



UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Departamento de Física

Transición de Bloch en el gas de electrones confinado en pozos cuánticos de semiconductores

Trabajo de Tesis para optar por el título de
Doctor de la Universidad de Buenos Aires en el área Ciencias Físicas.

por Lic. Luis Octavio Juri

Director de Tesis: Dr. Pablo I. Tamborenea

Lugar de Trabajo: Universidad de Buenos Aires-FCEyN,
Departamento de Física.

Buenos Aires, Noviembre 2009

A Malva, Gabriela, Rocío y Jazmín

Resumen

En la primera parte de esta tesis, calculamos la densidad crítica de la transición ferromagnética de primer orden, o transición de Bloch, para los electrones confinados en pozos cuánticos de semiconductores. Encontramos que la existencia de dicha densidad crítica es fuertemente dependiente del ancho del pozo, siendo esta dependencia gobernada por las distintas componentes de la interacción coulombiana de intercambio entre los electrones confinados en el pozo. A su vez, logramos mostrar que existe un ancho máximo de pozo más allá del cual no es posible obtener la transición ferromagnética, por más que se disminuya la densidad en forma arbitraria. Estos resultados fueron obtenidos mediante la utilización de la aproximación de campo medio de Hartree-Fock estático y con la inclusión de apantallamiento de Thomas-Fermi. Por último, desarrollamos un modelo de masas efectivas dependientes de la polarización de espín que, mediante el ajuste de un solo parámetro, nos permitió comparar nuestros resultados con los obtenidos por otros investigadores mediante la utilización del método de Monte Carlo.

En la segunda parte de la tesis, nos concentramos en el gas de electrones estrictamente bidimensional (2DEG) bajo la influencia de la interacción espín órbita de Rashba. Nuestro interés es poder encontrar sus efectos sobre la transición de Bloch, dentro del modelo de Hartree-Fock sin apantallamiento. Hemos logrado identificar dos fases cuánticas que compiten entre sí: una fase ferromagnética, con polarización parcial de espín en la dirección perpendicular a la superficie del 2DEG y otra fase, paramagnética, en donde el espín de cada electrón está contenido en el plano. Presentamos un diagrama de fases en términos de los parámetros característicos del problema y finalmente comparamos nuestra descripción teórica con resultados experimentales obtenidos en heteroestructuras de GaAs/AlGaAs.

Palabras clave: transición ferromagnética, pozos cuánticos, gas de electrones, interacción espín-órbita, interacción coulombiana, campo medio, interacción de intercambio, correlaciones.

Abstract

In the first part of the thesis, we calculate the critical density of the ferromagnetic first-order transition, known as Bloch transition, for a quasi-two-dimensional electron gas confined in semiconductor quantum wells. We find that the existence of such transition depends strongly on the well width, and that this dependence is governed by the different components of the electron-electron Coulomb interaction. Furthermore, we show that there exists a maximum well width beyond which the ferromagnetic transition is not possible, regardless of how low the density is. These results have been obtained within the static mean-field Hartree-Fock approximation with Thomas-Fermi screening. Finally, we developed a model with polarization-dependent effective masses, which, by adjusting just one parameter, allowed us to compare our results with those obtained by other authors with the Monte Carlo method.

In the second part of the thesis, we studied the strictly two-dimensional electron gas (2DEG) under the influence of the Rashba spin-orbit interaction. Our goal was to study the effects of this interaction on the ground state of the 2DEG described within the Hartree-Fock approximation without screening, with emphasis on the effects on the spin transition studied in the first part. We identified two competing quantum phases: a ferromagnetic phase, with partial spin polarization in the out-of-plane direction, and a paramagnetic phase, where the electron spin is in the quantum-well plane. We present a phase diagram in terms of the characteristic parameters of the problem and compare our theoretical description with experimental results obtained with GaAs/AlGaAs heterostructures.

Keywords: ferromagnetic transition, quantum wells, spin-orbit, coulomb interaction, mean field, exchange, correlations.

Índice general

Resumen	I
Abstract	II
1. Introducción	1
1.1. Presentación del problema	1
1.2. Correlaciones dinámicas	2
1.3. Método de Monte Carlo	3
1.4. El gas de electrones cuasi-bidimensional	5
1.5. Descripción de la tesis	7
1.5.1. Efectos del cuasi-2DEG sobre la transición de Bloch	7
1.5.2. Efectos de la asimetría de inversión en la transición de Bloch	8
1.6. Organización de la tesis	9
2. Teoría de Hartree-Fock apantallado en pozos cuánticos	11
2.1. Las ecuaciones de Hartree-Fock en el cuasi-2DEG	11
2.2. Apantallamiento de Thomas Fermi en el cuasi-2DEG	15
2.3. La energía del estado fundamental de Hartree-Fock en el cuasi-2DEG	18
2.3.1. Pozos cuánticos de profundidad infinita y transición de Bloch	20
2.3.2. Pozos cuánticos de profundidad finita y transición de Bloch	29

ÍNDICE GENERAL

3. Masas efectivas dependientes de la polarización de espín	31
3.1. Motivación	31
3.2. El caso bidimensional	33
3.2.1. Factor de masas independiente de la densidad	33
3.2.2. Factor de masas dependiente de la densidad	37
3.3. El caso cuasi-bidimensional	39
3.4. Comparación con el experimento	43
4. Teoría de Hartree-Fock con interacción espín-órbita de Rashba	45
4.1. Acoplamiento Rashba y transición de Bloch	46
4.2. La interacción de Rashba	46
4.2.1. Las energías del Hamiltoniano de Rashba	48
4.2.2. Ejes de cuantización de espín y acoplamiento Rashba	50
4.3. Hartree-Fock y acoplamiento Rashba: formalismo	51
4.3.1. La solución isótropa de Hartree-Fock con acoplamiento Rashba	57
4.4. El estado fundamental de Hartree-Fock con acoplamiento Rashba	70
4.4.1. Energía del estado fundamental de HF con acoplamiento Rashba	70
4.4.2. Diagrama de fases en el espacio de parámetros $p - r_s$	72
4.4.3. Círculos de Fermi y polarización parcial	74
4.4.4. La transición de Bloch y el experimento	78
5. Resumen final y conclusiones	84
A. La aproximación de Hartree-Fock en general	91
B. La aproximación de Hartree-Fock con acoplamiento Rashba: detalles del desarrollo	99
B.1. Hartree-Fock y acoplamiento Rashba: planteo general	99
B.2. Ecuaciones de Hartree-Fock con acoplamiento Rashba	102

ÍNDICE GENERAL

B.2.1. Diagonalización del Hamiltoniano de Hartree-Fock con acoplamiento Rashba	103
B.2.2. Simetría circular en Hartree-Fock con acoplamiento Rashba	106
B.2.3. Polarización de espín en Hartree-Fock con acoplamiento Rashba	110
C. Propiedades de la ecuación integral angular	112
Agradecimientos	124
Trabajos publicados	125
Bibliografía	125

Capítulo 1

Introducción

1.1. Presentación del problema

El gas de electrones interactuante es uno de los sistemas fundamentales de la física. Sin embargo, a pesar de haber sido objeto de intenso estudio [1, 2], aún mantiene algunos problemas abiertos. Dentro de estos, se encuentra la cuestión de si es posible que el gas de electrones en su estado fundamental, realice una transición espontánea de sus espines a un estado fundamental ferromagnético o polarizado, teniendo a la densidad electrónica como parámetro de control. Desde que este problema fuera planteado en 1929 por F. Bloch [3] hasta la actualidad, no se han realizado experimentos concluyentes que confirmen la existencia de dicha transición. La predicción de Bloch se basa en la competencia entre la energía cinética, que favorece el estado paramagnético, y la energía de intercambio proveniente de la interacción de Coulomb entre los electrones y del principio de exclusión de Pauli, que favorece el estado polarizado de espín. La hipótesis de Bloch se basó, esencialmente, en un análisis a primer orden en teoría de perturbaciones en el Hamiltoniano de interacción. Actualmente, con la aproximación de Hartree-Fock (HF) [1, 2], que también es a primer orden en teoría de perturbaciones, se obtiene la misma predicción.

Cuando nos referimos al gas de electrones, estamos pensando en un sistema un poco

más amplio como es el formado por N electrones interactuando entre sí y con un fondo de carga positiva, uniforme y rígida, que hace que el sistema en su conjunto, sea eléctricamente neutro. A este modelo idealizado se lo conoce con el nombre de modelo de *jellium*.

La interacción de Coulomb es de largo alcance y no tiene una distancia característica de decaimiento. Por esta razón, el potencial de interacción en el espacio de momentos, que es el transformado de Fourier del potencial real, diverge cuando la transferencia de momento es cero. El modelo de *jellium* tiene la virtud de cancelar esta divergencia con otras de signo contrario, provenientes de la interacción de los electrones con el fondo de densidad de cargas positivas y de la propia energía potencial electrostática de dicho fondo. Debido a esto, lo que se suele hacer es dejar de lado el sistema completo para quedarse sólo con los electrones, con la restricción que cada vez que se efectúe alguna suma sobre el momento transferido, se excluya al cero como posibilidad.

Hasta aquí hemos planteado el problema de la transición de Bloch, quienes son sus actores y donde se realiza pero, no sabemos de qué modo puede influir en ella el tener en cuenta algunos datos de la realidad, como por ejemplo las correlaciones dinámicas entre los electrones, importante a bajas densidades para una interacción de largo rango como la de Coulomb. También, debemos tener en cuenta que el modelo de *jellium* es una idealización es decir, la transición de Bloch en el gas de electrones confinado en pozos cuánticos puede estar influenciada por los parámetros del pozo como por ejemplo, profundidad, ancho, ancho de barreras y propiedades de los semiconductores que lo constituyen, entre otros aspectos.

1.2. Correlaciones dinámicas

La aproximación de HF sólo tiene en cuenta correlaciones de tipo estadístico, las provenientes del principio de exclusión de Pauli, pero no las relacionadas con la interacción misma, que se conocen como correlaciones dinámicas. Su inclusión debe ser tenida en cuenta considerando que, al ser la interacción de Coulomb de largo alcance, un electrón puede correlacionarse con otro muy distante. El paso siguiente en teoría de perturbaciones, viene dado por la

aproximación de fases al azar (RPA) [1, 2] la cual no permite alcanzar densidades bajas ya que es válida en el límite de alta densidad. De todos modos, con la aproximación RPA se pudo observar un efecto de apantallamiento que todos los electrones ejercen sobre uno de ellos, disminuyendo el rango de la interacción desnuda. También se comprobó que los electrones están más “dispuestos” a correlacionarse entre sí cuando los espines son opuestos, favoreciendo el estado paramagnético y modificando la densidad crítica de la transición de Bloch hacia valores menores.

Avanzar en teoría de perturbaciones es un camino notablemente difícil, además de que no se disponen de aproximaciones superiores para tratar el problema que nos ocupa. Es el momento en donde se recurre al cálculo numérico mediante el conocido método de Monte Carlo (MC).

1.3. Método de Monte Carlo

El método de Monte Carlo (MC) permite obtener la energía del estado fundamental mediante cálculo numérico [4, 5, 6, 7], basado esencialmente en el uso de caminantes al azar para tomar un muestreo del espacio de configuración del sistema. Para el gas de electrones en dos dimensiones (2DEG), en el modelo de *jellium*, los cálculos de Monte Carlo indican que a $T = 0$, tiene lugar una transición de fase de primer orden para un cierto valor crítico r_{sc} del parámetro adimensional $r_s \equiv 1/\sqrt{\pi N_s} a_B^*$, donde N_s es la densidad superficial y a_B^* es el radio de Bohr efectivo en el material ($a_B^* = 98.7 \text{ \AA}$ en GaAs).

Los métodos más usados en los cálculos de Monte Carlo [8] son el Monte Carlo Variacional (VMC) que predice una transición de fase de primer orden en $r_{sc} = 13 \pm 2$ ($N_{sc} = 1.9 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$) [4, 5] y el Monte Carlo por difusión con nodo fijo (FN-DMC) con $r_{sc} = 25$ ($N_{sc} = 5.2 \times 10^8 \text{ cm}^{-2}$) [6]. El método VMC utiliza una integración estocástica (caminante al azar) para evaluar la energía del estado fundamental, para una dada función de onda de prueba. La desventaja de este método relativamente simple es que los resultados

son fuertemente dependientes de la elección de la función de onda de prueba. El método FN-DMC, que produce energías más bajas y más precisas, utiliza una técnica de proyección para aumentar la componente de la función de onda de prueba sobre la función de onda verdadera. Más precisamente, la idea es permitir que la función de onda inicial evolucione en un tiempo imaginario de acuerdo con la relación $\Psi_I(R, \tau) = e^{-(H-E_I)\tau/\hbar}\Psi_I(R)$. A menos que la función de onda inicial Ψ_I sea elegida ortogonal al estado fundamental, $\Psi_I(R, \tau)$ convergerá a la función de onda del estado fundamental verdadero, para τ suficientemente grande.

En el método FN-DMC implementado en la Ref. [6] se incluyeron, además, correlaciones de *backflow* [9] en las funciones de onda de una partícula para luego construir el determinante de Slater que constituye la función de onda de prueba del sistema de n electrones. Estas correlaciones de *backflow* tienen en cuenta modificaciones locales de la densidad, alrededor de un electrón y en la dirección de su momento. Como cada función de onda de una partícula depende ahora de todas las coordenadas de las restantes funciones de onda, podemos decir que las correlaciones son introducidas en el punto de partida del proceso de cálculo, para cada polarización. De allí, talvez, la importante diferencia entre los valores de r_{sc} producidos por ambos métodos. Todos los parámetros que se introducen en cada método son siempre variacionales, es decir son los que extreman la energía del estado fundamental.

