$, teniendo en cuenta que se cumple $\nu = N/N_\phi = N\Phi_0/B = 3$ y resolviendo para $B_c(\nu, \Delta p)$, llegamos a la ecuación

$$B_c(3, \Delta p) = \left(\frac{\sqrt{\frac{2\alpha_1}{\pi}}(\sqrt{3}-1) + \sqrt{\frac{2\alpha_1}{\pi}(\sqrt{3}-1)^2 - (\alpha + 4\pi\alpha_1 d)(\varepsilon_b + 2\pi d|\Delta p|)}}{(\alpha + 4\pi\alpha_1 d)} \right)^2, \quad (8.4)$$

donde $B_c(3, \Delta p)$ es el campo magnético donde ocurre el cruce entre niveles cuando

²Esta idea simple no es general, puede que ambos niveles nunca compartan la mitad de los electrones. Un ejemplo son los cruces tipo "easy-axis" del Capítulo 6.

$\nu = 3$ y el bias es Δp . $\alpha = \hbar\omega_c/B = \hbar e/m^*c$ y $\alpha_1 = (a_0^*)^2/\Phi_0$. Es interesante notar que $B_c(3, \Delta p)$ disminuye a medida que aumenta $|\Delta p|$ (pendiente negativa en $|\Delta p|$), como ocurre en el cálculo más complejo en la aproximación LSDA (Fig. 8.5(a)). También vale la pena señalar que el caso no interactuante (sin interacción Hartree e intercambio y correlación) equivale a considerar $\alpha_1 = 0$ (que es equivalente a "apagar" los términos de interacción), entonces $B_c(3, \Delta p) = -(\varepsilon_b + 2\pi d|\Delta p|)/\alpha$. Como consecuencia, los valores de $B_c(3, \Delta p)$ para el caso sin interacción son aproximadamente seis veces mayores que los que incluyen la interacción, en gran desacuerdo con la evidencia experimental y teórica disponible. En otras palabras, los efectos de apantallamiento mediados por Hartree son cruciales para la comprensión de la física más allá de estos mapas de resistividad. Por otra parte, la interacción de intercambio es importante para "distinguir" entre estados con proyecciones de espín diferentes, por lo que su efecto es más notable en las situaciones donde $\nu = 4$, donde los cruces son entre LLs con espín distinto.

Para $|\Delta p| > -\varepsilon_b/(2\pi d)$ un análisis análogo es factible, cuando el campo magnético es pequeño ($B \ll B_c(3, \Delta p)$), todos los electrones están ubicados en la lámina 1: $n_1 = N$, $n_2 = n_3 = 0$. Procediendo como antes, podemos estimar que en el punto de cruce $\gamma_{-1}^\dagger \simeq \varepsilon_1^\dagger = 2\pi d(5N/6 - \Delta p) + v_x(N/2)$ y $\gamma_0^\dagger \simeq \varepsilon_2^\dagger = \varepsilon_b + 2\pi d(N/6) + v_x(N/6)$. Reemplazando en la ecuación de cruce $\hbar\omega_c = \gamma_0^\dagger - \gamma_{-1}^\dagger$, usando $N = 3B_c(3, \Delta p)/\Phi_0$, y resolviendo para B_c , obtenemos una ecuación similar a (8.4), pero sin el segundo signo menos dentro de la raíz cuadrada. Ahora a medida que aumentamos Δp , el campo magnético $B_c(3, \Delta p)$ también aumenta (pendiente positiva en Δp), como se observa en los resultados de LSDA (Fig. 8.5(a)). Para $\Delta p < 0$, la lámina 3 desempeña el papel de la lámina 1 y obtenemos un resultado similar al anterior pero con signo opuesto en Δp . Podemos resumir el resultado general para el caso $\nu = 3$ en la siguiente expresión:

$$B_c(3, \Delta p) = \left(\frac{\sqrt{\frac{2\alpha_1}{\pi}(\sqrt{3}-1)} + \sqrt{\frac{2\alpha_1}{\pi}(\sqrt{3}-1)^2 + (\alpha + 4\pi\alpha_1 d)|\varepsilon_b + 2\pi d|\Delta p|}}{(\alpha + 4\pi\alpha_1 d)} \right)^2 \quad (8.5)$$

Cabe aclarar que la Ec.(8.5) es válida para todos los valores de Δp , y contiene como caso particular la Ec.(8.4).

En la Fig. 8.6(a) se muestra la comparación de estos resultados con los mapas de resistividad mostrados anteriormente en la aproximación LSDA.

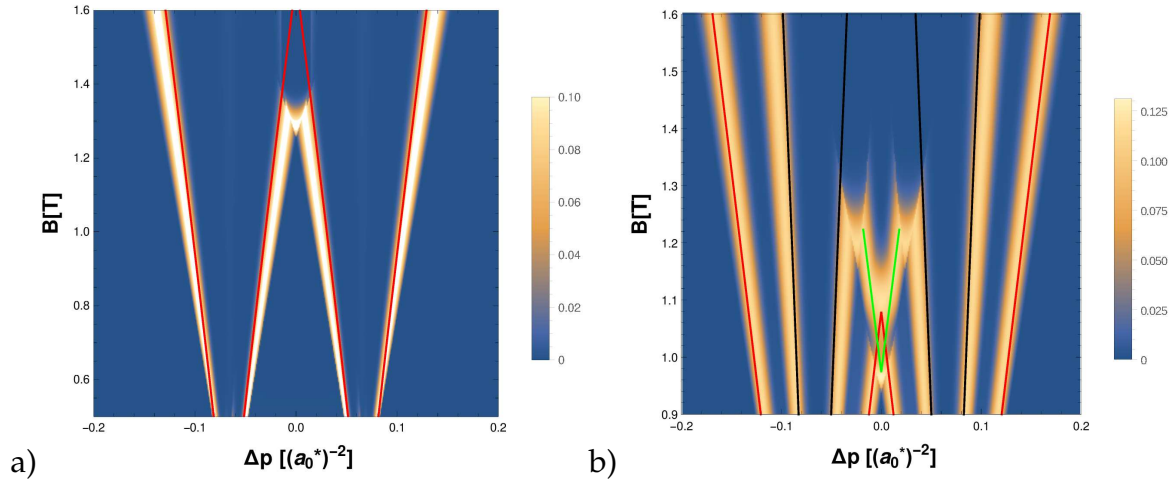


Figura 8.6: Mapas de resistividad para a) $\nu = 3$, b) $\nu = 4$, en el plano $(B [\text{T}], \Delta p [(a_0^*)^{-2}])$. Comparación con el modelo 2D estricto a $t = 0$. En a) la línea roja corresponde a la Ec.(8.5), mientras que en b) las líneas roja, negra y verde corresponden a las Ecs.(8.8, 8.10 y 8.11), respectivamente.

8.1.3.2. Mapa de resistividad a $\nu = 4$

Para $\nu = 4$ son posibles dos cruces diferentes (vea Fig. 8.1(b)). El primero, a campos magnéticos inferiores (B_{c1}) corresponde a dos LLs con números cuánticos $(-1, 1, \downarrow)$ y $(0, 0, \uparrow)$. La diferencia principal con el caso $\nu = 3$ ya está clara: el cruce incluye un cambio de espín, dando el primer indicio de una mayor influencia del término de intercambio en este caso. El segundo punto de cruce a $\nu = 4$ (B_{c2}) es entre LLs con números cuánticos $(-1, 1, \uparrow)$ y $(0, 0, \downarrow)$. Para un voltaje aplicado o "bias" dado Δp , llamamos $B_{c1}(4, \Delta p)$ al campo magnético donde ocurre el primer cruce y $B_{c2}(4, \Delta p)$ para el segundo cruce (vea Fig. 8.1(b)).

Para comprender el comportamiento del sistema, mostramos en la Tabla 8.1 los perfiles de ocupación estimados para diferentes combinaciones de $\Delta p, B$; considerando, por simplicidad, un bias no-negativo. El perfil para bias negativo se puede obtener simplemente intercambiando $n_{1\sigma}$ y $n_{3\sigma}$. Por ejemplo, para $B \ll B_{c1}$ y $\Delta p > -\varepsilon_b/2\pi d$, según la Tabla 8.1 el perfil de ocupación está dado por $n_{1\uparrow} = n_{1\downarrow} = p/2$, $n_2 = n_3 = 0$. Si cambiamos el signo del bias, para estos mismo valores de campo magnético, intercambiando $n_{1\uparrow} \longleftrightarrow n_{3\uparrow}$ y $n_{1\downarrow} \longleftrightarrow n_{3\downarrow}$, obtenemos la configuración equivalente $n_{3\uparrow} = n_{3\downarrow} = p/2$, $n_2 = n_1 = 0$. Para estimar las ocupaciones de las láminas hemos usado los resultados numéricos para el sistema de tres pozos cuánticos en la aproximación LSDA, haciendo una correspondencia entre la cantidad de electrones en el pozo i -ésimo y la lámina i -ésima ($i = 1, 2, 3$). La cantidad de electrones en el pozo i -ésimo se aproxima por la integral de la densidad a lo largo de la extensión del pozo.