Hasta aquí podemos decir que el método de Monte Carlo aplicado al modelo de *jellium*, verifica que la transición de Bloch se mantiene, aunque a valores de densidad superficial considerablemente más bajos que los que se obtienen originalmente con la aproximación de HF. Es para destacar que no existen estudios realizados, que den cuenta de cuan sensible es la densidad de transición, o el parámetro r_{sc} , a pequeños cambios en las distintas parametrizaciones del método.

1.4. El gas de electrones cuasi-bidimensional

Sabemos que el modelo de *jellium* es una idealización del gas de electrones, dado que no es lo que podemos encontrar en un experimento real. En este, los electrones pueden sufrir otro tipo de efectos que obstaculicen la detección de la transición de Bloch. En este sentido, nos preguntamos cuales son las situaciones reales en donde puede observarse un gas de electrones, para nuestro caso, bidimensional. Ciertos metales pueden alojar estados electrónicos en su superficie. Estos estados, se atenúan exponencialmente en la dirección perpendicular a la superficie a la vez que son completamente no localizados en el plano. Otro ejemplo es el de los electrones que pueden existir en la superficie libre del He líquido. Los electrones quedan ligados a la superficie debido a la acción de un potencial imagen pero están libres de moverse por la superficie, la cual no pueden atravesar debido a la existencia de una barrera natural de aproximadamente 1 eV. El inconveniente de estos dos ejemplos es que la densidad del gas de electrones no puede ser variada, lo que los vuelve poco prácticos a la hora de verificar propiedades que dependan de la densidad. El tercer y más relevante ejemplo de gas de electrones es el que proviene de heteroestructuras de semiconductores donde la densidad electrónica sí puede ser variada experimentalmente.

El fuerte desarrollo que ha tenido la electrónica de semiconductores a partir de la segunda mitad del siglo pasado, ha permitido la creación de sistemas de dimensión menor a tres, también llamados sistemas de *baja dimensión*: cuasi-2D (pozos cuánticos), cuasi-1D (cables cuánticos) y cuasi-0D (puntos cuánticos). Actualmente, es posible fabricar pozos cuánticos (QW) de alta calidad [10, 11, 12, 13, 14], a base de silicio (Si) o arseniuro de galio (GaAs), entre otros. El movimiento de un electrón dentro del pozo, en una de las tres direcciones espaciales, digamos z , está cuantificado, mientras que en las otras dos direcciones, x e y , se puede mover como un electrón libre en un plano infinito. Es decir, los niveles de energía están descritos por un vector de onda \mathbf{k} en el plano x - y y por un índice discreto $n = 1, 2, \dots$ en la dirección z . El espectro de energía del electrón en el pozo, queda formado por subbandas, numeradas con el índice n y cada una de ellas con dependencia

parabólica con k . Sabemos que la separación de niveles en un pozo cuántico es inversamente proporcional a su ancho. Haciendo que este sea adecuadamente pequeño, podremos lograr una separación importante entre el nivel fundamental y el primer nivel excitado del pozo. En esta situación, si la energía cinética característica de los electrones es mucho menor que la separación mencionada, su movimiento estará restringido a la subbanda más baja y su energía estará enteramente determinada por el vector de onda \mathbf{k} , a menos de una constante aditiva. La técnica de semiconductores nos proporciona la realización experimental del gas de electrones, siendo lo más destacado de estos sistemas que su densidad puede ser variada experimentalmente, en varios ordenes de magnitud con sólo modificar un potencial eléctrico adecuadamente dispuesto y sin la necesidad de modificar condiciones experimentales o alterar la muestra.

En los sistemas estudiados en esta tesis, sólo estará ocupada la primer subbanda debido a la baja densidad electrónica considerada pero, igualmente, nos referimos a nuestro sistema como cuasi bidimensional en vez de *estrictamente* bidimensional porque la capa electrónica tiene un ancho finito y su energía, así como otras propiedades como por ejemplo perfil de densidad, momento dipolar para transiciones inter subbanda, etc., dependen de este ancho finito como así también de la forma particular del potencial de confinamiento. Para enfatizar, el gas de electrones bidimensional en sentido estricto, que tiene ancho cero y carece de estructura de subbandas, y un gas de electrones confinado en un pozo cuántico con una sola subbanda ocupada no son sistemas idénticos y, en esta tesis exploramos las diferencias que surgen entre estos, en cuanto a la polarización espontánea de espín del estado fundamental, es decir la transición de Bloch.

Hasta donde sabemos, no existen cálculos de Monte Carlo sobre las fases polarizada y no polarizada de un cuasi-2DEG que sean comparables a los realizados con el mismo método para un gas uniforme (en 2D ó 3D) [15]. Esto se debe a que el agregado de un tercer grado de libertad espacial, sobre el cual el gas de electrones es inhomogéneo, hace crecer en forma considerable el tiempo computacional. Por otro lado, mencionamos que la

transición ferromagnética en QWs ha sido estudiada teóricamente en el marco de la teoría de la densidad local de espín (LSDA) [16]. Sin embargo, las densidades críticas predichas por esta técnica superan largamente el intervalo de densidad dado por los cálculos de MC para el 2DEG.

1.5. Descripción de la tesis

1.5.1. Efectos del cuasi-2DEG sobre la transición de Bloch

En esta primera parte de la tesis, estudiamos la posibilidad de una transición a primer orden y a temperatura cero ($T = 0$) como una función del ancho del pozo para el cuasi-2DEG confinado en pozos cuánticos. Nuestro objetivo es poder hacer predicciones para pozos cuánticos realistas de semiconductores y que sean al menos consistentes, a medida que el ancho del pozo tienda a cero, con los resultados más notables provenientes de Monte Carlo para el gas de electrones bidimensional en el modelo de *jellium*.

Nuestro principal hallazgo es que tanto el ancho como la profundidad del pozo juegan un papel crucial en la ubicación de la transición (valor de la densidad crítica N_{sc}) y, más aún, en su propia existencia. En particular, predecimos que existe un límite superior para el ancho del pozo más allá del cual la transición no puede ocurrir (siempre dentro del régimen de una subbanda ocupada).

Encontramos que la transición de Bloch podría ser observada a densidades electrónicas un poco más bajas que las disponibles actualmente en pozos cuánticos de semiconductores [17]. Conseguir bajas densidades para el gas de electrones confinado en estos sistemas es una tarea difícil que está limitada, en principio, por las impurezas del material, el desorden en las interfases y el hecho experimental de la dificultad de detección de señales de baja intensidad.

Para nuestros desarrollos utilizamos la aproximación de Hartree-Fock con apantalla-

miento. Luego, para acercarnos un poco más al problema real, desarrollamos un novedoso modelo de masas efectivas dependientes de la polarización, con el fin de incorporar los efectos de las correlaciones de Coulomb que, como dijimos, escapan a la aproximación de Hartree-Fock. Este modelo, confirmado teóricamente tiempo más tarde por cálculos de masas efectivas en el marco de la RPA [18] y más recientemente con verificación experimental [19], nos permitió extender al cuasi-2DEG, los resultados numéricos provenientes de Monte Carlo para el 2DEG en el modelo de *jellium*.

1.5.2. Efectos de la asimetría de inversión en la transición de Bloch

Una vez analizados la influencia del ancho y la profundidad del sistema cuasi-2DEG y las correlaciones de Coulomb, representadas por el apantallamiento de Thomas-Fermi y nuestro modelo de masas efectivas dependientes de la polarización, nos queda por estudiar la influencia de la posible asimetría de inversión del QW en la transición espontánea de espín. Tradicionalmente, el grado de libertad de espín electrónico ha jugado un papel secundario en la física de semiconductores. Esta situación ha cambiado recientemente con el advenimiento del promisorio campo de la espintrónica [20, 21]. Dentro de este campo, el estudio de la interacción espín-órbita es un tema de gran importancia como herramienta para controlar el espín del electrón. El más controlable y predominante de este tipo de acoplamientos es la interacción espín-órbita de Rashba [22, 23]. Este tipo de acoplamiento se hace presente cuando no hay simetría de inversión en la heteroestructura, de allí nuestro interés por estudiar la transición espontánea de espín en presencia de este tipo de acoplamiento.

Nuestro programa es entonces obtener las ecuaciones de Hartree-Fock, esta vez sin apantallamiento y para un 2DEG puro (modelo de *jellium*) en presencia del acoplamiento espín-órbita de Rashba, para luego estudiar la energía del estado fundamental y sus posibles fases ferromagnéticas.

Es importante notar que en la aproximación de HF sin interacción espín-órbita, los

estados de una partícula son ondas planas con estados puros de espín en la dirección z , ortogonal a la superficie del 2DEG. La inclusión de la interacción espín-órbita de Rashba hace que los estados de HF de una partícula tengan una intrincada e interesante textura de espín en el espacio de momentos.

En esta parte de la tesis, formulamos la teoría y obtenemos las ecuaciones de HF para el 2DEG puro en presencia de la interacción espín-órbita de Rashba. Nuestro principal resultado es la identificación de dos fases bien diferenciadas:

1. Una fase ferromagnética, con polarización parcial de espín en la dirección z , que sólo puede existir dentro de una ventana de densidades, dependiendo de la relación entre los parámetros de las interacciones de Rashba y de Coulomb.
2. Una fase paramagnética donde el espín de cada estado de partícula independiente de HF está contenido en el plano del 2DEG.

Estudiamos la competencia entre estas dos fases en función de la densidad electrónica del 2DEG y construimos un diagrama de fases con los parámetros relevantes del problema. Finalmente, interpretamos algunos resultados experimentales a la luz de nuestros desarrollos y analizamos el efecto de las correlaciones de Coulomb en presencia del acoplamiento Rashba.

1.6. Organización de la tesis

En el Capítulo 2 estudiamos la transición de Bloch en el marco de la aproximación de Hartree-Fock con apantallamiento de Thomas-Fermi. Analizamos el gas de electrones confinado en pozos cuánticos de profundidad infinita, en pozos cuánticos de profundidad finita y también en el caso del sistema bidimensional puro. En el Capítulo 3 desarrollamos el concepto de masas efectivas dependientes de la polarización de espín del estado fundamental de un gas de electrones bidimensional puro. Analizamos la transición de Bloch en base a esta idea y comparamos nuestros resultados con los provenientes del Método de Monte

Carlo para el modelo de *jellium*, para luego aplicarla a los sistemas cuasi-bidimensionales. En el Capítulo 4 dejamos de lado los sistemas cuasi-bidimensionales para concentrarnos en los efectos del acoplamiento Rashba sobre la transición de Bloch en el gas de electrones bidimensional puro. En el Capítulo 5 se efectúa un resumen final y una discusión general. Finalmente se elaboraron tres Apéndices, el Apéndice A contiene la información básica de la aproximación de Hartree-Fock para fermiones en el caso general. El Apéndice B contiene detalles de desarrollo de las ecuaciones originadas por la inclusión del acoplamiento Rashba que fueron presentadas en los capítulos anteriores. Por último, el Apéndice C contiene un conjunto de seis propiedades matemáticas que hemos encontrado en la principal ecuación que regula la transición de Bloch en presencia del acoplamiento Rashba.

Capítulo 2

Teoría de Hartree-Fock apantallado en pozos cuánticos

2.1. Las ecuaciones de Hartree-Fock en el cuasi-2DEG

En esta sección, describiremos las ecuaciones de Hartree-Fock para un sistema cuasi-2DEG siguiendo el método propuesto en la Ref. [24] para el potencial de Coulomb desnudo. Analizaremos los distintos términos del Hamiltoniano de HF de una partícula y agregaremos, sólo en uno de ellos, el término de apantallamiento de Thomas-Fermi. Dejaremos para la sección 2.2 la justificación de nuestro proceder.

En el cuasi-2DEG, la ecuación de HF puede ser escrita de la siguiente forma [24]

$$\left[E_n^{(\zeta)}(k) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_b^*} \right] \Phi_{nk}^{(\zeta)}(z) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_b^*} \frac{d^2}{dz^2} + V_{ext}(z) + V_{sc}^{(\zeta)}(z) \right] \Phi_{nk}^{(\zeta)}(z) - \frac{2\pi e^2}{\varepsilon} \frac{1}{A} \int dz' \sum_{n' \text{ ocup.}} \sum_{|\mathbf{k}'| < k_{Fn'}^{(\zeta)}} \frac{e^{-|\mathbf{k}-\mathbf{k}'||z-z'|}}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|} \Phi_{n'k'}^{(\zeta)*}(z') \Phi_{nk}^{(\zeta)}(z') \Phi_{n'k'}^{(\zeta)}(z), \quad (2.1)$$

donde $\Phi_{nk}^{(\zeta)}(z)$ es la función de onda de partícula única de HF de la subbanda n y $E_n^{(\zeta)}(k)$ es la correspondiente autoenergía para la misma subbanda del cuasi-2DEG, $m_b^* = 0.067m_e$ es la masa efectiva (siendo m_e la masa en reposo del electrón), $\varepsilon = 12.5$ es la constante dieléctrica, e es la carga del electrón, A es el area del cristal y \mathbf{k} es el vector de onda en el plano.

En todos nuestros cálculos tomamos al eje z como la dirección de crecimiento de la heteroestructura. Los parámetros masa efectiva m_b^* y constante dieléctrica ε corresponden a heteroestructuras de arseniuro de galio (GaAs) pero los resultados son aplicables a cualquier diseño experimental.

El índice ζ de polarización de espín tomará siempre los valores $\zeta = 0$ y $\zeta = 1$ dado que, en el 2DEG y a $T = 0$, no son posibles fases estables con polarización parcial de espín [6, 25]. Por el contrario, cálculos relativamente recientes en 3DEG indican que la transición no es de primer orden, sino más bien una transición continua, con estados estables de polarización parcial de espín [7]. Aquí haremos la suposición que el cuasi-2DEG se comportará como el 2DEG, para los anchos de pozo con los que vamos a trabajar.