Para campos magnéticos bajos, $B \ll B_{c1}$, solo hay una sub-banda ocupada, es decir, todos los electrones están en la sub-banda del estado fundamental en una configuración no polarizada en espín. A medida que aumentamos el campo magné-

	$\Delta p \sim 0$	$\Delta p^* < \Delta p < -\varepsilon_b/2\pi d$	$\Delta p > -\varepsilon_b/2\pi d$
$B \ll B_{c1}$	$n_{2\uparrow} = n_{2\downarrow} = N/2$ $n_1 = n_3 = 0$	$n_{2\uparrow} = n_{2\downarrow} = N/2$ $n_1 = n_3 = 0$	$n_{1\uparrow} = n_{1\downarrow} = N/2$ $n_2 = n_3 = 0$
$B = B_{c1}$	$n_{2\uparrow} = N/2, n_{2\downarrow} = 3N/8$ $n_{1\uparrow} = N/8$ $n_{1\downarrow} = n_3 = 0$	$n_{2\uparrow} = N/2, n_{2\downarrow} = 3N/8$ $n_{1\uparrow} = N/8$ $n_{1\downarrow} = n_3 = 0$	$n_{1\uparrow} = N/2, n_{1\downarrow} = 3N/8$ $n_{2\uparrow} = N/8$ $n_{2\downarrow} = n_3 = 0$
$B_{c1} \ll B \ll B_{c2}$	$n_{2\uparrow} = N/2, n_{2\downarrow} = N/4$ $n_{1\uparrow} = N/4$ $n_{1\downarrow} = n_3 = 0$	$n_{2\uparrow} = N/2, n_{2\downarrow} = N/4$ $n_{1\uparrow} = N/4$ $n_{1\downarrow} = n_3 = 0$	$n_{1\uparrow} = N/2, n_{1\downarrow} = N/4$ $n_{2\uparrow} = N/4$ $n_{2\downarrow} = n_3 = 0$
$B = B_{c2}$	$n_{2\uparrow} = 3N/8, n_{2\downarrow} = N/4$ $n_{1\uparrow} = N/4, n_{3\downarrow} = N/8$ $n_{1\downarrow} = n_{3\uparrow} = 0$	$n_{2\uparrow} = 3N/8, n_{2\downarrow} = N/4$ $n_{1\uparrow} = N/4, n_{1\downarrow} = N/8$ $n_3 = 0$	$n_{1\uparrow} = 3N/8, n_{1\downarrow} = N/4$ $n_{2\uparrow} = N/4, n_{2\downarrow} = N/8$ $n_3 = 0$
$B \gg B_{c2}$	$n_{2\uparrow} = n_{2\downarrow} = n_{1\uparrow} =$ $n_{3\downarrow} = N/4$ $n_{1\downarrow} = n_{3\uparrow} = 0$	$n_{2\uparrow} = n_{2\downarrow} = n_{1\uparrow} =$ $n_{1\downarrow} = N/4$ $n_3 = 0$	$n_{1\uparrow} = n_{1\downarrow} = n_{2\uparrow} =$ $n_{2\downarrow} = N/4$ $n_3 = 0$

Tabla 8.1: Configuraciones estimadas para las ocupaciones de las láminas cuando $\nu = 4$. Δp^* es un parámetro que caracteriza el semi-ancho de la zona alrededor de bias cero donde aparecen las configuraciones tipo antiferromagnéticas.

tico, los niveles $(-1,1,\downarrow)$ y $(0,0,\uparrow)$ se acercan, y en cierto B comienza la transferencia de carga desde el nivel de energía baja. Cuando $B = B_{c1}$ los dos LLs coinciden en energía (Fig. 8.1(b)) y ambos están medio llenos. Aumentando B , el sistema deja la región de cruce y luego $B_{c1} \ll B \ll B_{c2}$, en esta región el sistema tiene cuatro LLs llenos y una polarización de espín $p = (n_{\uparrow} - n_{\downarrow})/(n_{\uparrow} + n_{\downarrow}) = 1/2$. Si continuamos aumentando B , los LLs $(-1,1,\uparrow)$ y $(0,0,\downarrow)$ se aproximan entre sí, y de manera análoga al cruce anterior comienza una transferencia de carga. Cuando $B = B_{c2}$ los dos LLs coinciden (Fig. 8.1(b)) y ambos están medio llenos. Al aumentar B , el sistema deja de nuevo la región de cruce y se vuelve no polarizado en espín nuevamente.

En el primer punto de cruce, que define $B_{c1}(4, \Delta p)$, $\varepsilon_{-1,1}^{\downarrow}(\nu = 4) = \varepsilon_{0,0}^{\uparrow}(\nu = 4)$, lo que nos lleva a

$$\gamma_{-1}^{\downarrow} + \frac{3}{2}\hbar\omega_c + \frac{1}{2}|g|\mu_B B_{c1} = \gamma_0^{\uparrow} + \frac{1}{2}\hbar\omega_c - \frac{1}{2}|g|\mu_B B_{c1}. \quad (8.6)$$

Simplificando, obtenemos

$$\hbar\omega_c + |g|\mu_B B_{c1} = \gamma_0^{\uparrow} - \gamma_{-1}^{\downarrow}. \quad (8.7)$$

La única diferencia con la ecuación de cruce para $\nu = 3$ es que ahora tenemos el término adicional $|g|\mu_B B$, como consecuencia de la energía de Zeeman asociada a la diferencia de espín. Como se hizo anteriormente, solo queda encontrar las expresiones adecuadas para γ_{-1}^{\downarrow} y γ_0^{\uparrow} en los diferentes regímenes de $|\Delta p|$. Para este primer

punto de cruce, se aplican las mismas hipótesis que para $\nu = 3$ con respecto a las configuraciones fundamental y primera excitada, y al usar el perfil de ocupación de la Tabla 8.1 para $B = B_{c1}$, se llega fácilmente a la siguiente expresión para $B_{c1}(4, \Delta p)$

$$B_{c1}(4, \Delta p) = \left(\frac{\sqrt{\frac{2\alpha_1}{\pi}}(\sqrt{3}-1) + \sqrt{\frac{2\alpha_1}{\pi}(\sqrt{3}-1)^2 + (\alpha + 6\pi\alpha_1 d)|\varepsilon_b + 2\pi d|\Delta p|}}{(\alpha + 6\pi\alpha_1 d)} \right)^2 \quad (8.8)$$

donde $\alpha = \hbar\omega_c/B + |g|\mu_B$. Para el segundo cruce, que define $B_{c2}(4, \Delta p)$, obtenemos la ecuación

$$\hbar\omega_c - |g|\mu_B B_{c2} = \gamma_0^\downarrow - \gamma_{-1}^\uparrow. \quad (8.9)$$

Las dos ecuaciones de cruce para $\nu = 4$ difieren en los números cuánticos de espín, lo que conduce a diferentes contribuciones de Zeeman. Por otra parte la diferencia entre los perfiles de ocupación conduce a diferencias en la energía de Hartree e intercambio. Haciendo las mismas hipótesis que arriba y utilizando nuevamente el perfil de ocupación de la Tabla 8.1 para $B = B_{c2}$, no es difícil llegar a la expresión

$$B_{c2}(4, \Delta p) = \left(\frac{\sqrt{\frac{2\alpha_1}{\pi}}(\sqrt{3}-1) + \sqrt{\frac{2\alpha_1}{\pi}(\sqrt{3}-1)^2 + 4(\alpha + 2\pi\alpha_1 d)|\varepsilon_b + 2\pi d|\Delta p|}}{2(\alpha + 2\pi\alpha_1 d)} \right)^2, \quad (8.10)$$

donde $\alpha = \hbar e/m^*c - |g|\mu_B$. Dado que $|g|\mu_B B \ll \hbar\omega_c$ para el *GaAs*, tomamos $\alpha = \hbar e/m^*c$ en todos los casos.

Con respecto a la característica en forma de "M", aún sin explicación para $|\Delta p|$ pequeño en la Fig. 8.5(b), ésta es provocada por un sutil efecto de la interacción de Hartree en una configuración inducida por intercambio. Cuando $\Delta p = 0$, el sistema es simétrico con respecto a la lámina central, en este caso $n_1 = n_3$. Ahora bien, si se aumenta el bias, es conveniente (energéticamente) ocupar la lámina 1 (ver la expresión para ε_1^σ en la Ec.(8.2)). Para mantener la energía de sitio de la lámina 3 mayor que la de la lámina 1, una pequeña fracción de carga se mueve a la lámina 1, de manera que cumpla la condición $n_1 - n_3 < \Delta p$.

En otras palabras, a una densidad de electrones suficientemente alta (que favorece a la interacción de Hartree), la disminución en la energía de Hartree puede más que compensar el aumento de la energía de sitio en la lámina 3 relacionada con el bias. Es por ello que los electrones en el LL $(0,0,\downarrow)$ estarán en la lámina 3, en lugar de la 1 como en los casos anteriores. Entonces, teniendo en cuenta que $\gamma_0^\downarrow = \varepsilon_3^\downarrow$ en la Ec.(8.9) y usando las ocupaciones de la Tabla 8.1 para $B = B_{c2}$ y $\Delta p \sim 0$, se obtiene

la siguiente expresión:

$$B_{c2}^*(4, \Delta p) = \left(\frac{\sqrt{\frac{2\alpha_1}{\pi}}(\sqrt{3}-1) + \sqrt{\frac{2\alpha_1}{\pi}(\sqrt{3}-1)^2 + 4(\alpha + 6\pi\alpha_1 d)|\varepsilon_b - 2\pi d|\Delta p|}}{2(\alpha + 6\pi\alpha_1 d)} \right)^2, \quad (8.11)$$

donde $B_{c2}^*(4, \Delta p)$ es el campo magnético donde ocurre el segundo cruce alrededor de $\Delta p = 0$. De esta manera podemos explicar naturalmente el cambio en el signo de la pendiente en la Fig. 8.5(b) alrededor de $|\Delta p| \rightarrow 0$, que explica la característica relacionada con la "M". Para describir esta configuración de tres capas cerca de bias cero, debemos considerar la contribución de intercambio. Su efecto es interesante ya que estabiliza una configuración tipo anti-ferro en la que las polarizaciones de espín de las lámina 1 y 3 son opuestas. Esta configuración se obtiene numéricamente a partir de los cálculos en la aproximación DFT-LSDA y está representada en los perfiles de ocupación de la Tabla 8.1. En estas configuraciones el pozo central tiende a estar no polarizado en espín mientras los dos laterales tienen polarizaciones de espín opuestas. Como mencionamos, este efecto es inducido por el término de intercambio, que se optimiza si se separan los espines entre las láminas laterales.

Por supuesto, aumentando aún más el bias $|\Delta p|$, éste será lo suficientemente grande como para obligar a los electrones a moverse de la lámina central a la izquierda si Δp es positivo o a la lámina derecha si Δp es negativo. Recuperamos entonces, para un bias finito dado, las mismas pendientes negativas que para el caso $\nu = 3$ y para el primer cruce, a densidades más bajas, para $\nu = 4$. Este análisis cualitativo del mapa de resistividad para $\nu = 4$ está más allá del modelo 2D estricto, pero como se discutió anteriormente, las características generales se obtienen fácilmente a partir de algunas consideraciones simples y motivadas físicamente. La Fig. 8.6(b) muestra la comparación entre el mapa de resistividad en $\nu = 4$ y el cruce de niveles de Landau en un sistemas de tres láminas 2D estrictas. Mostramos en diferentes colores las ramas correspondientes a la Ec.(8.8) (rojo), la Ec.(8.10) (negro) y la Ec.(8.11) (verde).

Nuestros estudios en este sistema están motivados por los experimentos en sistemas de tres pozos cuánticos semiconductores realizados por investigadores de Japón [98]. Los resultados obtenidos presentan gran semejanza con los experimentos. En estos momentos estamos trabajando en la elaboración de un trabajo conjunto (teórico-experimental) para su posterior publicación.

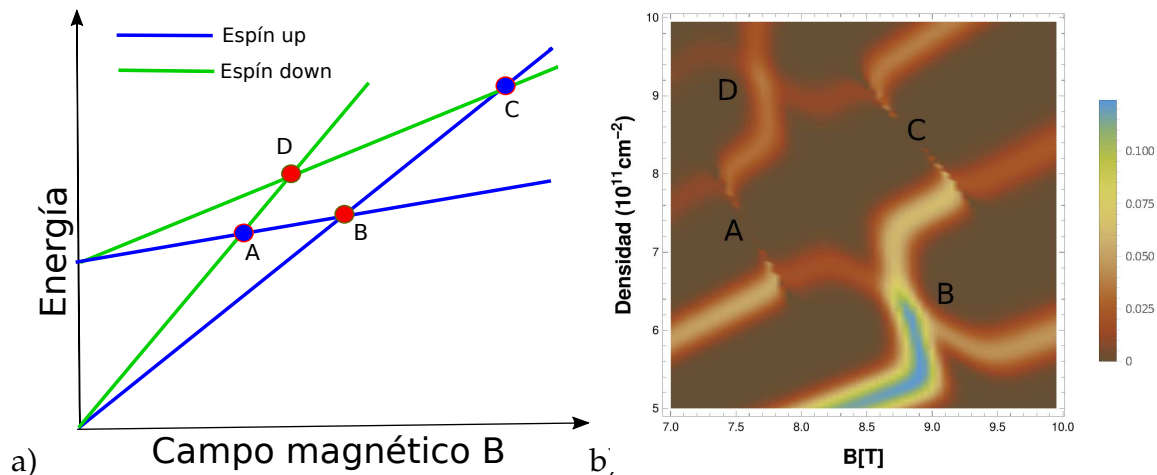


Figura 8.7: a) Vista esquemática de los diferentes cruces entre niveles de Landau para un solo pozo cuántico. b) Resistividad longitudinal ρ_{xx} en el plano densidad vs campo magnético. Aproximación LSDA.

8.1.3.3. Conclusiones

Se ha demostrado que la inclusión de la interacción (Hartree + xc) en el régimen del efecto Hall cuántico entero modifica considerablemente los mapas de resistividad de sistemas de tres pozos cuánticos semiconductores. Además, se ha utilizado un modelo simple, capaz de explicar cualitativamente la topología de estos mapas. En la región de bias pequeño (región de más simetría) se obtuvo una configuración tipo antiferromagnética, inducida por el intercambio. Cuando el bias es nulo, esta configuración manifiesta una ruptura espontánea de simetría, ya que presenta menos simetría que el sistema.

8.2. Un pozo cuántico con dos sub-bandas ocupadas

Como habíamos mencionado anteriormente, en un pozo cuántico con dos sub-bandas, los niveles de Landau pueden cruzarse sin necesidad de inclinar el campo magnético respecto a la dirección de crecimiento. Estos cruces pueden formar ciclos cerrados, como se muestra en la Fig. 8.7(a). Dichos ciclos se manifiestan en la resistividad como estructuras tipo anillo (vea Fig. 8.7(b)), que se pueden “destruir” bajando la temperatura [8].

En la referencia [31], Gerson J. Ferreira y colaboradores investigaron desde el punto de vista teórico estas estructuras tipo anillos formadas en los mapas de resistividad longitudinal ρ_{xx} (en el plano campo magnético-densidad) para un pozo cuántico semiconductor con dos sub-bandas. Para ello usan el formalismo de la DFT dentro de la aproximación LSDA. Sus hallazgos teóricos son consistentes con los resultados experimentales [9, 10] para el caso de cruces entre LLs de espín opuesto

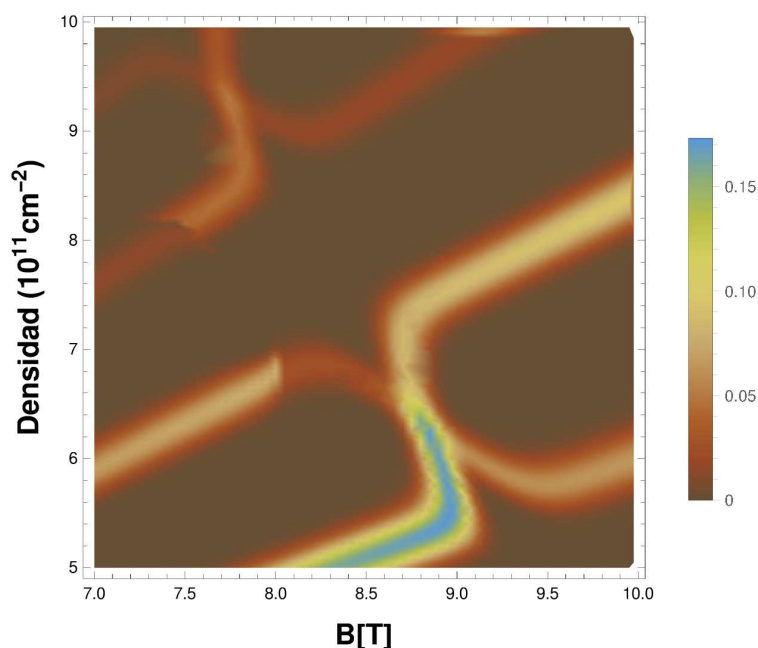


Figura 8.8: Resistividad longitudinal ρ_{xx} en la aproximación KLI en el plano densidad vs campo magnético. Aproximación KLI.

(zonas A y C en la Fig. 8.7(c)), pero no para el caso de cruces entre LLs del mismo espín (zonas B y D en la Fig. 8.7(a)). Para este último caso, los autores sugirieron que puede ser necesario un tratamiento más preciso que la aproximación de densidad de espín local (LSDA) para la funcional de intercambio. En particular sugieren el uso del formalismo de intercambio exacto como el usado en sistemas similares a campo cero por Rigamonti y Proetto en la referencia [60]. A partir de esto, se inició una colaboración con Gerson J. Ferreira con el objetivo de explicar la ruptura de los anillos en los cruces de niveles con el mismo espín.

En la Fig. 8.8 se muestra el resultado de la resistividad usando el potencial de intercambio en la aproximación KLI. Como se observa, la inclusión del intercambio exacto (en la aproximación KLI) no corrige el problema de la aproximación LSDA cuando el cruce es entre niveles con el mismo espín. Aunque comparando la Fig. 8.7(b) y la Fig. 8.8 se ve que la ruptura obtenida usando la aproximación de KLI es más robusta que la correspondiente en LSDA. Cálculos preliminares usando intercambio exacto (sin aproximación), en esta zona, tampoco muestran una ruptura en los puntos B y C de la Fig. 8.7(b). Es decir, el uso de un potencial de intercambio aproximado no parece ser la causa de la diferencia con los resultados experimentales. Sin embargo, para estar más seguros de esto último nos faltaría incluir el potencial de correlación en alguna aproximación compatible con el intercambio exacto y entonces analizar la resistividad en estas regiones. Esto está justificado en el hecho de que cuando dos LLs se cruzan en el potencial químico ambos están semilenos, entonces los efectos de la correlación pueden ser importantes.

Otros efectos que pueden provocar esta diferencia y que no estamos considerando son la interacción espín-órbita, la no-uniformidad del sistema en el plano xy , la modificación de la densidad de estados con la interacción electrón-electrón y la no-colinealidad de los espines con la dirección de campo magnético. Actualmente estamos trabajando en esta última línea, también en colaboración con Gerson J. Ferreira. Para considerar espines no-colineales, estamos trabajando en el formalismo de DFT no colineal (non-colinear DFT), donde el espín deja de ser un buen número cuántico [101, 102].