El potencial autoconsistente $V_{sc}^{(\zeta)}(z)$ es la solución de la ecuación de Poisson y se lo puede escribir como

$$V_{sc}^{(\zeta)}(z) = -\frac{4\pi e^2}{\varepsilon} \left(\int_0^z dz' (z - z') n^{(\zeta)}(z') - \frac{N_s}{2} z \right), \quad (2.2)$$

donde N_s es la densidad superficial de los dopantes. La densidad electrónica dependiente de z es

$$n^{(\zeta)}(z) = \frac{2 - \zeta}{2\pi} \sum_{n \text{ ocup.}} \int_0^{k_{Fn}^{(\zeta)}} k dk |\Phi_n^{(\zeta)}(z, k)|^2. \quad (2.3)$$

El potencial externo $V_{ext}(z)$, en la Ec. (2.1), es la suma del potencial de confinamiento de la heteroestructura y el potencial electrostático generado por los donadores ionizados (ubicados simétricamente).

Los niveles de Fermi $k_{Fn}^{(\zeta)}$, para cada subbanda satisfacen la siguiente relación

$$2\pi(1 + \zeta)N_s = \sum_n k_{Fn}^{(\zeta)2}. \quad (2.4)$$

Antes de continuar, podemos observar que el lado derecho de la ecuación de HF para el cuasi-2DEG consta de dos términos, el primero es local y contiene al potencial exterior (de confinamiento y electrostático debido este último a los cargas positivas dadoras) y el potencial autoconsistente de los propios electrones, para cada subbanda. El segundo término es no local pudiéndose apreciar el acoplamiento entre las distintas subbandas. En el Apéndice A se muestra con más detalle el origen de estos términos a partir de una descripción más general.

Para resolver la Ec. (2.1) seguimos el método desarrollado en la Ref. [24]. Para ello, expandimos las autofunciones $\Phi_{nk}^{(\zeta)}(z)$ en la base de autofunciones de un electrón en un QW: $\{\phi_n(z), \epsilon_n\}$, es decir

$$\Phi_{nk}^{(\zeta)}(z) = \sum_p a_{pn}^{(\zeta)}(k)\phi_p(z). \quad (2.5)$$

Esta expansión nos permite escribir la ecuación de autovalores

$$\hat{H}^{(\zeta)}(k)\vec{b}_n^{(\zeta)}(k) = E_n^{(\zeta)}(k)\vec{b}_n^{(\zeta)}(k), \quad (2.6)$$

donde $\vec{b}_n^{(\zeta)}(k) = (a_{1n}^{(\zeta)}(k), \dots, a_{pn}^{(\zeta)}(k), \dots)^T$, es el vector columna formado por los coeficientes $a_{pn}^{(\zeta)}(k)$ de la expansión. Los elementos de matriz del operador Hamiltoniano $\hat{H}^{(\zeta)}(k)$ son

$$H_{tp}^{(\zeta)}(k) = \left[\epsilon_p + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_b^*} \right] \delta_{tp} + \langle \phi_t | V_{sc}^{(\zeta)} | \phi_p \rangle - V_{tp}^{(1)(\zeta)}(k) - V_{tp}^{(2)(\zeta)}(k). \quad (2.7)$$

A continuación describiremos cada uno de estos términos. Los elementos de matriz $V_{tp}^{(1)(\zeta)}(k)$ y $V_{tp}^{(2)(\zeta)}(k)$ vienen dados por

$$V_{tp}^{(1)(\zeta)}(k) = \frac{e^2}{\epsilon} \sum_{n'} \int_0^{k_{Fn'}} k' dk' \sum_{qr} G_{tr,qp}(k, k') a_{qn'}^{(\zeta)}(k') a_{rn'}^{(\zeta)}(k'), \quad (2.8)$$

y

$$V_{tp}^{(2)(\zeta)}(k) = \frac{e^2}{\epsilon} \sum_{n'} \int_0^{k_{Fn'}} k' dk' a_{pn'}^{(\zeta)}(k') a_{tn'}^{(\zeta)}(k') \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'| + q_s^{(\zeta)}}, \quad (2.9)$$

además $G_{tr,qp}(k, k')$ en la Ec. (2.8) es

$$G_{tr,qp}(k, k') = \int \int dz dz' \phi_t^*(z) \phi_r(z) \phi_q^*(z') \phi_p(z') \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \frac{e^{-|\mathbf{k}-\mathbf{k}'||z-z'|} - 1}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|}. \quad (2.10)$$

Hemos encontrado que las ecuaciones provenientes de la Ref. [24] tienen algunos errores de transcripción, los cuales fueron corregidos aquí. Hemos observado un factor 4π omitido en las Eqs. (12), (13) y (14) y un factor k incorrecto en la Eq. (14) de la mencionada referencia.

2.2. Apantallamiento de Thomas Fermi en el cuasi-2DEG

En esta sección, vamos a analizar y comparar los dos términos de interacción $V_{tp}^{(1)(\zeta)}(k)$ y $V_{tp}^{(2)(\zeta)}(k)$ de las ecuaciones (2.8) y (2.9). La diferencia que tienen estas expresiones con el desarrollo de la Ref. [24] está precisamente en la Ec. (2.9), en donde ya hemos introducido el término de apantallamiento de Thomas-Fermi dado por [26]

$$q_s^{(\zeta)} = (2 - \zeta)/a_B^*, \quad (2.11)$$

conocido como número de onda de Thomas-Fermi. Notemos que para el 2DEG no polarizado, este número es el doble que en el caso polarizado. Esto concuerda con el hecho que el efecto de las correlaciones de Coulomb es más fuerte en el 2DEG no polarizado que en el polarizado [4, 6]. Notemos también que $q_s^{(\zeta)}$ es independiente de la densidad electrónica en ambas fases.

Para sistemas 3DEG, la situación es bastante diferente debido a que en estos, además de que el número de onda de Thomas-Fermi depende de la densidad, el apantallamiento es más eficiente porque el potencial de Coulomb desnudo queda multiplicado por un factor

exponencial de atenuación: $V(r) \sim e^{-q_{TF}r}/r$. Esto no sucede en el 2DEG porque no existe un potencial analítico $V(r)$, sólo puede ser expresado como serie de potencias de funciones especiales, donde puede verse que $V(r) \sim 1/r^3$ para r suficientemente grande [2, 12].

Por otra parte, recordemos que el hecho que la interacción de Coulomb es de rango infinito, se evidencia en que su transformada de Fourier en el espacio de momentos

$$V(q = |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) = \frac{2\pi e^2}{\varepsilon} \frac{1}{q}, \quad (2.12)$$

diverge en $q = 0$. La idea del apantallamiento es justamente agregar el número de onda de Thomas-Fermi en el denominador de modo que, evitando esa divergencia, se simule un rango *efectivo* para la interacción. Es decir, se puede demostrar que si se sustituye a $V(q)$ por

$$V_s^{(\zeta)}(q) = \frac{2\pi e^2}{\varepsilon} \frac{1}{q + q_s^{(\zeta)}}, \quad (2.13)$$

se obtiene el apantallamiento correcto en el 2DEG [12]. Algo similar al caso 3DEG en donde el potencial apantallado en el espacio de momentos es $V(q) \sim 1/(q^2 + q_{TF}^2)$ cuya transformada en el espacio real 3D es precisamente $V(r) \sim e^{-q_{TF}r}/r$ (potencial de Yukawa).

Efectuando el reemplazo indicado por la Ec. (2.13) se obtiene la Ec. (2.9). Sólo introduciremos apantallamiento en este término y no en el denominador de la Ec. (2.10) por las razones que veremos en breve.

Notemos que el elemento de matriz $V_{tp}^{(2)(\zeta)}$, es el único que se mantiene cuando el ancho

del pozo d_W tiende a cero. En efecto, desarrollando la exponencial de la Ec. (2.10) a primer orden cuando $z \approx z'$ obtenemos,

$$G_{tr,qp}(k, k) = \int \int dz dz' \phi_t^*(z) \phi_r(z) \phi_q^*(z') \phi_p(z') |z - z'|, \quad (2.14)$$

de donde resulta $|G_{tr,qp}(k, k)| \sim d_W$ que tiende a cero cuando d_W tiende a cero. Esto indica que $V_{tp}^{(1)(\zeta)}(k)$ en la Ec. (2.8) no es de largo rango, como lo muestra la Ec. (2.14) válida también para $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ mostrando que no diverge en $q = 0$.

Para confirmar esto último, podemos hacer un breve análisis de ambos términos para la primer subbanda con $p = q = r = t = 1$ (límite de baja densidad que adoptaremos en la sección siguiente) y para $\zeta = 0$. En este caso, la contribución más importante a la Ec. (2.9) es cuando $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$, obteniendo

$$|V_{11}^{(2)(0)}| \sim \frac{e^2}{\varepsilon} \frac{1}{q_s^0} \int_0^{k_F^{(0)}} k' dk' a_{11}^{(0)2}(k') = 0.5 a_B^* \frac{e^2}{\varepsilon} \int_0^{k_F^{(0)}} k' dk' a_{11}^{(0)2}(k'), \quad (2.15)$$

y para la Ec. (2.8) también cuando $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$, resulta

$$|V_{11}^{(1)(0)}| \sim \frac{e^2}{\varepsilon} G_{11,11} \int_0^{k_F^{(0)}} k' dk' a_{11}^{(0)2}(k') = 0.207 d_W \frac{e^2}{\varepsilon} \int_0^{k_F^{(0)}} k' dk' a_{11}^{(0)2}(k'), \quad (2.16)$$

para un QW de profundidad *infinita*. Es decir, $|V_{11}^{(1)(0)}| < |V_{11}^{(2)(0)}|$ si $d_W < 2.4 a_B^*$ mostrando que es de igual o menor rango que el término del 2DEG puro.

2.3. La energía del estado fundamental de Hartree-Fock en el cuasi-2DEG

En lo que sigue, asumiremos que las densidades serán lo suficientemente bajas como para que sólo esté ocupada la primer subbanda y, por lo tanto, la suma sobre el índice discreto que la representa puede ser omitida en la Ec. (2.1).

Durante la resolución por iteración de la ecuación de autovalores (2.6), consideramos alcanzada la autoconsistencia en el paso l -ésimo cuando $|a_{pn}^{(\zeta)(l)}(k) - a_{pn}^{(\zeta)(l-1)}(k)| / |a_{pn}^{(\zeta)(l-1)}(k)| < 10^{-4}$ para todo p, n y k . De esta forma, obtenemos el conjunto de autofunciones y autoenergías $\{\Phi_{nk}^{(\zeta)}(z), E_n^{(\zeta)}(k)\}$ para $\zeta = 0$ y $\zeta = 1$, el cual nos permite escribir la energía del estado fundamental por partícula como (Apéndice A)

$$E_{HF}^{(\zeta)} = \frac{2 - \zeta}{4\pi N_s} \int_0^{k_F^{(\zeta)}} k dk \left[E_1^{(\zeta)}(k) + \tilde{\epsilon}_1^{(\zeta)}(k) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_b^*} \right], \quad (2.17)$$

con

$$\tilde{\epsilon}_1^{(\zeta)}(k) = \sum_n \epsilon_n |a_{n1}^{(\zeta)}(k)|^2. \quad (2.18)$$

Para poder revisar nuestros desarrollos y programas para el cuasi-2DEG en QWs cuando d_W tiende a cero, compararemos nuestros resultados con los que se obtienen para el 2DEG ideal usando el método de HF con apantallamiento de Thomas-Fermi [27]. En este caso, la energía del estado fundamental por partícula es

$$E_{HF2D}^{(\zeta)} = \frac{e^2}{2a_B^* \epsilon} \left\{ \frac{1 + \zeta}{r_s^2} - \frac{4}{\pi r_s} [2\zeta + \sqrt{2}(1 - \zeta)] \mathbf{I}(x_\zeta) \right\}, \quad (2.19)$$

con

$$\mathbf{I}(x_\zeta) = \int_0^1 \frac{x dx}{x + x_\zeta} [\arccos(x) - x\sqrt{1-x^2}], \quad (2.20)$$

donde x_ζ es el número de onda de Thomas-Fermi dependiente de la polarización dividido por $2k_F^{(\zeta)}$, que a continuación vamos a obtener.

Como sólo está ocupada la primer subbanda tenemos que la cantidad de electrones con polarización ζ es

$$N^{(\zeta)} = \frac{A}{2\pi} \int_0^{k_F^{(\zeta)}} k dk = \frac{A}{2\pi} (2 - \zeta) k_F^{(\zeta)2}, \quad (2.21)$$

y la densidad superficial del 2DEG resulta

$$4\pi N_s = (2 - \zeta) k_F^{(\zeta)2}. \quad (2.22)$$

Recordando que la distancia media entre electrones, medida en términos del radio efectivo de Bohr es $r_s = \frac{1}{\sqrt{\pi N_s a_B^*}}$, podemos obtener el número de onda de Fermi dependiente de la polarización

$$k_F^{(\zeta)} = \frac{2}{\sqrt{2 - \zeta} r_s a_B^*}, \quad (2.23)$$

lo que nos permite obtener

$$x_\zeta = \frac{q_s^{(\zeta)}}{k_F^{(\zeta)}} = \frac{1}{4}[\zeta + 2\sqrt{2}(1 - \zeta)]r_s. \quad (2.24)$$

Recordamos que estas expresiones no son válidas para valores intermedios de ζ , sólo son una forma abreviada para describir los estados de polarización $\zeta = 0$ y $\zeta = 1$.

2.3.1. Pozos cuánticos de profundidad infinita y transición de Bloch

A continuación presentamos las densidades críticas para la transición de Bloch, obtenidas mediante la aproximación de Hartree-Fock con apantallamiento de Thomas-Fermi, en pozos cuánticos de profundidad infinita dejando los efectos de penetración de la función de onda para la sección siguiente.