Conclusiones y perspectivas

En una *primera etapa* de esta tesis, a modo de continuación de un trabajo previo [66], se realizó un estudio detallado de las diferentes configuraciones del estado fundamental en un sistema de tres gases de electrones confinados en pozos cuánticos semiconductores y acoplados en el marco de una aproximación de Hartree-Fock variacional. Se modeló el sistema como tres láminas metálicas infinitas. Para hacer el modelo más realista, se consideró además que los tres gases están acopladas a través del efecto túnel y que la energía de sitio de las láminas es distinta. Se obtuvo que a densidades altas los únicos términos que contribuyen a la energía total son el término de energía cinética intra-lámina y el término de Hartree. Por otro lado, el límite de bajas densidades está determinado por los efectos de una partícula introducidos en este trabajo: el hopping entre láminas y la energía de láminas. Se obtuvo que la interacción de intercambio inter-lámina juega un papel fundamental, ayudando en la estabilización de configuraciones balanceadas (con ocupaciones similares en cada una de las láminas), que es una característica muy frecuente en las muestras de interés experimental. Se espera que los resultados presentados para este sistema en un rango amplio de parámetros puedan servir como una guía cualitativa en el diseño de dichas muestras experimentales, además, se espera que sean útiles en el entendimiento de la física de los sistemas de varias capas semiconductoras a campo magnético cero.

En una *segunda etapa*, se añadió un campo magnético perpendicular al sistema y usando una variante similar de la aproximación de Hartree-Fock variacional, se estudiaron teóricamente los posibles cruces de niveles de Landau en las cercanías del potencial químico, en el régimen del efecto Hall cuántico entero. Además del campo magnético se consideró que el sistema tenía un voltaje externo o "bias" aplicado, de manera tal que incluyera el efecto de las compuertas de potencial presentes en los experimentos reales. Se obtuvo que el esquema de clasificación general encontrado para sistemas bicapa también puede ser extendido a sistemas tricapa, donde el simple cruce entre niveles corresponde a una anisotropía magnética tipo eje-fácil o "easy-axis" y el colapso entre niveles corresponde a una anisotropía magnética tipo plano-fácil o "easy-plane". Si bien los resultados obtenidos son válidos para cualquier factor de llenado ν ($=1,2,3,\dots$), se analizaron en detalle los casos donde $\nu = 3$

y 4, dando claras predicciones que pueden ayudar en la exploración e indentificación experimental. Por ejemplo, se encontró que aumentando el bias aplicado sobre el sistema, este puede mostrar primero anisotropía tipo plano-fácil, luego eje-fácil y nuevamente plano-fácil, tanto a $\nu = 3$ como a $\nu = 4$. Esta característica "reentrante" es mucho más marcada en el caso $\nu = 4$.

Dado que una de las principales técnicas usadas en sistemas bicapa para caracterizar los posibles tipos de anisotropías magnéticas ha sido la medición de la energía de activación en la región de cruce, se obtuvo también una energía de Hartree-Fock en la región de cuasi-degeneración entre los niveles, a $\nu = 3$ y $\nu = 4$. Mientras la energía de HF en los estados plano-fácil siempre presenta un comportamiento cuadrático con el campo de pseudo-espín, los estados eje-fácil tienen una dependencia lineal solo si la energía de Hartree que mezcla ambos pseudo-espines es menor que cierto valor. Por su parte, en los estados isotrópicos, la energía de Hartree puede tener un comportamiento lineal o cuadrático alrededor de la región de alineación, dependiendo del factor de llenado y de los números cuánticos de los niveles que se alinean.

La *tercera etapa* de la tesis estuvo concentrada en la extensión del formalismo de intercambio exacto, dentro de la teoría de la funcional densidad, a sistemas cuasi-bidimensionales de electrones en el régimen del efecto Hall cuántico entero. Primeramente, aprovechando las ventajas analíticas y simplificaciones del régimen de una sub-banda ocupada, se obtuvo la funcional de intercambio exacto para el efecto Hall cuántico entero (IQHE). Dicha funcional presenta un comportamiento interesante, puesto que se minimiza localmente con discontinuidades en la derivada en cada valor entero del factor de llenado ν . Se encontró una expresión analítica para el potencial de intercambio dependiente del espín. Su característica más sorprendente es que presenta un salto abrupto, constante y positivo, cada vez que ν pasa por valores enteros. Esto es análogo a las discontinuidades en sistemas finitos y sólidos cuando el número de electrones pasa por valores enteros, solo que en este caso las discontinuidades pueden ser inducidas manteniendo el número de partículas fijo y variando el campo magnético. Este potencial presenta notables diferencias con el potencial x -LSDA usado comúnmente para estudiar el comportamiento de electrones en campos magnéticos intensos, sobre todo alrededor de valores enteros de ν .

Partiendo del formalismo cuasi-2D general de intercambio exacto obtenido anteriormente, se obtuvo su límite 2D estricto. Los cálculos correspondientes en este límite son mucho más simples que los asociados con el caso cuasi 2D, ya que en esta última situación los orbitales Kohn-Sham autoconsistentes que describen la física de sub-bandas deben obtenerse numéricamente. En cambio, en nuestra evaluación estricta 2D, estos orbitales Kohn-Sham se reemplazan por las funciones delta de Dirac, que restringen la dinámica de los electrones a un solo plano. En este límite, se en-

contraron también diferencias importantes entre LSDA y EE en presencia de campos magnéticos, a pesar de que ambas aproximaciones se basan en la misma densidad, que permanece homogénea cuando el campo magnético es finito. Concretamente, las diferencias se deben al hecho de que la forma funcional de la energía EE incluye de forma rigurosa el efecto del campo magnético a través de los orbitales Landau, mientras que la LSDA es una aproximación de campo cero. Se demostró además que en este límite 2D estricto la funcional del EE se reduce en forma rigurosa a la de x-LSDA en el límite de $B \rightarrow 0$.

Este último resultado para el potencial de intercambio sugiere, de manera natural, cómo ir más allá del LSDA 2D-estricto en el régimen de campo magnético fuerte de sistemas de electrones bidimensionales *no-homogéneos*: reemplazar $v_x^{\sigma, \text{LSDA}}$ por $v_x^\sigma(0)$. En la aproximación LSDA estándar, la expresión de campo cero para el gas de electrones 2D homogéneo, $v_x^{\sigma, \text{LSDA}}$ se utiliza a campo magnético finito y al caso no-homogéneo haciendo la aproximación de densidad local, que equivale a los reemplazos $r_s \rightarrow r_s(\boldsymbol{\rho}) = 1/\sqrt{\pi n(\boldsymbol{\rho})}$ y $p \rightarrow p(\boldsymbol{\rho}) = [n_\uparrow(\boldsymbol{\rho}) - n_\downarrow(\boldsymbol{\rho})]/n(\boldsymbol{\rho})$. Bajo estas hipótesis, $v_x^{\sigma, \text{LSDA}}$ se convierte en un potencial dependiente de la posición y el campo magnético $v_x^{\sigma, \text{LSDA}} \rightarrow v_x^{\sigma, \text{LSDA}}(\boldsymbol{\rho})$. Aquí sugerimos que un procedimiento más preciso será hacer la misma aproximación de densidad local, pero para nuestro potencial de EE: $v_x^\sigma(0) \rightarrow v_x^\sigma(\boldsymbol{\rho}, 0)$. La diferencia crucial entre $v_x^{\sigma, \text{LSDA}}(\boldsymbol{\rho})$ y $v_x^\sigma(\boldsymbol{\rho}, 0)$ es que mientras que en el primero el efecto del campo magnético entra *indirectamente* a través de los cambios inducidos por el campo en la polarización de espín, en $v_x^\sigma(\boldsymbol{\rho}, 0)$ el impacto del campo magnético es directo, ya que la *forma funcional* del EE contiene completamente los efectos del mismo. En otras palabras, mientras $v_x^\sigma(\boldsymbol{\rho}, 0)$ es exacto en el caso del gas 2D uniforme en un campo magnético arbitrario, $v_x^{\sigma, \text{LSDA}}(\boldsymbol{\rho})$ solo es exacto para el caso del gas 2D homogéneo a campo magnético cero.

En la *cuarta y última etapa* de la tesis estuvimos enfocados en los cálculos de la resistividad longitudinal ρ_{xx} . En primer lugar, estudiamos un sistema de tres pozos cuánticos semiconductores. Se demostró que la inclusión de la interacción (Hartree + XC) en el efecto Hall cuántico entero modifica considerablemente los mapas de resistividad de estos sistemas. Para explicar cualitativamente la topología de estos mapas, se utilizó un modelo simple, que logra explicar satisfactoriamente las predicciones del cálculo más sofisticado dentro de DFT-LSDA. Aunque no está mostrado explícitamente en esta tesis, podemos afirmar que los resultados obtenidos reproducen muy bien mediciones experimentales en este sistema. Al momento de escribir la tesis nos encontramos trabajando en conjunto con el grupo encargado de realizar los experimentos, tratando de obtener una comprensión cabal de los resultados experimentales, para su posterior publicación.

En esta misma línea, realizamos simulaciones de los mapas de resistividad para un sistema de un pozo cuántico con dos sub-bandas. Este sistema había sido estu-

diado anteriormente en la referencia [31] dentro de la formulación DFT-LSDA. En este trabajo, se incluyó el potencial de intercambio en la aproximación KLI para ver si era el responsable de la aparición de un comportamiento tipo "anti cruce" entre niveles de Landau con el mismo espín, como había sido sugerido por los autores de la referencia [31]. Los resultados hasta el momento indican que este comportamiento no puede ser reproducido usando la aproximación KLI. En estos momentos, estamos buscando una explicación para este comportamiento dentro del formalismo de la DFT no-colineal, donde la dirección del espín de un estado electrónico no es necesariamente la misma en todo el espacio. A futuro seguiremos trabajando en esta línea, estudiando los efectos de la interacción espín-órbita, la correlación y la no homogeneidad del sistema en el plano xy .

Apéndice A

Apéndices

A.1. Potencial de intercambio como suma de tres términos

Primeramente reescribamos el potencial de intercambio en la forma

$$v_x^\sigma(z) = (v_x^\sigma(z) - u_x^{j,\sigma}(z)) + u_x^{j,\sigma}(z) + \Delta \bar{v}_{x,j}^\sigma - \Delta \bar{v}_{x,j}^\sigma, \quad (\text{A.1})$$

considerando que $\Delta v_{x,j}^\sigma(z) = v_{x\sigma}^{OEP}(z) - u_x^{j,\sigma}(z)$, tenemos

$$v_x^\sigma(z) = [u_x^{j,\sigma}(z) + \Delta \bar{v}_{x,j}^\sigma] + [\Delta v_{x,j}^\sigma(z) - \Delta \bar{v}_{x,j}^\sigma]. \quad (\text{A.2})$$

Multiplicando el lado derecho de la ecuación anterior por $\frac{\sum_j |\lambda_j^\sigma(z)|^2 \bar{f}_j^\sigma}{\rho_\sigma(z)}$, tenemos

$$v_x^\sigma(z) = v_{x1}^\sigma(z) + \frac{1}{\rho_\sigma(z)} \sum_j |\lambda_j^\sigma(z)|^2 \bar{f}_j^\sigma \{ [\Delta v_{x,j}^\sigma(z) - \Delta \bar{v}_{x,j}^\sigma] \}, \quad (\text{A.3})$$

donde

$$v_{x1}^\sigma(z) = \frac{1}{\rho_\sigma(z)} \sum_j |\lambda_j^\sigma(z)|^2 \bar{f}_j^\sigma [u_x^{j,\sigma}(z) + \Delta \bar{v}_{x,j}^\sigma]. \quad (\text{A.4})$$

Ahora transformemos el segundo término

$$\frac{1}{\rho_\sigma(z)} \sum_j |\lambda_j^\sigma(z)|^2 \bar{f}_j^\sigma \{ [\Delta v_{x,j}^\sigma(z) - \Delta \bar{v}_{x,j}^\sigma] \} = \frac{1}{2\rho_\sigma(z)} \sum_j \bar{f}_j^\sigma (\lambda_j^\sigma(z) \psi_j^{\sigma''}(z) - \lambda_j^{\sigma''}(z) \psi_j^\sigma(z)) \quad (\text{A.5})$$

usando la segunda derivada de la Ec.(4.21):

$$\sum_j f_j^\sigma \psi_j^{\sigma''} \lambda_j^\sigma = \sum_j [(\lambda_j^{\sigma'})^2 + \lambda_j^\sigma \lambda_j^{\sigma''}] C_{x,j}^\sigma - \sum_j \bar{f}_j^\sigma (2\psi_j^{\sigma'} \lambda_j^{\sigma'} + \psi_j^\sigma \lambda_j^{\sigma''}) \quad (\text{A.6})$$

tenemos

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\rho_\sigma(z)} \sum_j |\lambda_j^\sigma(z)|^2 \bar{f}_j^\sigma \{ [\Delta v_{x,j}^\sigma(z) - \Delta \bar{v}_{x,j}^\sigma] \} = \\ & \frac{1}{2\rho_\sigma(z)} \left[\sum_j \lambda_j^{\sigma''}(z) (\lambda_j^\sigma C_{x,j}^\sigma - 2\bar{f}_j^\sigma \psi_j^\sigma(z)) - \sum_j (2\bar{f}_j^\sigma \psi_j^{\sigma'} \lambda_j^{\sigma'} - (\lambda_j^{\sigma'})^2 C_{x,j}^\sigma) \right]. \quad (\text{A.7}) \end{aligned}$$

Finalmente usando la ecuación de KS, obtenemos

$$\frac{1}{\rho_\sigma(z)} \sum_j |\lambda_j^\sigma(z)|^2 \bar{f}_j^\sigma \{ [\Delta v_{x,j}^\sigma(z) - \Delta \bar{v}_{x,j}^\sigma] \} = v_{x2}^\sigma(z) + v_{x3}^\sigma(z), \quad (\text{A.8})$$

donde

$$v_{x2}^\sigma(z) = \sum_j \frac{\gamma_j^\sigma K_j^\sigma(z)}{\rho_\sigma(z)}, \quad (\text{A.9})$$

$$v_{x3}^\sigma(z) = - \sum_j \frac{T_j^\sigma(z)}{\rho_\sigma(z)}, \quad (\text{A.10})$$

con $K_j^\sigma(z)$ y $T_j^\sigma(z)$ dados por

$$K_j^\sigma(z) = 2f_j^\sigma \psi_j^\sigma \lambda_j^\sigma - C_{x,j}^\sigma (\lambda_j^\sigma)^2, \quad (\text{A.11})$$

$$T_j^\sigma(z) = f_j^\sigma \psi_j^{\sigma'} \lambda_j^{\sigma'} - \frac{1}{2} C_{x,j}^\sigma (\lambda_j^{\sigma'})^2. \quad (\text{A.12})$$

Es decir, podemos escribir el potencial de intercambio como

$$v_x^\sigma(z) = v_{x1}^\sigma(z) + v_{x2}^\sigma(z) + v_{x3}^\sigma(z), \quad (\text{A.13})$$

con $v_{x1}^\sigma(z)$, $v_{x2}^\sigma(z)$ y $v_{x3}^\sigma(z)$ dados por (A.4), (A.9) y (A.10) respectivamente.

A.2. Algunos resultados analíticos para la integral de intercambio inter-lámina

Considerando que $E_0^{X\text{-inter}}$ es la única contribución a la energía total cuya dependencia con r_s y d^* no es totalmente explícita, consideramos conveniente analizar algunos límites, donde podemos obtener resultados analíticos. En primer lugar, las integrales $I_{\alpha\beta\sigma}(q)$ en (5.10) están dadas por

$$\begin{aligned} I_{\alpha\beta\sigma}(q) &= \eta_{\alpha\sigma} \Theta(\sqrt{\eta_{\beta\sigma}} - \sqrt{\eta_{\alpha\sigma}} - q) + \eta_{\beta\sigma} \Theta(\sqrt{\eta_{\alpha\sigma}} - \sqrt{\eta_{\beta\sigma}} - q) \\ &+ \pi^{-1} \Theta(\sqrt{\eta_{\alpha\sigma}} + \sqrt{\eta_{\beta\sigma}} - q) \Theta(q - |\sqrt{\eta_{\alpha\sigma}} - \sqrt{\eta_{\beta\sigma}}|) \\ &\times \left\{ \eta_{\alpha\sigma} \left[\cos^{-1} \left(\frac{q + K_0}{2\sqrt{\eta_{\alpha\sigma}}} \right) - \left(\frac{q + K_0}{2\sqrt{\eta_{\alpha\sigma}}} \right) \sqrt{1 - \left(\frac{q + K_0}{2\sqrt{\eta_{\alpha\sigma}}} \right)^2} \right] \right. \\ &\left. + \eta_{\beta\sigma} \left[\cos^{-1} \left(\frac{q - K_0}{2\sqrt{\eta_{\beta\sigma}}} \right) - \left(\frac{q - K_0}{2\sqrt{\eta_{\beta\sigma}}} \right) \sqrt{1 - \left(\frac{q - K_0}{2\sqrt{\eta_{\beta\sigma}}} \right)^2} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

donde $I_{\alpha\beta\sigma}(q) = I_{\beta\alpha\sigma}(q)$. Aquí, $K_0 = (\bar{k}_{\alpha\sigma}^2 - \bar{k}_{\beta\sigma}^2)/q$, con $\bar{k}_{\alpha\sigma} = k_{\alpha\sigma}/k_F$ y $k_F = \sqrt{4\pi N}$. Para $\alpha = \beta$, la expresión se simplifica a

$$I_{\alpha\alpha\sigma}(q) = \frac{2\eta_{\alpha\sigma}}{\pi} \Theta(2\sqrt{\eta_{\alpha\sigma}} - q) \left[\cos^{-1} \left(\frac{q}{2\sqrt{\eta_{\alpha\sigma}}} \right) - \left(\frac{q}{2\sqrt{\eta_{\alpha\sigma}}} \right) \sqrt{1 - \left(\frac{q}{2\sqrt{\eta_{\alpha\sigma}}} \right)^2} \right]. \quad (\text{A.15})$$

En el límite $d^*/r_s \rightarrow 0$ y a primer orden en d^*/r_s , el término $E_0^{X\text{-inter}}$ puede ser calculado explícitamente:

$$\begin{aligned}
E_0^{X\text{-inter}} \left(\frac{d^*}{r_s} \rightarrow 0 \right) &\simeq -2d^* \sin^2 \theta \sum_{\sigma} \int_0^{\infty} dq q (I_{aa\sigma} + 2I_{bb\sigma} + I_{cc\sigma} - 2I_{ab\sigma} - 2I_{cb\sigma}) \\
&\quad - \frac{d^* \sin^4 \theta}{2} \sum_{\sigma} \int_0^{\infty} dq q (I_{aa\sigma} + 4I_{bb\sigma} + I_{cc\sigma} + 2I_{ac\sigma} - 4I_{ab\sigma} - 4I_{cb\sigma}).
\end{aligned} \tag{A.16}$$