Para cada pozo de ancho d_W , se resuelve la ecuación de autovalores (2.6) y se obtienen $\{\Phi_{nk}^{(\zeta)}(z), E_n^{(\zeta)}(k)\}$ (siempre para la primer subbanda). Con estos autoestados y energías de HF, se busca la densidad crítica N_{sc} para la cual es $E_{HF}^{(1)} = E_{HF}^{(0)}$ utilizando las ecuaciones (2.17) y (2.18)

En la Fig. 2.1, se muestra la densidad crítica para pozos cuánticos de profundidad infinita, en donde no hay penetración de barrera, como una función del ancho del pozo d_W , en la aproximación de Hartree-Fock con apantallamiento, representada por los cuadrados llenos. Para controlar el procedimiento empleado, hemos calculado el punto límite para $d_W = 0$, que corresponde al 2DEG puro, utilizando la expresión dada por la Ec. (2.19) y los puntos restantes con la Ec. (2.17). El excelente empalme que se observa entre este punto

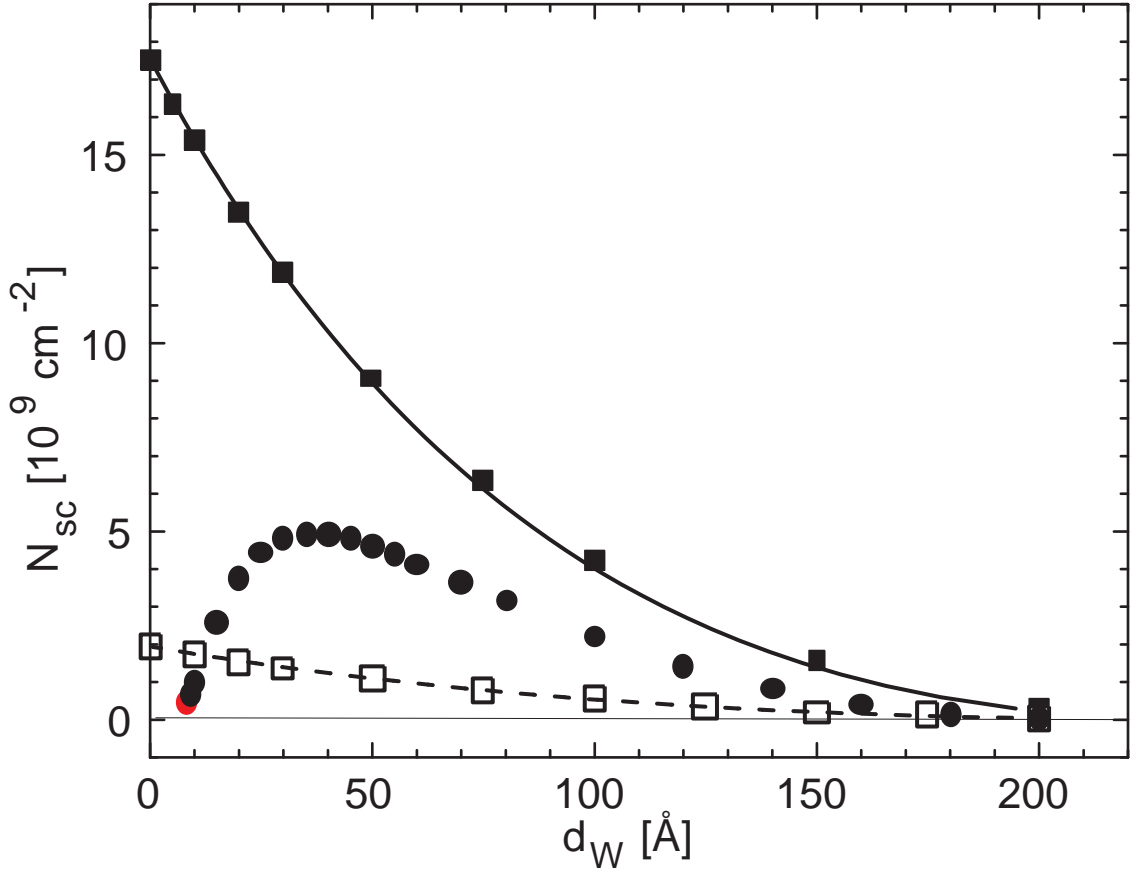


Figura 2.1: Dependencia de la densidad crítica con el ancho del pozo, en la aproximación de HF con apantallamiento. Los cuadrados llenos corresponden a pozos cuánticos *infinitos* y los círculos llenos a pozos *finitos* con una altura $V_b=247$ meV. Los cuadrados vacíos corresponden a pozos *infinitos* con masas efectivas dependientes de la polarización (sección 3.1) con una relación constante $f \equiv m_1^*/m_0^* = 0.65$. Las curvas con trazo continuo y discontinuo se obtienen con las Ecs. (2.37) y (3.3) (con $f = 0.65$), respectivamente, para pozos *infinitos*.

límite y su inmediato vecino del cuasi-2DEG, que fueron obtenidos con dos expresiones de origen muy diferente, confirma la validez de nuestros desarrollos.

Observamos que la densidad crítica para el pozo cuántico infinito es una función rápidamente decreciente del ancho d_W . En efecto, vemos que para un pozo angosto, de un ancho de alrededor de 50\AA , la densidad crítica cae aproximadamente a la mitad de su valor para el 2DEG puro.

En lo que sigue, mostraremos como este resultado puede ser explicado en términos de la interrelación entre las diferentes componentes de la interacción de intercambio en el cuasi-2DEG.

Decrecimiento monótono de la densidad de transición

En esta sección, vamos a aprovechar la condición de baja densidad debido a la sola ocupación de la primer subbanda, para realizar una serie de aproximaciones que nos permitirán obtener una expresión sencilla que relacione el ancho del pozo d_W con la densidad crítica N_{sc} y así poder encontrar que elementos originan tal dependencia.

Lo primero que podemos afirmar es que, a partir de la observación de nuestros resultados, los coeficientes de la expansión de la función de onda de HF de una partícula en la base del pozo, $a_{p1}^{(\zeta)}(k)$ de la Ec. (2.5), cambian muy poco con k y que $a_{11}^{(\zeta)}(k) \approx 1$ mientras que $a_{p1}^{(\zeta)}(k) \ll 1$ para $p > 1$. Esto nos permite aproximar de la siguiente forma

$$\Phi_{1k}^{(\zeta)}(z) = \sum_p a_{p1}^{(\zeta)}(k) \phi_p(z) \approx \phi_1(z). \quad (2.25)$$

Este hecho es consistente con la baja densidad electrónica del cuasi-2DEG porque, en este caso, la función de onda del estado fundamental debe ser muy parecida a la de un electrón en el QW vacío. Esta aproximación, nos permite escribir a la Eq. (2.9) como,

$$V_{11}^{(2)(\zeta)}(k) = \frac{1}{2\pi} \frac{e^2}{\varepsilon} \int_0^{k_F^{(\zeta)}} k' dk' \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'| + q_s^{(\zeta)}}, \quad (2.26)$$

y considerar que $V_{tp}^{(2)(\zeta)}(k) \approx 0$ para cualquier otro valor de t y p . Notemos que $V_{11}^{(2)(\zeta)}(k)$ es positivo, produciendo una contribución negativa e independiente de d_W a la energía de intercambio (ver Eq. (2.7)) y, al igual que en el 2DEG puro, es el responsable de la transición de Bloch en el cuasi-2DEG.

Utilizando las mismas aproximaciones para los coeficientes de expansión, podemos obtener también una expresión simplificada para $V_{tp}^{(1)(\zeta)}(k)$

$$V_{tp}^{(1)(\zeta)}(k) \approx \frac{e^2}{\varepsilon} \int_0^{k_F^{(\zeta)}} k' dk' G_{t1,1p}(k, k'), \quad (2.27)$$

Ahora, debemos encontrar una expresión aproximada para $G_{tr,qp}(k, k')$, dentro del mismo límite de baja densidad y una sola subbanda ocupada. Para ello, podemos expandir la exponencial en la Ec. (2.10) hasta primer orden, dado que el exponente satisface la siguiente desigualdad

$$|\mathbf{k} - \mathbf{k}'||z - z'| \leq 2k_F^{(\zeta)} d_W = 2\sqrt{2(1 + \zeta)} \frac{1}{r_s} \frac{d_W}{a_B^*} \leq 0.3, \quad (2.28)$$

para $r_s \geq 13$ (límite más bajo para la transición de Bloch según los cálculos de VMC)

y para un ancho de pozo $d_W \leq a_B^*$ ($= 98.7\text{\AA}$). Desarrollando la exponencial a primer orden tenemos

$$G_{t1,1p} \approx - \int \int dz dz' \phi_t^*(z) \phi_1(z) \phi_1^*(z') \phi_p(z') |z - z'|. \quad (2.29)$$

Sabemos que las funciones de onda $\phi_p(z)$ de un pozo cuántico, tienen simetría definida y una cantidad de nodos que viene dada por el índice p . En nuestra notación, $p = 1$ es el estado fundamental, es simétrico y no tiene nodos. Los estados con p impar, son simétricos y tienen $p - 1$ nodos. Mientras que los estados con p par son antisimétricos y también tienen $p - 1$ nodos. De acuerdo con esto, podemos ver que $G_{t1,1p} = 0$ si t y p tienen distinta paridad. Por otro lado, la contribución mayor siguiente a $G_{11,11}$ es cuando $t = p = 3$, que contiene cuatro nodos en el integrando, haciendo que la integral sea pequeña frente a $G_{11,11}$. Efectuando la integración en z y z' para pozos cuánticos *infinitos* obtenemos $G_{11,11} = -0.207d_W$ y entonces

$$V_{11}^{(1)(\zeta)} \approx -\frac{e^2}{2\varepsilon} k_F^{(\zeta)2} 0.207d_W. \quad (2.30)$$

Además asumimos que $V_{tp}^{(1)(\zeta)} \approx 0$ para el resto de los valores de t y p de igual paridad. De este modo, $V_{11}^{(1)(\zeta)}$ es negativo, proporcional a d_W e independiente de k .

Una observación que ya podemos hacer es que este término (negativo), que es exclusivo del cuasi-2DEG, compite con $V_{11}^{(2)(\zeta)}$ (positivo) que es propio del 2DEG puro, haciendo que el potencial de intercambio neto disminuya cuando el ancho del pozo aumenta. La única forma que el cuasi-2DEG tiene para restablecer la transición de Bloch es disminuir la

densidad (es decir k_F) para recuperar la diferencia perdida respecto del término de energía cinética, lo que explica la relación entre N_{sc} y d_W .

Si bien tenemos claro en lo cualitativo el papel opositor hacia la transición de Bloch que cumple el ancho del pozo, para tener una relación cuantitativa debemos obtener una versión simplificada de la energía del estado fundamental de HF, utilizando las mismas aproximaciones que hasta ahora.

Analicemos para ello el potencial autoconsistente $V_{sc}^{(\zeta)}$. Como la densidad es baja, podemos pensar que este potencial es una función lentamente variable de z obteniendo: $\langle \phi_t | V_{sc}^{(\zeta)} | \phi_p \rangle \approx 0$ (ver Eq. (2.7)) para los elementos no diagonales. Podemos asumir entonces que $H_{tp}^{(\zeta)}(k)$ es prácticamente diagonal, siendo su primer autovalor de energía

$$E_1^{(\zeta)}(k) \approx \epsilon_1 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_b^*} + \langle \phi_1 | V_{sc}^{(\zeta)} | \phi_1 \rangle - V_{11}^{(1)(\zeta)} - V_{11}^{(2)(\zeta)}(k). \quad (2.31)$$

Con esta expresión para $E_1^{(\zeta)}(k)$, podemos obtener una ecuación aproximada para las energías del estado fundamental de HF para cada polarización. Para esto, sólo necesitamos tener en cuenta que dado el comportamiento de los coeficientes $a_{p1}^{(\zeta)}(k)$ que venimos utilizando, es decir $a_{11}^{(1)}(k) \approx a_{11}^{(0)}(k) \approx 1$ y $a_{p1}^{(1)}(k) \approx a_{p1}^{(0)}(k) \approx 0$ para $p > 1$, puede verse fácilmente (de la Ec. (2.18)) que

$$\tilde{\epsilon}_1^{(\zeta)}(k) = \sum_n \epsilon_n |a_{n1}^{(\zeta)}(k)|^2 \approx \epsilon_1, \quad (2.32)$$

y de la Ec. (2.5), como ya lo hemos utilizado antes, $\Phi_{1k}^{(\zeta)}(z) \approx \phi_1(z)$. Incorporando esto último en la Ec. (2.3), podemos obtener una densidad $n(z)$ aproximada, dada por

$$n(z) \approx \frac{1}{2}(2 - \zeta)(1 + \zeta)N_s\phi_1^2(z) = N_s\phi_1^2(z), \quad (2.33)$$

independiente de ζ y, por lo tanto, una $\langle \phi_1 | V_{sc} | \phi_1 \rangle$ (ver la Ec. (2.2)) también independiente de ζ . Insertando la Ec. (2.31) en la Ec. (2.17) obtenemos, luego de algunos pasos algebraicos, la siguiente ecuación para el cambio de energía del estado fundamental entre ambas fases

$$E_{HF}^{(1)} - E_{HF}^{(0)} \approx \frac{\pi N_s e^2 a_B^*}{2\varepsilon} \left[1 + 0.207 \frac{d_W}{a_B^*} - 4F(N_s) \right], \quad (2.34)$$

donde

$$F(N_{sc}) = \int_0^1 x dx \int_0^1 x' dx' \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} d\varphi [g_1(N_{sc}, x, x', \varphi) - g_0(N_{sc}, x, x', \varphi)],$$

con

$$g_0(N_{sc}, x, x', \varphi) = \left[\sqrt{2\pi N_{sc} a_B^*} \sqrt{(x+x')^2 - 4xx' \sin^2 \varphi} + 2 \right]^{-1}, \quad (2.35)$$

y

$$g_1(N_{sc}, x, x', \varphi) = \left[\sqrt{\pi N_{sc} a_B^*} \sqrt{(x+x')^2 - 4xx' \sin^2 \varphi} + q_s^{(1)}/q_s^{(0)} \right]^{-1}, \quad (2.36)$$

donde $x \equiv k/k_F^{(0)}$ en g_0 y $x \equiv k/k_F^{(1)}$ en g_1 .

Teniendo en cuenta que el corrimiento de energía $E_{HF}^{(1)} - E_{HF}^{(0)}$ debe ser cero en la densidad de transición, podemos escribir la siguiente ecuación que relaciona el ancho del pozo d_W y la densidad crítica N_{sc}

$$1 + 0.207 \frac{d_W}{a_B^*} = 4F(N_{sc}), \quad (2.37)$$

que es la relación que estábamos buscando.

Finalmente, para poder asegurarnos de que la densidad de transición es una función decreciente del ancho del pozo, necesitamos convencernos de que $F(N_{sc})$ es también una función decreciente. Para ver esto, notemos primeramente que $g_1 > g_0$ para cualquier valor de su argumento, haciendo que $F(N_{sc})$ sea siempre positiva y permitiendo que Eq. (2.37) sea resoluble. Segundo, ambas g_0 y g_1 son funciones decrecientes de N_{sc} (para todo valor de x , x' y φ) y su diferencia $g_1 - g_0$, también lo es, haciendo que $F(N_{sc})$ sea también una función decreciente. Un aumento de d_W debe ser acompañado por una disminución de N_{sc} probando, de esta manera, que la dependencia monótona decreciente de N_{sc} con d_W es gobernada por la competencia entre las dos componentes de la interacción de intercambio: la componente en el plano representada por $F(N_{sc})$ y la componente fuera del plano dependiente de d_W y que es exclusiva del cuasi-2DEG.

El comportamiento de g_0 , g_1 y F , que describimos recientemente, también existe en el caso de HF sin apantallamiento, mostrando que la dependencia de N_{sc} con d_W se debe exclusivamente a la competencia entre los dos términos de la interacción de intercambio.

La validez de las aproximaciones utilizadas para obtener el anterior resultado puede verse en la Fig. 2.1 donde hemos representado con línea continua la solución de la Ec. (2.37). Esta curva aproxima muy bien a los valores exactos para un pozo *infinito* (cuadrados llenos), indicando a posteriori que las aproximaciones que efectuamos para obtenerla, que

parecían muy fuertes, están bien justificadas. Para las dos zonas definidas una por densidades bajas ($d_W \approx 200 \text{ \AA}$) y la otra por pozos de pequeño ancho ($d_W \leq 50 \text{ \AA}$), la curva continua aproxima en forma excelente a los cuadrados llenos dado que en este régimen, las aproximaciones que efectuamos se vuelven exactas. En la región intermedia ($d_W \approx 100 \text{ \AA}$), el acercamiento de la curva continua a los cuadrados llenos resulta aceptable.

Ancho límite del pozo cuántico

Una mirada a la Ec. (2.37) indica también que existe un límite superior para el ancho del pozo. En efecto, debido al decrecimiento de $F(N_{sc})$ y dado que $F(0)$ es finita, podemos obtener una ecuación para el ancho límite d_{WL}

$$1 + 0.207 \frac{d_{WL}}{a_B^*} = 4F(0). \quad (2.38)$$

De las ecuaciones (2.35) y (2.36) obtenemos

$$F(0) = \frac{1}{4} \left[\frac{q_s^{(0)}}{q_s^{(1)}} - \frac{1}{2} \right], \quad (2.39)$$

y reemplazando en la Ec. (2.38) obtenemos

$$0.207 \frac{d_{WL}}{a_B^*} = 4F(0) - 1 = \frac{q_s^{(0)}}{q_s^{(1)}} - \frac{3}{2}. \quad (2.40)$$

Es decir, debe ser $d_W < d_{WL} = 2.42a_B^* \approx 239 \text{ \AA}$ (en GaAs) para que los electrones confinados en el pozo puedan alcanzar el estado polarizado. Este novedoso resultado se debe enteramente al apantallamiento de Thomas-Fermi y no lo podemos encontrar en el caso de HF sin apantallamiento debido a que $F(0)$ diverge. Más aún, la relación entre los números de onda de Thomas-Fermi para ambas polarizaciones debe ser $q_s^{(0)}/q_s^{(1)} > 3/2$ (en nuestro caso es $q_s^{(0)}/q_s^{(1)} = 2$). De lo contrario, no es posible un estado polarizado en un QW. Este resultado clave, indica que el ancho del pozo juega un papel fundamental en la búsqueda de la polarización espontánea de espín en QWs [28]. En la sección siguiente, analizaremos el efecto de la penetración de la función de onda en las barreras de un pozo cuántico de profundidad *finita*.

2.3.2. Pozos cuánticos de profundidad finita y transición de Bloch

En esta sección, con la idea de acercarnos a la situación experimental, utilizaremos los resultados previos para analizar la densidad crítica de la transición de Bloch en pozos cuánticos de profundidad *finita*.

Los resultados se muestran en la Fig. 2.1 con círculos llenos. Hemos fijado la profundidad del pozo en $V_b = 247 \text{ meV}$, que es un típico valor experimental [13]. Esta curva exhibe una interesante dependencia no monótona con el ancho del pozo d_W , mostrando un máximo para $d_W \approx 35 \text{ \AA}$.

También observamos una reducción global de la densidad crítica, respecto de los pozos cuánticos de profundidad *infinita*. Esto se puede entender en términos del resultado previo (densidad crítica monótona decreciente para QWs *infinitos*) y la penetración de la función de onda electrónica en las barreras de AlGaAs. En efecto, la existencia de una barrera de potencial hace que la función de onda se extienda más allá del ancho nominal, produciendo un ensanchamiento efectivo del pozo. Como consecuencia, por ejemplo, un QW *finito* con un ancho $d_W \approx 60 \text{ \AA}$ tiene la misma densidad crítica que un QW *infinito* con $d_W \approx 100 \text{ \AA}$. Esto se debe a que la profundidad de penetración en una barrera: $d_B = \hbar/\sqrt{2m_b^*(V_b - E_1)}$,

crece cuando E_1 aumenta en la medida que d_W disminuye [11], debido a que la separación de niveles de energía en un pozo cuántico es inversamente proporcional a su ancho. Este efecto produce un punto de inflexión en $d_W \approx 75\text{\AA}$ y el mencionado máximo en $d_W \approx 35\text{\AA}$ debido a la competencia entre d_W y d_B . La competencia entre ambos parámetros, divide claramente a la densidad crítica para la transición de Bloch en dos zonas en donde: del máximo hacia la derecha, domina el ancho nominal d_W y del máximo hacia la izquierda domina la penetración d_B en las barreras.

Aquí tenemos un primer dato que puede resultar en una guía útil para la realización experimental, teniendo en cuenta que actualmente pueden construirse pozos cuánticos de unos pocos \AA de profundidad. La elección del ancho del pozo debe ser lo suficientemente cuidadosa como para quedar a resguardo de estos dos efectos mencionados en el párrafo anterior: un pozo más angosto puede ser menos *ideal* que otro más ancho.

Volvamos por un momento y para cerrar esta sección, a la curva para los QWs *infinitos* en la Fig. 2.1. El valor límite $N_{sc} = 17.5 \times 10^9 \text{cm}^{-2}$ ($d_W = 0$) corresponde a $r_{sc} = 4.32$, mostrando un incremento importante respecto de $r_{sc} = 2.01$, valor correspondiente al caso de HF sin apantallamiento [29]. Este incremento, sin embargo, no es suficiente si tenemos en cuenta el valor de $r_{sc} = 13$ obtenido en la Ref. [4] usando el método VMC. Esto es un indicador de que la aproximación de HF con apantallamiento, como era de esperar, no tiene en cuenta en su debida magnitud a las correlaciones de Coulomb.

En el capítulo siguiente, vamos a introducir el concepto de masa efectiva dependiente de la polarización de espín del estado fundamental.

Capítulo 3

Masas efectivas dependientes de la polarización de espín

3.1. Motivación

Para poder avanzar hacia situaciones más realistas y acercarnos a condiciones experimentales, debemos mejorar la forma de incorporar las correlaciones de Coulomb, para lograr que su efecto, sin apartarnos de la aproximación de HF con apantallamiento de Thomas-Fermi, se acerque a lo que se obtiene con el método de Monte Carlo para el modelo de *jellium*, en sus diversas variantes.

Dicho de otra forma, necesitamos un esquema de aproximación aplicable al cuasi-2DEG de tal manera que la densidad crítica se aproxime a los valores predichos por los cálculos de Monte Carlo [4, 5, 6] cuando el ancho d_W de un pozo cuántico de profundidad *infinita*, tienda a cero (2DEG puro).

Para este propósito, incorporamos a nuestro formalismo la idea de masas efectivas dependientes de la polarización: m_0^* (no polarizada) y m_1^* (polarizada). Lo que estamos proponiendo es que la masa efectiva de un electrón en el marco de la *mecánica cuántica de muchos cuerpos*, debe depender de la polarización del medio.

A la fecha de publicación del artículo en que derivó esta parte de la tesis [26], no existían evidencias o datos experimentales que indicaran la posibilidad de que en sistemas cuasi-2DEG, la masa efectiva dependiera del grado de polarización del estado fundamental. Tampoco existían desarrollos teóricos, en sistemas 2DEG o 3DEG dentro del modelo de *jellium*, que respaldaran tal idea.

Para apoyar nuestra hipótesis, recurrimos a desarrollos teóricos en donde se calcularon las masas efectivas para el 2DEG puro no polarizado [30, 31] y la energía del estado fundamental para ambas polarizaciones [4]. A continuación resumimos las conclusiones de esos trabajos que son relevantes en nuestro contexto:

1. Es un hecho conocido que la interacción de intercambio disminuye la masa efectiva, mientras que las correlaciones de Coulomb la modifican en sentido contrario, tanto en sistemas 2DEG como 3DEG [31].
2. Para el 2DEG en el modelo de *jellium*, cálculos efectuados con el método de Monte Carlo indican que el valor absoluto de la energía de correlación por partícula del estado fundamental, es considerablemente mayor en el no polarizado que en el polarizado, para un mismo valor de r_s [4, 6].
3. Para sistemas no polarizados, el valor absoluto de la energía de correlación por partícula, es mayor en el 2DEG que en el 3DEG [30].
4. Las masas efectivas para el 2DEG son substancialmente mayores que las del 3DEG, para un mismo valor de r_s [30].
5. La diferencia de energía de correlación por partícula, entre ambas fases, es mayor en el 2DEG que en el 3DEG [4].

Analizando esta enumeración de resultados teóricos, resulta natural concluir que las masas efectivas deben ser notoriamente diferentes para ambas polarizaciones. Debiendo ser la

masa efectiva m_0^* del *no polarizado*, substancialmente mayor que la masa efectiva m_1^* del *polarizado*, para cada valor de r_s .

En la sección siguiente, vamos a asumir la hipótesis de masas efectivas dependientes de la polarización pero, en un primer momento, lo haremos suponiendo que su relación es constante, es decir independiente de r_s , y dada por el factor $f = m_1^*/m_0^*$.

3.2. El caso bidimensional

El motivo que nos lleva a estudiar el caso bidimensional puro, es ajustar nuestra hipótesis de masas efectivas dependientes de la polarización en este sistema, en donde tenemos la posibilidad de utilizar las energías provenientes del método de Monte Carlo para el modelo de *jellium*, para luego extender los resultados que obtengamos al sistema cuasi-2DEG (en donde no existen cálculos de Monte Carlo).

3.2.1. Factor de masas independiente de la densidad

Como adelantáramos en la sección anterior, definimos el coeficiente $f = m_1^*/m_0^*$, por ahora independiente de r_s . El hecho que $f < 1$, nos obliga a revisar la definición de x_ζ , el cociente entre el número de onda de Thomas-Fermi y el doble del número de onda de Fermi, ambos dependientes de la polarización. Esto es así porque recordemos que el número de onda de Thomas-Fermi depende del radio efectivo de Bohr y este a su vez depende de la masa efectiva, ahora dependiente de la polarización. Si volvemos sobre los pasos para llegar a la definición de x_ζ en la Ec. (2.24), podemos ver que esta se convierte en

$$x_\zeta = \frac{1}{4}[f\zeta + 2\sqrt{2}(1 - \zeta)]r_s. \quad (3.1)$$

La energía del estado fundamental de HF, con apantallamiento y con la incorporación de masas efectivas dependientes de la polarización resulta (modificación de la Ec. (2.19)),

$$E_{HF2D}^{(\zeta)} = \frac{e^2}{2a_B^* \varepsilon} \left\{ \frac{1 + \zeta}{[(f - 1)\zeta + 1]r_s^2} - \frac{4}{\pi r_s} [2\zeta + \sqrt{2}(1 - \zeta)] \mathbf{I}(x_\zeta) \right\}, \quad (3.2)$$

recuperando la Ec. (2.19) si $f = 1$ cuando $m_0^* = m_1^*$.

Comparación con Monte Carlo Variacional

Mediante la Ec. (3.2), buscamos cual es el valor que debe tener el factor f para reproducir el valor crítico de r_s para el cual se produce la transición de Bloch mediante la aplicación del método de Monte Carlo variacional (VMC) [4], encontrando que $f = 0.65$ reproduce el valor buscado $r_{sc} = 13$.

Con este valor $f = 0.65$, hemos calculado las diferencias de energía del estado fundamental de HF, $E_{shift} = E_{HF2D}^{(1)} - E_{HF2D}^{(0)}$ en función de r_s , utilizando la Ec. (3.2). Los resultados se muestran en la Fig. 3.1 con la línea continua. Aquí, hemos tomado $e^2/2a_B^* \varepsilon = 1$ Ry para comparar nuestro E_{shift} con los resultados de Monte Carlo en donde utilizan el radio de Bohr no efectivo a_B , es decir la masa efectiva es la masa en reposo y la constante dieléctrica se considera igual a uno, de modo que allí sí es $e^2/2a_B = 1$ Ry.