Usando la relación [74]

$$2 \int_0^{\infty} (I_{\alpha\alpha\sigma} + I_{\beta\beta\sigma} - 2I_{\alpha\beta\sigma}) dq q = (\eta_{\alpha\sigma} - \eta_{\beta\sigma})^2, \tag{A.17}$$

tenemos de (A.16) que

$$\begin{aligned}
E_0^{X\text{-inter}} \left(\frac{d^*}{r_s} \rightarrow 0 \right) &\simeq d^* \sin^2 \theta \left(1 - \frac{\sin^2 \theta}{2} \right) \sum_{\sigma} [(\eta_{a\sigma} - \eta_{b\sigma})^2 + (\eta_{c\sigma} - \eta_{b\sigma})^2] \\
&\quad + \frac{d^* \sin^4 \theta}{4} \sum_{\sigma} (\eta_{a\sigma} - \eta_{c\sigma})^2.
\end{aligned} \tag{A.18}$$

De la ecuación anterior es fácil ver que dado que en este límite $E_0^{X\text{-inter}}$ es siempre positiva, ésta se minimiza para $\theta = 0$ o cuando las sub-bandas están igualmente ocupadas. Suponiendo que estamos en el caso $\theta \neq 0$, la situación igualmente ocupada puede darse de varias maneras: *i*) polarizado en espín, con $\eta_{a\uparrow} = \eta_{b\uparrow} = \eta_{c\uparrow} = 1/3$ y todas las ocupaciones down cero, *ii*) situación no polarizada en espín con todas las ocupaciones de sub-banda igualmente ocupadas, teniendo un valor de $1/6$. Debido a la presencia de las contribuciones restantes a la energía total, la situación polarizada en espín es más estable en el límite de baja densidad, mientras que la situación no polarizada en espín es estable en el límite de alta densidad.

A.3. Límite de campo cero para integrales de intercambio

El análisis del límite de campo magnético cero nos lleva a analizar el límite de n grande en las funciones $I_1(n)$, $I_2(n)$ e $I_3(n)$, definidas en las Ecs.(7.13-7.15) respectivamente.

Comenzando con $I_1(n)$, tenemos para valores grandes de n , que

$$\begin{aligned} {}_3F_2 \left(-n, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; 2, -n - \frac{1}{2}; 1 \right) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-n)_k (\frac{1}{2})_k (-\frac{1}{2})_k}{k! (2)_k (-n - \frac{1}{2})_k}, \\ &\simeq \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\frac{1}{2})_k (-\frac{1}{2})_k}{(2)_k} \frac{1}{k!} = {}_2F_1 \left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; 2; 1 \right). \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

Usando entonces la relación [97]

$${}_2F_1(a, b; c; 1) = \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)}, \quad (\text{A.20})$$

obtenemos que ${}_2F_1(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; 2; 1) = \frac{8}{3\pi}$. Recopilando todos los resultados hasta el momento,

$$I_1(n+1) \simeq \frac{8}{3\sqrt{2\pi}} \frac{(2)_n (3/2)_n}{(n!)^2}. \quad (\text{A.21})$$

Finalmente, dado que los símbolos de Pochhammer admiten un desarrollo asintótico de la forma

$$(a)_n \simeq \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(a)} e^{-n} n^{a+n-1/2} [1 + \mathcal{O}(1/n)], \quad (\text{A.22})$$

y usando la aproximación de Stirling $n! \simeq \sqrt{2\pi} n^{n+1/2} e^{-n}$, obtenemos que

$$I_1(n+1) \simeq \frac{8\sqrt{2}}{3\pi} n^{3/2} + \mathcal{O}(n^{1/2}). \quad (\text{A.23})$$

Para calcular el límite de n grande para $I_2(n)$, tenemos que trabajar con el límite asintótico de

$$\begin{aligned} {}_3F_2 \left(-n, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; 1, \frac{1}{2} - n; 1 \right) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-n)_k (\frac{1}{2})_k (-\frac{1}{2})_k}{k! (1)_k (\frac{1}{2} - n)_k}, \\ &\simeq \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\frac{1}{2})_k (-\frac{1}{2})_k}{(1)_k} \frac{1}{k!} = {}_2F_1 \left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; 1; 1 \right) = \frac{2}{\pi}. \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

En el paso hemos utilizado nuevamente la Ec.(A.20). Finalmente tenemos

$$I_2(n) \simeq \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{(1)_n (3/2)_{n-1}}{n!(n-1)!} \simeq \frac{2\sqrt{2}}{\pi} n^{1/2} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^{1/2}}\right). \quad (\text{A.25})$$

Respecto al límite de n grandes para $I_3(n)$, tenemos evidencia numérica de que $I_3(n) \sim \ln(n)/n^{1/2}$ para $n \gg 1$.

Poniendo todos los resultados juntos,

$$\begin{aligned} \lim_{\nu_\sigma \rightarrow \infty} \bar{S}_1^{\nu_\sigma} &= \frac{3\pi}{8\sqrt{2}} \lim_{\nu_\sigma \rightarrow \infty} \frac{I_1([\nu_\sigma]) + 2p_\sigma I_2([\nu_\sigma]) + p_\sigma^2 I_3([\nu_\sigma])}{\nu_\sigma^{3/2}} \\ &\rightarrow 1. \end{aligned} \tag{A.26}$$

De manera similar se puede mostrar que

$$\begin{aligned} \lim_{\nu_\sigma \rightarrow \infty} \bar{S}_2^{\nu_\sigma} &= \frac{\pi}{2\sqrt{2}} \lim_{\nu_\sigma \rightarrow \infty} \frac{(I_2([\nu_\sigma]) + p_\sigma I_3([\nu_\sigma]))}{\nu_\sigma^{1/2}} \\ &\rightarrow 1. \end{aligned} \tag{A.27}$$

Bibliografía

- [1] Tapash Chakraborty, P. P. The quantum Hall effects: integral and fractional. Berlin: Springer-Verlag, 1995.
- [2] Von Klitzing, K., Dorda, G., Pepper, M. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized hall resistance. *Physical Review Letters*, **45**, 494, 1980.
- [3] Witt, T. J. Electrical resistance standards and the quantum Hall effect. *Review of Scientific Instruments*, **69** (8), 2823, 1998.
- [4] Tzalenchuk, A., Lara-Avila, S., Kalaboukhov, A., Paolillo, S., Syväjärvi, M., Yakimova, R., *et al.* Towards a quantum resistance standard based on epitaxial graphene. *Nature Nanotechnology*, **5** (3), 186, 2010.
- [5] Tsui, D. C., Stormer, H. L., Gossard, A. C. Two-dimensional magnetotransport in the extreme quantum limit. *Physical Review Letters*, **48**, 1559, 1982.
- [6] Ellenberger, C., Simovič, B., Leturcq, R., Ihn, T., Ulloa, S. E., Ensslin, K., *et al.* Two-subband quantum Hall effect in parabolic quantum wells. *Physical Review B*, **74** (19), 195313, 2006.
- [7] Zhang, X. C., Faulhaber, D. R., Jiang, H. W. Multiple phases with the same quantized hall conductance in a two-subband system. *Physical Review Letters*, **95** (21), 216801, 2005.
- [8] Zhang, X. C., Martin, I., Jiang, H. W. Landau level anticrossing manifestations in the phase-diagram topology of a two-subband system. *Physical Review B*, **74** (7), 073301, 2006.
- [9] Zhang, X. C., Scott, G. D., Jiang, H. W. NMR probing of spin excitations in the ring structure of a two-subband system. *Physical Review Letters*, **98** (24), 246802, 2007.
- [10] Guo, G. P., Zhao, Y. J., Tu, T., Hao, X. J., Zhang, X. C., Guo, G. C., *et al.* Observation of an in-plane magnetic-field-driven phase transition in a quantum Hall system with SU(4) symmetry. *Physical Review B*, **78** (23), 233305, 2008.

- [11] Muraki, K., Saku, T., Hirayama, Y. Charge Excitations in Easy-Axis and Easy-Plane Quantum Hall Ferromagnets. *Physical Review Letters*, **87** (19), 196801, 2001.
- [12] Guo, G. P., Hao, X. J., Tu, T., Zhao, Y. J., Lin, Z. R., Cao, G., *et al.* Probing a quantum hall pseudospin ferromagnet by resistively detected nuclear magnetic resonance. *Physical Review B*, **81**, 041306, 2010.
- [13] Gusev, G. M., Quivy, A. A., Lamas, T. E., Leite, J. R., Estibals, O., Portal, J. C. Quantum hall ferromagnet in a parabolic well. *Physical Review B*, **67**, 155313, 2003.
- [14] Fernandes dos Santos, L., Pusep, Y. A., Villegas-Lelovsky, L., Lopez-Richard, V., Marques, G. E., Gusev, G. M., *et al.* Quantum oscillations of spin polarization in a GaAs/AlGaAs double quantum well. *Physical Review B*, **86**, 125415, 2012.
- [15] Fernandes dos Santos, L., Barbosa, B. G., Gusev, G. M., Ludwig, J., Smirnov, D., Bakarov, a. K., *et al.* Spectroscopic evidence of quantum Hall interlayer tunneling gap collapse caused by tilted magnetic field in a GaAs/AlGaAs triple quantum well. *Physical Review B*, **89** (19), 195113, 2014.
- [16] Larkin, I. A., Ujevic, S., Wiedmann, S., Mamani, N., Gusev, G. M., Bakarov, A. K., *et al.* Shubnikov-de haas effect in tilted magnetic fields in wide quantum well. *Journal of Physics: Conference Series*, **456** (1), 012025, 2013.
- [17] Weis, J., Klitzing, K. V. Metrology and microscopic picture of the integer quantum Hall effect. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, **369** (1953), 3954, 2011.
- [18] Parr, W., R. G. Yang. Density-functional theory of atoms and molecules. Oxford:University Press, 1989.
- [19] Engel, E., Dreizler, R. M. Density Functional Theory. Springer, Berlin, Heidelberg, 2011.
- [20] Van Noorden, R., Maher, B., Nuzzo, R. The Top 100 papers. *Nature*, **514** (7524), 550, 2014.
- [21] Hohenberg, P., Kohn, W. The Inhomogeneous Electron Gas. *Physical Review*, **136** (3B), B864, 1964.
- [22] Kohn, W., Sham, L. J. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. *Physical Review*, **41140** (4a), a1133, 1965.