Los círculos llenos corresponden a los resultados obtenidos por los autores de la Ref. [4] y los cuadrados vacíos provienen de la Ref. [5], usando el método VMC en ambos casos. Notamos un excelente acuerdo entre la curva continua y los puntos de Monte Carlo: ajustando un solo parámetro, nuestra curva aproxima muy bien a todos los puntos obtenidos en las Refs. [4, 5]. Este acuerdo entre la curva y los puntos indica que la relación entre ambas masas efectivas es prácticamente constante o depende muy poco de la densidad (para el método VMC), dando sustento a nuestra suposición de un factor f constante.

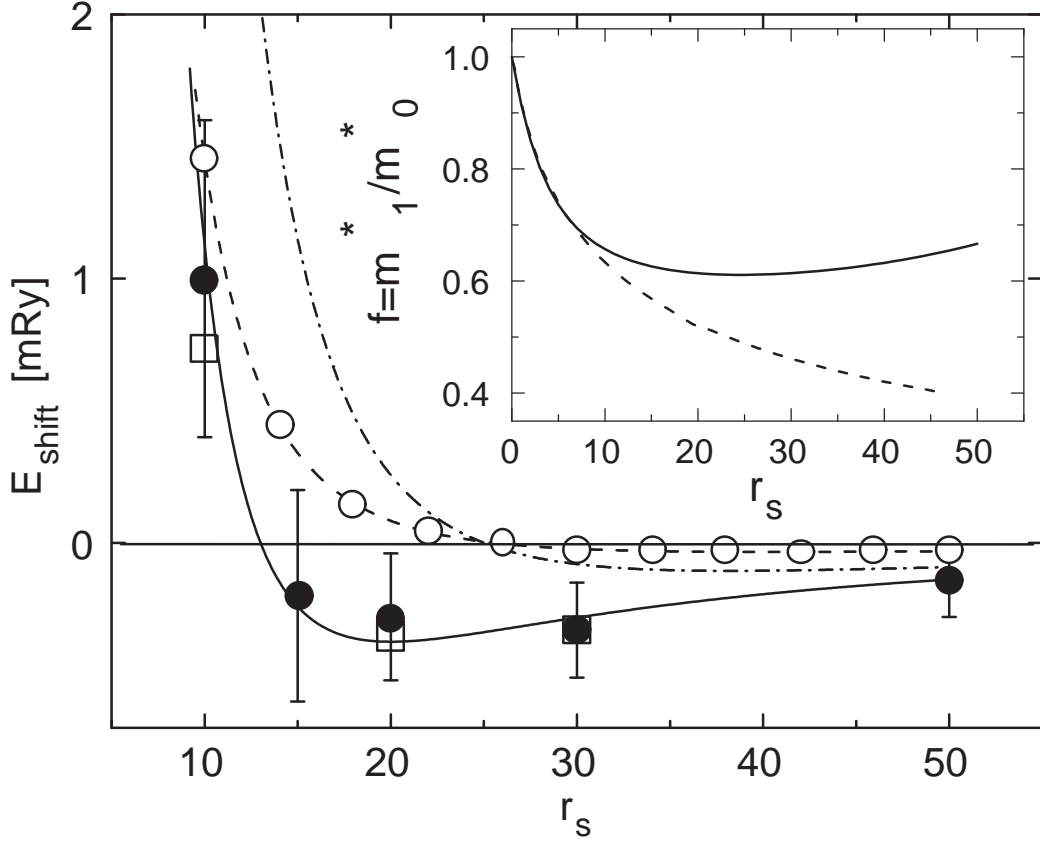


Figura 3.1: Variación de la energía del estado fundamental para las dos polarizaciones $E_{shift} = E_{HF2D}^{(1)} - E_{HF2D}^{(0)}$ versus r_s . Los círculos llenos corresponden a los reportados en la Tabla I de la Ref. [4]. Las barras de error denotan los errores típicos del método VMC. Los cuadrados vacíos corresponden a los valores tabulados en las Tablas I y II para el método VMC en la Ref. [5]. Por claridad, no fueron trazadas las barras de error en este caso. Los círculos vacíos provienen de la Ref. [6]. Las curvas de trazo continuo y discontinuo con puntos representan nuestros cálculos obtenidos con la Ec. (3.2) para masas efectivas dependientes de la polarización usando $f = 0.65$ y $f = 0.49$ respectivamente. La curva discontinua corresponde a los mismos cálculos pero usando el valor de f que viene de la curva $f(r_s)$ mostrada en la figura interior con línea discontinua. En la figura interior, las curvas con trazo continuo y discontinuo corresponden a los valores de f que aproximan las curvas E_{shift} de las Ref. [4] y Ref. [6] respectivamente.

Esta observación es consistente con el hecho que en la Ref. [30], se obtienen masas efectivas para el 2DEG no polarizado notablemente independientes de la densidad para $r_s > 5$. Seguramente, los cálculos para el 2DEG polarizado hubieran dado un comportamiento similar con r_s . En esta referencia se utilizó la aproximación de Hubbard modificada. Esta aproximación incluye efectos de correlación mediante la introducción del número de onda de Thomas-Fermi en el llamado factor de corrección de campo local. Interpretamos que nuestra incorporación de correlaciones por apantallamiento de Thomas-Fermi y efectos de HF es un esquema similar. Dicho de otro modo, creemos que nuestro modelo con f constante, los cálculos con el modelo de Hubbard modificado de la Ref. [30] y el Monte Carlo Variacional de la Ref. [4] estarían los tres en el mismo plano de aproximación en cuanto al tratamiento de las correlaciones de Coulomb.

Comparación con Monte Carlo por difusión

Ahora repetimos el análisis anterior pero para los datos obtenidos con el método FN-DMC utilizado por Attacalite *et al* [6]. En ese artículo, los autores obtienen $r_{sc} = 25$ y, tal como dijéramos en la introducción, es el valor más alto encontrado en la literatura para la polarización espontánea de espín en el 2DEG y a temperatura cero.

Encontramos que la Ec. (3.2) reproduce el valor $r_{sc} = 25$ cuando $f = 0.49$. En la Fig. 3.1 mostramos la variación de energías, $E_{shift} = E_{HF2D}^{(1)} - E_{HF2D}^{(0)}$, versus r_s , para el mencionado valor de f mediante la línea con rayas y puntos.

Es notable que el mismo procedimiento que utilizamos para con los datos de VMC, ahora no funciona adecuadamente dado que la curva no aproxima bien a los puntos de la Ref. [6], representados por círculos vacíos. Esto nos está indicando que la hipótesis de un factor de masas f constante, es decir independiente de r_s , ya no es aplicable para el método FN-DMC. Esto parece ser razonable si recordamos que en este método implementado por Attacalite *et al*, las correlaciones de Coulomb se introducían muy tempranamente mediante la utilización de las correlaciones de *backflow* en la construcción de la función de onda de prueba, hecho

que da a las correlaciones de Coulomb una preponderancia considerablemente mayor con respecto al método VMC. Para resumir, el método VMC nos estaría dando una relación de masas efectivas f constante y el método FN-DMC, con más énfasis en las correlaciones de Coulomb, estaría provocando su variación con la densidad. A este punto nos dedicaremos en la próxima sección.

3.2.2. Factor de masas dependiente de la densidad

De acuerdo al análisis del final de la sección anterior, un factor f dependiente de r_s sería lo adecuado para la comparación con los resultados provenientes del método FN-DMC implementado por Attacalite *et al* [6].

En esta referencia, los autores ponen a disposición una parametrización continua de la energía del estado fundamental dependiente de la polarización ζ . Aprovechando esta parametrización y utilizando la Ec. (3.2), hemos encontrado el factor $f(r_s)$ (ahora dependiente de r_s) que reproduce el E_{shift} que se obtiene de esta parametrización. Este factor f variable, está representado con línea punteada en la figura interior de la Fig. 3.1. La línea de rayas en la figura principal representa el $E_{shift} = E_{HF2D}^{(1)} - E_{HF2D}^{(0)}$ calculado con $f(r_s)$.

Por completitud, mostramos en la figura interior de la Fig. 3.1 el valor de f , como una función de r_s , que reproduce la diferencia E_{shift} obtenida por la parametrización encontrada por Ceperley (no mostrada en la parte principal de la figura) [4]. Esta curva exhibe una dependencia débil con r_s para $r_s > 10$ y se mantiene muy próxima a 0.65, concordante con la obtención de $f = 0.65$ como se muestra en la Fig. 3.1 (línea continua y símbolos).

Trabajos posteriores sobre masas efectivas dependientes de la polarización

Luego de la publicación del artículo correspondiente a esta parte de la tesis [26], surgieron nuevos trabajos, primero teóricos y luego experimentales, cuyos resultados confirmaron en forma cualitativa y cuantitativa nuestra hipótesis de masas efectivas dependientes de la polarización [18, 19, 32, 33, 34]. A continuación, describiremos los aspectos más relevantes

de algunos de estos trabajos con relación al tema que nos ocupa.

Desde el punto de vista teórico, Zhang y Das Sarma [18], sin tener conocimiento de nuestro trabajo [26] y con argumentos similares, introducen el concepto de lo que ellos llaman *masa efectiva espintrónica* calculando la *masa efectiva de muchos cuerpos* como función del parámetro r_s y la polarización ζ , mediante la aproximación RPA.

Asimismo, analizan una serie de trabajos experimentales [35, 36, 37, 38, 39] en donde se sostiene que la masa efectiva es independiente de la polarización. El análisis de Zhang y Das Sarma se basa en una crítica conceptual, vinculada a la polarización, en la obtención de los resultados experimentales, que a continuación describimos brevemente.

Todos los experimentos de este tipo utilizan un campo magnético externo para inducir oscilaciones de Shubnikov-de Hass (SdH) y de allí obtienen la masa efectiva en un cuasi-2DEG. Las oscilaciones SdH dependen de la masa efectiva, la temperatura y el campo magnético a través de la denominada fórmula de Dingle, de donde se extrae la masa efectiva, conocidos los otros dos parámetros y mediante el análisis de datos (*data fitting*). Todos estos experimentos se realizan en campos magnéticos perpendiculares que invariablemente polarizan el sistema. Es conceptualmente incorrecto, según Zhang y Das Sarma, asumir que la masa efectiva que se obtiene es a campo magnético cero porque la masa efectiva de hecho depende de la polarización. Esto se vuelve especialmente importante cuando la polarización se acerca a uno como ocurre en la Ref. [38]¹.

Volviendo a la parte de desarrollo del trabajo de Zhang y Das Sarma [18], en las Fig. 2 y Fig. 4 de dicha referencia, se puede obtener que $m_1^*/m_0^*(\equiv f) = 0,78$ para $r_s = 5$ y $m_1^*/m_0^* = 0,70$ para $r_s = 10$, en razonable acuerdo con los valores que se pueden encontrar en nuestra Fig. 3.1 (figura interior, curva continua) en donde: $f = 0,73$ para $r_s = 5$, $f = 0,65$ para $r_s = 10$ [4], y $f = 0,61$ para $r_s = 10$ (Attaccalite *et al* [6], figura interior,

¹ Anecdóticamente mencionamos que inicialmente, habíamos enviado nuestro trabajo a *Physical Review Letters* en octubre de 2003. Una crítica importante de uno de los referees fue justamente la existencia de este trabajo experimental, en donde supuestamente se mostraba que las masas efectivas eran independientes de la polarización.

curva punteada).

Por el lado experimental, Medini Padmanabhan *et al* [19] midieron las masas efectivas dependientes de la polarización mediante el análisis de la dependencia en temperatura de las oscilaciones de SdH para QWs de AlAs, de anchos entre 10 nm y 15 nm. De la Fig. 1 de la Ref. [19] se puede obtener $f = 0,59$ para $r_s = 10$. En realidad, este valor de f debe ser interpretado como una cota superior dado que en los valores de m_0^* que se obtienen con el método SdH siempre existe una polarización ζ pequeña pero no nula. Podemos notar que este valor experimental está mejor representado por los cálculos de Attaccalite *et al* [6] (curva punteada) correspondiente al método FN-DMC que por los de Ceperley [4] (curva continua) obtenidos con el método VMC.

Más allá de las diferencias entre ambos métodos de cálculo, recordemos que el primero (FN-DMC) incluye correlaciones de *backflow* en el determinante de Slater de la función de onda de prueba, como dijéramos en la introducción. En la sección siguiente vamos a aplicar la idea de masas efectivas dependiente de la polarización al sistema cuasi-2DEG.

3.3. El caso cuasi-bidimensional

En esta sección aplicaremos la aproximación de masas efectivas dependientes de la polarización al sistema cuasi 2DEG. Para ello debemos hacer una pequeña modificación a la Ec. (2.1). La misma se basa en que las masas efectivas m_b^* que aparecen a ambos lados de dicha ecuación corresponden a dos situaciones diferentes [11]:

- la m_b^* del lado izquierdo de la ecuación representa a la masa efectiva de los electrones que se desplazan en el plano y, por lo tanto, es afectada por las correlaciones de Coulomb en forma diferente según se trate del caso polarizado o no polarizado, de acuerdo con lo que vimos en la sección anterior.
- la m_b^* del lado derecho de la Ec. (2.1) se refiere a la masa efectiva de un electrón

que se mueve en la dirección z , gobernado principalmente por $V_{ext}(z)$ y $V_{sc}^{(s)}(z)$ y, de acuerdo con nuestra discusión sobre el apantallamiento en la Sección 2.2, no debería estar afectada por las correlaciones de Coulomb ni tampoco variar su masa efectiva con la polarización.

Teniendo en cuenta estos detalles, resolvemos la ecuación de autovalores Ec. (2.1) y usamos la Ec. (2.17), para ambas polarizaciones, incorporando las masas efectivas $m_0^* = m_b^*$ y $m_1^* = fm_b^*$ (esta última sólo en los términos del plano).