- [23] Grabo, T., Kreibich, T., Kurth, S., Gross, E. K. U. Strong Coulomb Interactions in Electronic Structure Calculations: Beyond the Local Density Approximation. Gordon and Breach, Amsterdam, 2000.
- [24] Kümmel, S., Kronik, L. Orbital-dependent density functionals: Theory and applications. *Reviews of Modern Physics*, **80** (1), 3, 2008.
- [25] Horowitz, C. M., Proetto, C. R., Rigamonti, S. Kohn-sham exchange potential for a metallic surface. *Physical Review Letters*, **97** (2), 026802, 2006.
- [26] Städelde, M., Moukara, M., Majewski, J. A., Vogl, P., Görling, A. Exact exchange kohn-sham formalism applied to semiconductors. *Physical Review B*, **59** (15), 10031, 1999.
- [27] Reboredo, F., Proetto, C. R. Exact-exchange density functional theory for quasi-two-dimensional electron gases. *Physical Review B*, **67** (11), 115325, 2003.
- [28] Rigamonti, S., Proetto, C. R., Reboredo, F. A. Novel properties of the Kohn-Sham exchange potential for open systems: Application to the two-dimensional electron gas. *Europhysics Letters (EPL)*, **70** (1), 116, 2005.
- [29] Ferconi, M., Geller, M. R., Vignale, G. Edge structure of fractional quantum Hall systems from density-functional theory. *Physical Review B*, **52** (23), 16357, 1995.
- [30] Heinonen, O., Lubin, M. I., Johnson, M. D. Ensemble Density Functional Theory of the Fractional Quantum Hall Effect. *Physical Review Letters*, **75** (22), 4110–4113, 1995.
- [31] Ferreira, G. J., Freire, H. J. P., Egues, J. C. Many-body effects on the rho_{xx} ringlike structures in two-subband wells. *Physical Review Letters*, **104** (6), 066803, 2010.
- [32] Freire, H. J. P., Egues, J. C. Hysteretic resistance spikes in quantum hall ferromagnets without domains. *Physical Review Letters*, **99** (2), 026801, 2007.
- [33] Morbec, J. M., Capelle, K. Contribution of the second landau level to the exchange energy of the three-dimensional electron gas in a high magnetic field. *Physical Review B*, **78**, 085107, 2008.
- [34] Morbec, J. M., Capele, K. Exact and Approximate Relations for the Spin-Dependence of the Exchange Energy in High Magnetic Fields. *International Journal of Modern Physics B*, **23** (12n13), 3004, 2009.

- [35] Bastard, G. Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures. Les Editions de Physique, Les Ulis, 1988.
- [36] Datta, S. Electronic Transport in Mesoscopic Systems. Cambridge University Press, 1995.
- [37] Laughlin, R. B. Quantized Hall conductivity in two dimensions. *Physical Review B*, **23** (10), 5632, 1981.
- [38] Prange, R. E. Quantized Hall resistance and the measurement of the fine-structure constant. *Physical Review B*, **23** (9), 4802, 1981.
- [39] Halperin, B. I. Quantized Hall conductance, current-carrying edge states, and the existence of extended states in a two-dimensional disordered potential. *Physical Review B*, **25** (4), 2185, 1982.
- [40] Büttiker, M. Absence of backscattering in the quantum Hall effect in multi-probe conductors. *Physical Review B*, **38** (14), 9375, 1988.
- [41] Niu, G., Thouless, D. J., Wu, Y.-S. Quantized Hall conductance as a topological invariant. *Physical Review B*, **31** (6), 3372, 1985.
- [42] Van der Burgt, M., Karavolas, V. C., Peeters, F. M., Singleton, J., Nicholas, R. J., Herlach, F., *et al.* Magnetotransport in a pseudomorphic GaAs/Ga_{0.8}In_{0.2}As/Ga_{0.75}Al_{0.25}As heterostructure with a Si δ -doping layer. *Physical Review B*, **52** (16), 12218, 1995.
- [43] Ando, T., Uemura, Y. Theory of quantum transport in a two-dimensional electron system under magnetic fields. I. Characteristics of level broadening and transport under strong fields. *Journal of the Physical Society of Japan*, **36** (4), 959, 1974.
- [44] Dreizler, R. M., Gross, E. K. U. Density Functional Theory. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1990.
- [45] Giuliani, G. F., Vignale, G. Quantum Theory of the Electron Liquid. Cambridge University Press, New York, 2005.
- [46] Born, M., Huang, K. Dynamical Theory of Crystal Lattices. Oxford:University Press, 1954.
- [47] Levy, M. Universal Functionals of the Density and 1st-Order Density Matrix. *Proceedings of the National Academy of Sciences USA*, **76** (12), 6062, 1979.

- [48] Levy, M. Electron densities in search of hamiltonians. *Physical Review A*, **26**, 1200, 1982.
- [49] Perdew, J. P., Parr, R. G., Levy, M., Balduz, J. L. Density-Functional Theory for Fractional Particle Number: Derivative Discontinuities of the Energy. *Physical Review Letters*, **49** (23), 1691, 1982.
- [50] Perdew, J. P., Levy, M. Physical content of the exact kohn-sham orbital energies: Band gaps and derivative discontinuities. *Physical Review Letters*, **51** (20), 1884, 1983.
- [51] Perdew, J. P., Yang, W., Burke, K., Yang, Z., Gross, E. K. U., Scheffler, M., *et al.* Understanding band gaps of solids in generalized Kohn-Sham theory. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **114** (11), 2801, 2017.
- [52] Ceperley, D. M., Alder, B. J. Ground state of the electron gas by a stochastic method. *Physical Review Letters*, **45**, 566, 1980.
- [53] Los efectos del campo magnético pueden ser incluidos de forma más rigurosa a través de la teoría de la funcional densidad de corriente de espín (CSDFT). Vignale G. and Rasolt M. Current- and spin-density-functional theory for inhomogeneous electronic systems in strong magnetic fields, *Physical Review B*, **37**, 10685, 1988. En este trabajo suponemos que el potencial vector efectivo A_{xc} es pequeño.
- [54] Greiner, M., Carrier, P., Görling, A. Extension of exact-exchange density functional theory of solids to finite temperatures. *Physical Review B*, **81**, 155119, 2010.
- [55] Kümmel, S., Perdew, J. P. Optimized effective potential made simple: Orbital functionals, orbital shifts, and the exact Kohn-Sham exchange potential. *Physical Review B*, **68** (3), 035103, 2003.
- [56] Krieger, J. B., Li, Y., Iafate, G. J. Systematic approximations to the optimized effective potential: Application to orbital-density-functional theory. *Physical Review A*, **46**, 5453, 1992.
- [57] Miravet, D., Ferreira, G. J., Proetto, C. R. Exact exchange: A pathway for a density functional theory of the integer quantum Hall effect. *Europhysics Letters (EPL)*, **119** (5), 57001, 2017.
- [58] Miravet, D., Proetto, C. R. Exact-exchange density functional theory of the integer quantum Hall effect: strict 2D limit. *European Physical Journal B*, **91**, 129, 2018.

- [59] Rigamonti, S., Proetto, C. R. Correlation Kohn-Sham potential for quasi-two-dimensional electron gases. *Physical Review B*, **73** (23), 235319, 2006.
- [60] Rigamonti, S., Proetto, C. R. Signatures of discontinuity in the exchange-correlation energy functional derived from the subband electronic structure of semiconductor quantum wells. *Physical Review Letters*, **98** (6), 066506, 2007.
- [61] Rigamonti, S., Horowitz, C. M., Proetto, C. R. Spin-dependent optimized effective potential formalism for open and closed systems. *Physical Review B*, **92** (23), 235145, 2015.
- [62] Nazarov, V. U. Exact exact-exchange potential of two- and one-dimensional electron gases beyond the asymptotic limit. *Physical Review B*, **93** (19), 195432, 2016.
- [63] Kurth, S., Proetto, C. R., Capelle, K. Dependence of response functions and orbital functionals on occupation numbers. *Journal of Chemical Theory and Computation*, **5** (4), 693, 2009.
- [64] Miravet, D., Proetto, C. R., Bolcatto, P. G. Coulomb and tunneling-coupled trilayer systems at zero magnetic field. *Physical Review B*, **93** (8), 085305, 2016.
- [65] Hanna, C. B., Macdonald, A. H. Spontaneous coherence and the quantum Hall effect in triple-layer electron systems. *Physical Review B*, **53** (23), 15981, 1996.
- [66] Herce, H., Proetto, C. Quantum phase transitions in Coulomb-coupled trilayers. *Solid State Communications*, **118** (8), 395, 2001.
- [67] Ye, J. Broken symmetry, excitons, gapless modes, and topological excitations in trilayer quantum Hall systems. *Physical Review B*, **71** (12), 125314, 2005.
- [68] Jo J, Suen Y W, S. M. B., Engel, W. Quantum Hall effect in a triple-layer electron system. *Physical Review B*, **46** (15), 1992.
- [69] Lay, T., Shukla, S., Jo, J., Ying, X., Shayegan, M. Magnetotransport of a low-disorder triple-layer electron system in perpendicular or parallel magnetic fields. *Surface Science*, **362**, 171, 1996.
- [70] Shukla, S. P., Suen, Y. W., Shayegan, M. Magnetic-Field-Induced Triple-Layer to Bilayer Transition. *Physical Review Letters*, **81** (3), 693, 1998.
- [71] Wiedmann, S., Mamani, N. C., Gusev, G. M., Raichev, O. E., Bakarov, a. K., Portal, J. C. Magnetoresistance oscillations in multilayer systems: Triple quantum wells. *Physical Review B*, **80** (24), 245306, 2009.