En la Fig. 2.1 representamos con cuadrados vacíos a los resultados obtenidos para QWs *infinitos* con $f = 0.65$. Calculamos el punto límite para $d_W = 0$ con la Ec. (3.2) y los puntos restantes con la Ec. (2.17), con el reemplazo de las masas efectivas mencionado anteriormente, dando un excelente empalme.

En la Fig. 3.2 mostramos, en escala logarítmica para el eje vertical, los resultados para QWs *finitos* (círculos) y QWs *infinitos* (cuadrados) en donde hemos tomado $f = 0.65$. Ambas curvas exhiben las mismas características generales que las de la Fig. 2.1 (cuadrados y círculos llenos) y que ya fueron analizadas.

A continuación, podemos obtener un ecuación equivalente a la Ec. (2.37) mediante la incorporación del factor f que multiplica a la masa m_b^* en la fase polarizada, resultando

$$\frac{2}{f} - 1 + 0.207 \frac{d_W}{a_B^*} = 4F(N_{sc}, f), \quad (3.3)$$

donde $F(N_{sc}, f)$ es la misma expresión que la que se muestra en la Eq. (2.35), pero con g_1 dada por

$$g_1(N_{sc}, x, x', \varphi) = \left[\sqrt{\pi N_{sc} a_B^*} \sqrt{(x + x')^2 - 4xx' \sin^2 \varphi} + f q_s^{(1)} / q_s^{(0)} \right]^{-1}. \quad (3.4)$$

Notemos que la aproximación de masas efectivas dependiente de la polarización, no cambia el resultado previo relativo al decrecimiento monótono de N_{sc} con d_W dado que $f < 1$. A su vez, observamos que las soluciones de la Ec. (3.3) mostrada en la Fig. 2.1 para $f = 0.65$ (curva discontinua), ajusta muy bien a los valores exactos (cuadrados vacíos).

Por otro lado, dado que $F(0, f) = \frac{1}{4}(\frac{2}{f} - \frac{1}{2})$, d_{WL} no depende de f (ver Ec. (3.3)). Es decir, en nuestro modelo de Thomas-Fermi, el ancho limite de pozo d_{WL} depende de las correlaciones via el cociente $q_s^{(0)}/q_s^{(1)}$ haciendo que, en consecuencia, la relación $d_{WL} = 2.42a_B^*$ sea universal es decir, es aplicable para QWs de cualquier material (el material determina el valor de a_B^*).

Nuevamente, comentamos que este interesante resultado no depende de las aproximaciones que utilizamos para obtener la Ec. (3.3) dado que estas se vuelven exactas en la medida que N_s tienda a cero.

Por otra parte, la ubicación en el eje de densidades del máximo observado permanece sin cambios con respecto al caso $f = 1$ (círculos llenos en la Fig. 2.1) de acuerdo con nuestra observación de que apantallamiento y correlaciones sólo se manifiestan en el plano.

Los triángulos hacia arriba (abajo) corresponden a QWs *infinitos* (*finitos*) en donde hemos adoptado como factor f al que se muestra en la curva de trazo discontinuo de la figura interior a la Fig. 3.1 (Attacalite *et al* [6]). Notamos en este caso una drástica disminución de la densidad de transición para ambos tipos de pozos. Observamos también que el intervalo de densidad para la polarización espontanea de espín mencionado en la introducción para el 2DEG ideal, aparece ahora notoriamente reducido para los QWs *finitos* estudiados aquí. En efecto, de la Fig. 3.2 obtenemos un nuevo intervalo para las densidades de transición en QWs *finitos* que va desde $N_{sc} = 3.2 \times 10^7 \text{cm}^{-2}$ hasta $N_{sc} = 6.1 \times 10^8 \text{cm}^{-2}$. Hemos tomado estos valores a partir de las densidades de transición correspondiente a los máximos de las curvas relativas a FN-DMC (triángulos hacia abajo) y VMC (círculos) respectivamente. En

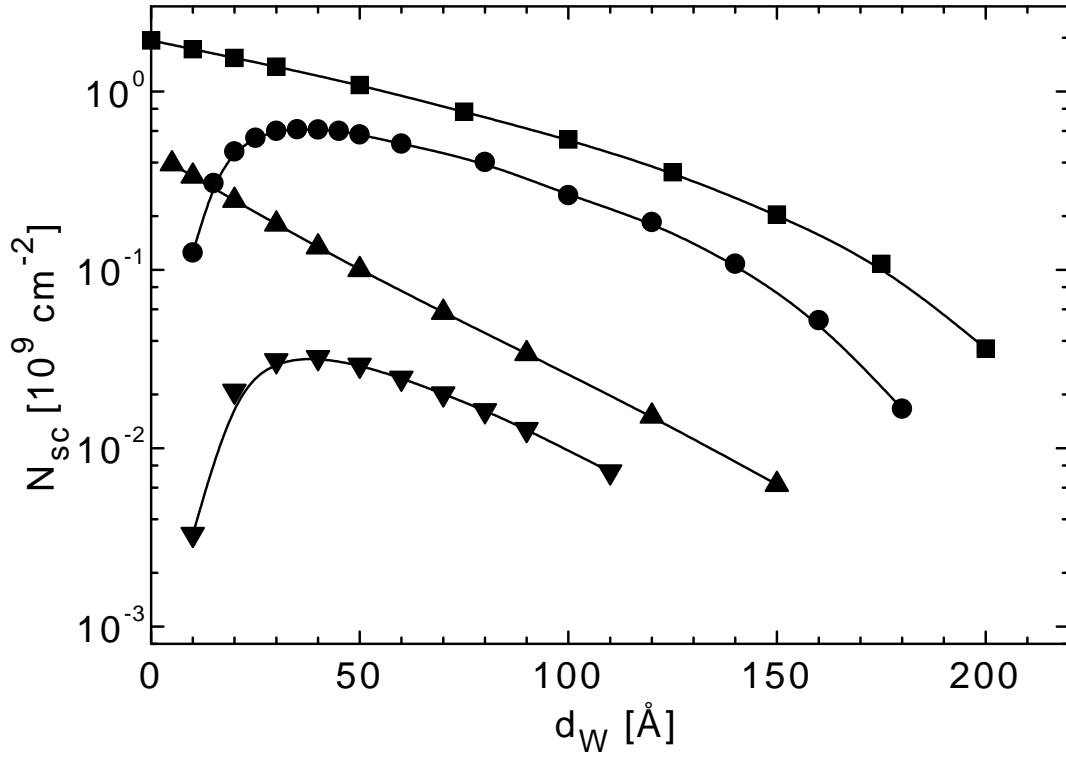


Figura 3.2: Dependencia de la densidad crítica con el ancho del pozo en la aproximación de HF con apantallamiento y masas efectivas dependientes de la polarización. Los cuadrados (círculos) corresponden a pozos *infinitos* (*finitos*) con una relación constante $f \equiv m_1^*/m_0^* = 0.65$. Los triángulos hacia *arriba* (*abajo*) corresponden a pozos *infinitos* (*finitos*) para una relación f que depende de r_s (línea discontinua en la figura interior de la Fig. 3.1).

la sección siguiente, vamos a analizar dos experimentos relativamente recientes en donde discuten la polarización espontanea de espín en el marco de sus resultados.

3.4. Comparación con el experimento

En la Ref. [17], fue medida la susceptibilidad de espín ($= m^*g^*$) en super redes de 200 láminas de GaAs/AlGaAs con pozos de GaAs de 100\AA y barreras de 30\AA de $\text{Al}_{0.32}\text{Ga}_{0.68}\text{As}$, con densidades tan bajas como $N_s = 1.7 \times 10^9 \text{cm}^{-2}$ ($r_s = 13.9$). Sin embargo, los autores advierten que no encontraron evidencias de una transición espontanea de espín o transición de Bloch.

De acuerdo a lo que ya hemos visto a esta altura, este resultado adverso no debería sorprender dado que hay dos posibles razones para ello:

- la densidad utilizada, si bien es lo suficientemente baja como para producir la transición en un 2DEG puro (al menos con el método VMC), es demasiado grande considerando el ancho finito para QWs *finitos*: para $d_W = 100 \text{\AA}$ (Fig. 3.2), la baja densidad electrónica lograda en la Ref. [17] es todavía aproximadamente 6 veces mayor que nuestra densidad crítica (círculos) que utiliza el factor $f = 0.65$ que ajusta los valores del 2DEG de la Ref. [4].
- debido al efecto túnel de los electrones en las barreras de AlGaAs, la super red actúa como un pozo simple de ancho extremadamente grande. Más aun, es posible que si el QW fuera lo suficientemente ancho, el cuasi-2DEG podría perder sus características bidimensionales haciendo posible fases estables con polarización parcial como las que son factibles en el caso 3D, haciendo más difícil la detección de la transición.

Volviendo a nuestra Fig. 3.2, notamos que los efectos combinados de correlaciones en el plano y el ancho finito de los pozos producen una drástica disminución de las densidades

de transición por un factor que va desde 3 a 15 dependiendo de cual método (VMC o FN-DMC, respectivamente) sea la mejor herramienta para estimar la densidad de transición en un 2DEG puro.

Basándonos en los resultados de nuestros cálculos, proponemos que las condiciones óptimas para poder observar la transición ferromagnética en QWs múltiples son:

- anchos de pozo entre 30\AA y 50\AA
- barreras anchas de AlGaAs para prevenir el efecto túnel
- profundidad del pozo V_b lo mayor posible para minimizar los efectos de penetración en las barreras

En un trabajo experimental relativamente reciente, Gosh *et al.* [40] consideran haber observado una posible transición espontánea de espín en sistemas cuasi bidimensionales. Estos autores utilizaron 2DEGs formados en heteroestructuras de GaAs/AlGaAs dopadas con Si, con densidades tan bajas como $N_s = 5 \times 10^9 \text{cm}^{-2}$ ($r_s = 7.6$). La temperatura fue mantenida en alrededor de $T = 40$ mK lo que equivale a $T/T_F \approx 0.02$ dado que $T_F = 2.3$ K para $r_s = 7.6$. De acuerdo con la interpretación que ellos hacen de sus propios datos, los autores encuentran polarización parcial de espín con un valor $\zeta = 0.2$. Atribuyen esta polarización parcial a un efecto de temperatura finita, dado que no puede haber polarización parcial de espín en un 2DEG a $T = 0$ [6, 25]. Sin embargo, en la Ref. [25] sus autores encuentran polarización parcial de espín para T/T_F entre 0.3 y 1.6, es decir, valor muy superior a $T/T_F = 0.02$, indicado en la Ref. [40]. Por otra parte, $r_s = 7.6$ es considerablemente menor al valor más bajo (VMC) para una polarización de espín en un 2DEG [4]. Volveremos a discutir este artículo en el capítulo siguiente cuando analicemos los efectos de la interacción espín-órbita del tipo de Rashba en la transición espontánea de espín.

Capítulo 4

Teoría de Hartree-Fock con interacción espín-órbita de Rashba

En los capítulos anteriores estudiamos, en el marco de la aproximación de Hartree-Fock, la influencia del ancho y la profundidad del pozo cuántico en la transición espontánea de espín o transición de Bloch. Analizamos el efecto de las correlaciones mediante la introducción de apantallamiento de Thomas-Fermi. También vimos como se modifican los valores de la densidad crítica de transición al introducir el concepto de masas efectivas dependientes del estado de polarización, idea que tiempo después y en forma independiente, fuera corroborada por trabajos teóricos y experimentales.

En este capítulo abandonaremos los sistemas cuasi-2DEG para volver al 2DEG estricto, es decir de ancho nulo, para investigar de qué manera es afectada la transición de Bloch, siempre en el marco de la teoría de Hartree-Fock, cuando se tiene en cuenta el acoplamiento espín-órbita de Rashba, presente en las heteroestructuras que no tienen simetría de inversión. No haremos uso del apantallamiento de Thomas-Fermi ni del concepto de masas efectivas dependientes de la polarización, por razones que veremos en el transcurso de este capítulo.

4.1. Acoplamiento Rashba y transición de Bloch

En principio, podemos preguntarnos porqué puede ser relevante conectar el acoplamiento Rashba con nuestro estudio sobre la polarización espontánea de espín en el gas de electrones bidimensional. Como vimos hasta aquí, es el término de intercambio de la interacción Coulombiana el responsable de dicha transición. En el gas de electrones libres, podemos acomodar los electrones en un círculo y todos con el mismo espín formando un estado fundamental polarizado, solo que este no será energéticamente favorable. Veremos en breve que, en cambio, con la incorporación de la interacción de Rashba, para el mismo gas de electrones sin interacción de Coulomb, no podemos formar un estado fundamental polarizado de espín sin deformar el círculo de Fermi. El programa es entonces, investigar si la interacción de intercambio logrará mantener la transición de Bloch en presencia de este tipo de acoplamiento espín-órbita, sin alterar la simetría circular del estado fundamental en el espacio de momentos.

En lo que sigue, vamos a introducir el problema y a repasar algunos aspectos conocidos de la interacción de Rashba que serán de suma utilidad, para luego entrar de lleno en la aproximación de Hartree-Fock con el agregado del término de Rashba en el Hamiltoniano de una partícula.