- [72] Wiedmann, S., Mamani, N. C., Gusev, G. M., Raichev, O. E., Bakarov, a. K., Portal, J. C. Magneto-intersubband oscillations in triple quantum wells. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, **42** (4), 1088, 2010.
- [73] Gusev, G. M., Wiedmann, S., Raichev, O. E., Bakarov, a. K., Portal, J. C. Emergent and reentrant fractional quantum Hall effect in trilayer systems in a tilted magnetic field. *Physical Review B*, **80** (16), 161302, 2009.
- [74] Hanna, C., Haas, D., Díaz-Vélez, J. Double-layer systems at zero magnetic field. *Physical Review B*, **61** (20), 13882, 2000.
- [75] Proetto, C. Comment on "magnetic-field-induced triple-layer to bilayer transition". *Physical Review Letters*, **82** (1), 3723, 1999.
- [76] Shukla, S. P., Shayegan, M., Jungwirth, T., MacDonald, A. H. Shukla et al. Reply. *Physical Review Letters*, **82** (18), 3724, 1999.
- [77] Brey, L. Energy spectrum and charge-density-wave instability of a double quantum well in a magnetic field. *Physical Review Letters*, **65**, 903, 1990.
- [78] Jungwirth, T., Shukla, S. P., Smrčka, L., Shayegan, M., MacDonald, A. H. Magnetic Anisotropy in Quantum Hall Ferromagnets. *Physical Review Letters*, **81** (11), 2328, 1998.
- [79] Jungwirth, T., MacDonald, a. Pseudospin anisotropy classification of quantum Hall ferromagnets. *Physical Review B*, **63** (3), 035305, 2000.
- [80] Gasiorowicz, S. Quantum Physics. Wiley, New York, 1996.
- [81] Galassi, M., et. al. GNU Scientific Library Reference Manual (3rd Ed.). URL <http://www.gnu.org/software/gsl/>.
- [82] Snir, M., et. al. MPI: The Complete Reference. MIT Press, Cambridge, Ma, 1996.
- [83] Goñi, A. R., Haboek, U., Thomsen, C., Eberl, K., Reboredo, F. A., Proetto, C. R., et al. Exchange instability of the two-dimensional electron gas in semiconductor quantum wells. *Physical Review B*, **65**, 121313, 2002.
- [84] Miravet, D., Proetto, C. R. Pseudospin anisotropy of trilayer quantum Hall ferromagnets. *Physical Review B*, **94** (8), 085304, 2016.
- [85] Kittel, C. Introduction to Solid State Physics. New York: Wiley, 2005.
- [86] Sarma, S. D., Pinczuk, A. Perspectives in the Quantum Hall Effect. Wiley, New York, 1997.

- [87] Ezawa, Z. F., Tsitsishvili, G. Quantum Hall ferromagnets. *Reports on Progress in Physics*, **72**, 086502, 2009.
- [88] De Poortere, E. P., Tutuc, E., Papadakis, S. J., Shayegan, M. Resistance spikes at transitions between quantum hall ferromagnets. *Science (New York, N.Y.)*, **290**, 1546, 2000.
- [89] Jungwirth, T., MacDonald, A. H. Resistance spikes and domain wall loops in Ining quantum Hall ferromagnets. *Physical review letters*, **87**, 216801, 2001.
- [90] Shashkin, A., Dolgoplov, V., Clark, J., Shaginyan, V., Zverev, M., Khodel, V. Merging of Landau Levels in a Strongly Interacting Two-Dimensional Electron System in Silicon. *Physical Review Letters*, **112** (18), 186402, 2014.
- [91] Millard, I. S., Patel, N. K., Simmons, M. Y., Hamilton, A. R., Ritchie, D. A., Pepper, M. Integer quantum Hall states in coupled double electron gas systems at mismatched carrier densities. *Journal of Physics: Condensed Matter*, **8** (22), L311, 1996.
- [92] Muraki, K., Saku, T., Hirayama, Y., Kumada, N., Sawada, A., Ezawa, Z. Inter-layer charge transfer in bilayer quantum hall states at various filling factors. *Solid State Communications*, **112** (11), 625, 1999.
- [93] MacDonald, A. H., Rajaraman, R., Jungwirth, T. Broken-symmetry ground states in $\nu = 2$ bilayer quantum hall systems. *Physical Review B*, **60**, 8817, 1999.
- [94] Brey, L., Fertig, H. A. Stripes in quantum hall double-layer systems. *Physical Review B*, **62**, 10268, 2000.
- [95] Schliemann, J., MacDonald, A. H. Bilayer quantum hall systems at filling factor $\nu = 2$: An exact diagonalization study. *Physical Review Letters*, **84**, 4437, 2000.
- [96] A.P. Prudnikov, O. M., Yu.A. Brychkov. Integrals and series, Special functions, tomo 2. Gordon and Breach, New York, 1986.
- [97] M. Abramowitz, I. S. Handbook of mathematical functions. Dover, New York, 1972.
- [98] Amaha, S. Comunicación privada.
- [99] Perdew, J. P., Wang, Y. Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy. *Physical Review B*, **45** (23), 13244, 1992.

- [100] Dado que $g < 0$ para el $GaAs$, hemos tomado su módulo en la expresión para el término de Zeeman, así se muestra explícitamente que los estados con proyección de espín up tienen menor energía de Zeeman que los estados con proyección de espín down.
- [101] Von Barth, U., Hedin, L. A local exchange-correlation potential for the spin polarized case. I. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, **5** (13), 1629, 1972.
- [102] Kubler, J., Hock, K. H., Sticht, J., Williams, A. R. Density functional theory of non-collinear magnetism. *Journal of Physics F: Metal Physics*, **18** (3), 469, 1988.

Publicaciones asociadas

1. **D. Miravet**, C. R. Proetto, and P. G. Bolcatto, "Coulomb and tunneling-coupled trilayer systems at zero magnetic field", *Physical Review B*, 93, 085305 (2016).
2. **D. Miravet** and C. R. Proetto, "Pseudospin anisotropy of trilayer semiconductor quantum Hall ferromagnets", *Physical Review B*, 94, 085304 (2016).
3. **D. Miravet**, G. J. Ferreira and C. R. Proetto, "Exact Exchange: a pathway for a Density Functional Theory of the Integer Quantum Hall Effect", *Europhysics Letter (EPL)*, 119, 57001 (2017).
4. **D. Miravet** and C. R. Proetto, "Exact-exchange density functional theory of the integer quantum Hall effect: strict 2D limit", *European Physical Journal B* **91**, 129 (2018).

Agradecimientos

En primer lugar quisiera agradecer a la Argentina, que a través de su gente y sus instituciones me han dado la oportunidad de estudiar aquí. En especial quisiera agradecer a la ANPCyT, CONICET y CNEA por brindar el soporte necesario para mi estadía en Bariloche durante estos años. Especial agradecimiento también al Instituto Balseiro por brindarme la oportunidad de estudiar y compartir con excelentes compañeros y profesores. Muchas gracias a toda la gente del grupo de Teoría de la Materia Condensada por lo aprendido y compartido durante discusiones, journals y tortas.

Muchas gracias a Claudio Horowitz por recibirme en La Plata e introducirme en los detalles numéricos de las ecuaciones de intercambio exacto.

Muchas gracias a Pablo Bolcatto por todas las discusiones sobre la física de los q^2 DEGs.

Muchas gracias a Javier Fuhr por la cuidadosa revisión de este trabajo y por sus valiosos comentarios.

Muchas gracias a María José Sánchez, Javier Fuhr y Claudio Horowitz por aceptar ser miembros del tribunal que evalúa este trabajo.

Muchas gracias Gustavo Berman (Tavo) y Daniel García por su asesoramiento y paciencia en los temas relativos al cluster de cómputo.

Muchas gracias a los profes Karen Hallberg, Armando Aligia, Alejandro Kolton y Alexander D. Hernández por todo su apoyo en estos años y tener la valentía de recomendarme para escuelas y eventos científicos.

Muchas gracias a mi director César Proetto, es mucho lo que he aprendido en estos años junto a él. Gracias por su ejemplo y sabiduría, esto ha sido de vital importancia para mi comprensión del tema de trabajo y para definir mi actitud ante la investigación. Gracias por todo el tiempo que me dedicó. Gracias por todo el soporte que me brindó durante mis primeros meses en Bariloche, estas cosas no se olvidan, eternamente agradecido.

Muchas gracias a toda mi familia, especialmente a mis padres. Muchas gracias a Ivette: su fuerza, amor y ánimo está en todo este trabajo.

Muchas gracias a mi amigo y compañero de oficina Yurriel Nuñez por esa motivación contagiosa a resolver problemas. Gracias por esas respuestas simples a pre-

guntas complicadas.

Muchas gracias a mis amigos Ariel, Eduardo, Mercy y Osbel por su ánimo y apoyo incondicional.