4.2. La interacción de Rashba

El Hamiltoniano del 2DEG, en presencia de la interacción espín-órbita de Rashba y de la interacción de Coulomb es

$$H = \sum_i H_{R,i} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j). \quad (4.1)$$

El segundo término representa la interacción Coulombiana entre los electrones, $v(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) = e^2/\varepsilon|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$, donde ε es la constante dieléctrica del semiconductor y e la carga del electrón, como vimos en la Ec. (2.1). En la medida de lo posible, y a pesar de que estamos enfocados en sistemas 2D puros, vamos a incorporar parámetros provenientes del problema real, que es cuasi-2DEG, como por ejemplo constante dieléctrica, masa efectiva de la banda de conducción, etc. El primer término es la suma de los Hamiltonianos de Rashba de un electrón. Estos últimos están dados por

$$H_R = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m^*} - i\alpha \langle E_z \rangle \left(\sigma_x \frac{\partial}{\partial y} - \sigma_y \frac{\partial}{\partial x} \right). \quad (4.2)$$

Aquí, m^* es la masa efectiva de la banda de conducción en el 2DEG, α es el coeficiente de Rashba en el material (también conocido como pre factor de acoplamiento) y $\langle E_z \rangle$ es el valor medio del campo eléctrico total en la dirección z (externo más autoconsistente) tomado sobre la función de onda $\psi_1(z)$ de la primer subbanda de la heteroestructura. Es, en definitiva, un parámetro estructural que se puede variar en el experimento, para un mismo material. Ambos, en conjunto, determinan la intensidad del acoplamiento de Rashba. Las matrices σ_x y σ_y son las matrices de Pauli

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.3)$$

4.2.1. Las energías del Hamiltoniano de Rashba

El Hamiltoniano de Rashba H_R puede ser diagonalizado analíticamente, obteniéndose los siguientes autoestados escritos en forma de espinor [22]

$$\psi_{\mathbf{k}s}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2A}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \begin{pmatrix} ise^{-i\varphi} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (4.4)$$

y los correspondientes autovalores de energía

$$E(k, s) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + s\alpha \langle E_z \rangle k. \quad (4.5)$$

En estas expresiones, \mathbf{k} es el vector de onda en el plano, φ es el ángulo entre \mathbf{k} y el eje x y A es el área del 2DEG, tal como indicáramos en la Ec. (2.1). El número cuántico de espín $s = \pm 1$ define dos ramas de energía, a diferencia del caso del electrón libre en donde su energía es $\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ independiente del espín. La diferencia de energía entre las dos ramas, para un dado k , viene dada por

$$\Delta E = E(k, +) - E(k, -) = 2\alpha \langle E_z \rangle k. \quad (4.6)$$

Cada rama representa un paraboloides de revolución en el espacio \mathbf{k} , representando la energía en el eje z . En la Fig. 4.1 mostramos estas energías en función de un impulso

adimensional $x = \frac{k}{k_{F-}}$. La rama con $s = +1$ es monótona creciente ($k \geq 0$) y la rama con $s = -1$ tiene un mínimo en $k_R = \alpha \langle E_z \rangle m^* / \hbar^2$. El valor de la energía en el mínimo es $\Delta_R = -\hbar^2 k_R^2 / 2m^*$.

Cuando la densidad es lo suficientemente baja como para que $r_s \approx 25$, un 2DEG sin interacción de Coulomb y con acoplamiento Rashba, solo alcanzará a ocupar la rama más baja y los estados tendrán su momento k ubicados en un entorno de semi ancho κk_R ($\kappa < 1$, es decir una fracción de k_R) alrededor de k_R . En este caso, el número de electrones es

$$N = \frac{A}{(2\pi)^2} \int_{k_R - \kappa k_R}^{k_R + \kappa k_R} d^2k = \frac{A}{\pi} \kappa k_R^2, \quad (4.7)$$

y entonces podemos obtener la siguiente relación

$$r_s = \frac{1}{\sqrt{\kappa} a_B^* k_R}. \quad (4.8)$$

Por ejemplo, para obtener $r_s = 25$ en un QW de GaAs con $a_B^* = 98 \text{ \AA}$, $\langle \alpha E_z \rangle = 10^{-11} \text{ eVm}$ y $m^* = 0.067m_0$ resulta $\kappa \approx 0.2$

En esta situación, la energía que un electrón necesita para pasar a ocupar la rama de energía mayor manteniendo su momento \mathbf{k} , estará bien representada por $k \approx k_R$, siendo su valor

$$4\Delta_R = 2\alpha \langle E_z \rangle k_R = \frac{2m^*}{\hbar^2} (\alpha \langle E_z \rangle)^2. \quad (4.9)$$

Los valores de $\alpha\langle E_z \rangle$ pueden variar según el material, la conformación del pozo cuántico, el valor del campo eléctrico E_z y la densidad del 2DEG. Para campos eléctricos elevados, del orden de $E_z \geq 30$ kV/cm, se puede obtener $\alpha\langle E_z \rangle \approx 10^{-11}$ eVm, en QWs de GaAs [23].

4.2.2. Ejes de cuantización de espín y acoplamiento Rashba

Además de diferenciar dos ramas de energía, el número cuántico s denota los autoestados con espín hacia *arriba* ($s = +1$) y espín hacia *abajo* ($s = -1$) con respecto a un eje de cuantización de espín, contenido en el plano x - y y perpendicular a \mathbf{k} , con un ángulo polar $\phi_R(\mathbf{k}) = \varphi - \pi/2$. Es decir, cada estado tiene su propio eje de cuantización de espín cuya dirección depende de la dirección del vector de onda \mathbf{k} pero no de su módulo (volveremos sobre la dependencia con $|\mathbf{k}|$ más adelante, cuando introduzcamos la interacción de Coulomb en el marco de la aproximación de HF en la siguiente sección).

Con espín hacia *arriba* o espín hacia *abajo* queremos significar lo siguiente: la dirección hacia *abajo* viene dada por la regla de la mano derecha, es decir, si el dedo pulgar apunta en la dirección \mathbf{z} y el dedo índice apunta en la dirección de \mathbf{k} , entonces el dedo medio señala hacia lo que denominamos *abajo* ($s = -1$).

Notemos entonces que si consideramos dos estados, uno con vector de onda \mathbf{k} y número cuántico de espín $s = +1$ y el otro estado con vector de onda $-\mathbf{k}$ pero perteneciente a la misma rama, es decir con $s = +1$, los ejes de cuantización de espín estarán en la misma recta pero orientados en sentidos opuestos. Esto hace que estos dos estados tengan espín opuesto 180° entre sí, haciendo que el espín total del par de estados sea cero. Este razonamiento lo podemos repetir para cada par de estados y en ambas ramas. La consecuencia inmediata es que el estado fundamental del gas de electrones libres, con el acoplamiento Rashba como única interacción, no puede estar polarizado y entonces es paramagnético [23].

Por otra parte, el Hamiltoniano de Rashba H_R tiene invariancia ante inversión tem-

poral. Esta invariancia requiere que $\psi_{\mathbf{k}s}(\mathbf{r})$ y $\psi_{-\mathbf{k}s}(\mathbf{r})$ sean pares de estados conjugados de Kramers con el mismo autovalor de energía $E(k, s)$ [41].

Notemos por último que si $\alpha = 0$ (o $\langle E_z \rangle = 0$), la Ec. (4.5) reproduce las energías del electrón libre pero no sucede lo mismo con los estados dados por la Ec. (4.4) que, al ser independientes de α , no pueden transformarse en los espinores $\frac{1}{\sqrt{2A}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ y $\frac{1}{\sqrt{2A}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ con los que se acostumbra describir al electrón libre. No obstante, los espinores dados por la Ec. (4.4) siguen siendo autoestados del Hamiltoniano del electrón libre debido a que la elección del eje de cuantización es totalmente arbitraria en este caso (el Hamiltoniano del electrón libre es independiente del espín).

4.3. Hartree-Fock y acoplamiento Rashba: formalismo

Aquí comenzamos con el planteo de la aproximación de Hartree-Fock, en presencia del acoplamiento Rashba en el Hamiltoniano de partícula única y para el modelo de *jellium*. En el Apéndice A se resume la aproximación de HF para fermiones desde un principio, de la cual tomaremos algunos resultados que allí se muestran con más detalle, para utilizarlos en el Apéndice B en donde se desarrollan más en detalle las ecuaciones que aquí se describen.

Como sólo estamos interesados en la búsqueda de soluciones homogéneas para el estado fundamental de HF, vamos a proponer que la parte espacial de los estados de HF de una partícula sigan siendo una onda plana como en la Ec. (4.4), pero la parte propiamente de espín la vamos a generalizar de modo que puedan ser escritos de la siguiente forma

$$\psi_{\mathbf{k}s}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{A}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \begin{pmatrix} \chi_+(\mathbf{k}, s) \\ \chi_-(\mathbf{k}, s) \end{pmatrix}. \quad (4.10)$$

Notemos que la onda plana $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ es autoestado del Hamiltoniano de HF de una partícula

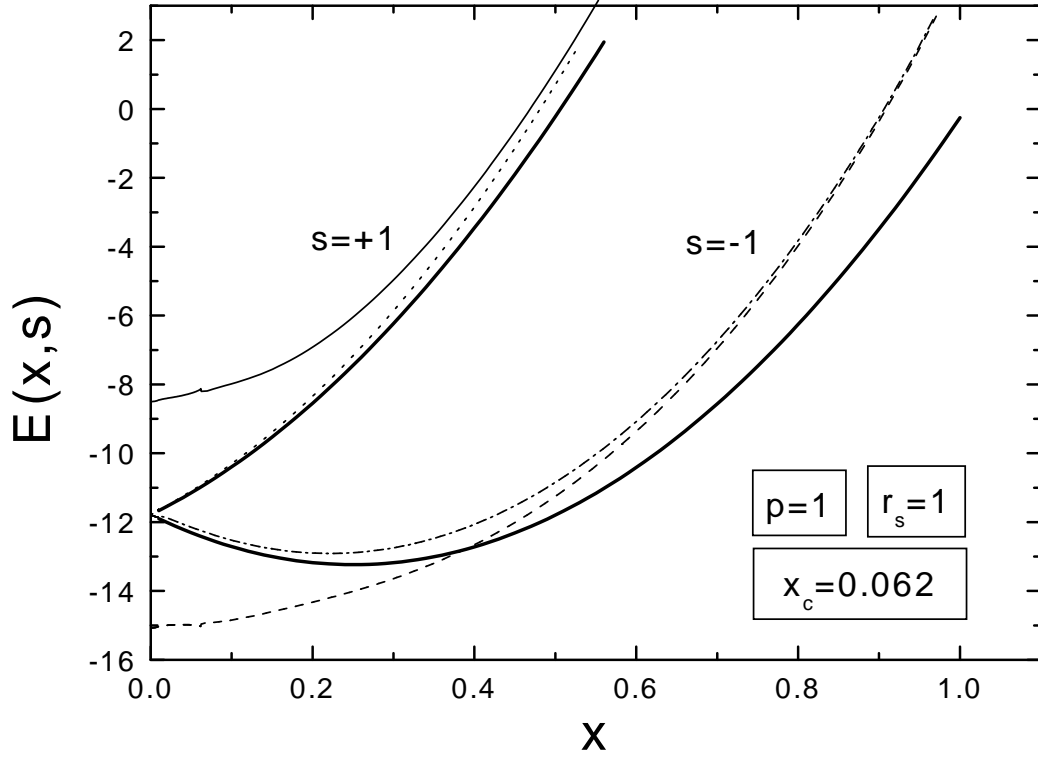


Figura 4.1: Las dos curvas de trazo lleno representan las energías de Rashba (sin interacción de Coulomb) para los dos estados de espín $s = \pm 1$ en función del impulso adimensional $x = \frac{k}{k_{F-}}$. Estas dos curvas están desplazadas hacia abajo para facilitar la comparación con las restantes, deben partir de cero cuando $x = 0$. Las restantes curvas corresponden a la sección 4.3.1. Las curvas con trazo continuo y discontinuo representan las energías de partícula única de Hartree-Fock en la fase OP, para los estados con $s = +1$ y $s = -1$ respectivamente. Las de trazo con línea de puntos y línea de puntos y rayas, muestran lo mismo pero para la fase IP. En todos los casos es: $p = \frac{2\alpha\langle E_z \rangle \varepsilon}{e^2} = 1$, $r_s = 1$ y $x_c = \frac{k_{F+}}{k_{F-}} = 0.062$.

para el 2DEG homogéneo y sin acoplamiento Rashba.

El espinor $\chi(\mathbf{k}, s)$ tiene componentes $\chi_{\pm}(\mathbf{k}, s)$ que son las que tenemos que determinar mediante el proceso variacional de HF. Notemos que mientras el espinor de Rashba de la Ec. (4.4) sólo depende del ángulo polar φ del vector de onda \mathbf{k} , las amplitudes $\chi_{\pm}(\mathbf{k}, s)$ ahora dependerán, además, del módulo de \mathbf{k} .

El número cuántico de espín $s = \pm 1$ denota, al igual que en el problema de Rashba sin interacción de Coulomb, los autoestados con espín hacia *arriba* y hacia *abajo* con respecto a un eje de cuantización de espín de dirección desconocida, dada por un vector unitario $\mathbf{u}(\mathbf{k})$ con ángulos polares $\theta(\mathbf{k})$ y $\phi(\mathbf{k})$. Es decir, estamos considerando la posibilidad que el eje de cuantización de espín ya no esté contenido en el plano x - y debido a que ahora, el ángulo $\theta(\mathbf{k})$ es arbitrario y no necesariamente $\pi/2$.

La funcional cuya variación tenemos que efectuar está dada por

$$\mathcal{F} = \sum_{s,i}^{N_s} \chi^\dagger(\mathbf{k}_i, s) [H_R(\mathbf{k}_i) - E(\mathbf{k}_i, s)] \chi(\mathbf{k}_i, s) - \frac{1}{2A} \sum_{ss',ij}^{N_s N_{s'}} v(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) \chi^\dagger(\mathbf{k}_j, s') \chi(\mathbf{k}_i, s) \chi^\dagger(\mathbf{k}_i, s) \chi(\mathbf{k}_j, s'), \quad (4.11)$$

donde N_s es el número de estados ocupados ² con $s = \pm 1$, $E(\mathbf{k}_i, s)$ son las energías de HF de una partícula, $v(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) = 2\pi e^2 / \varepsilon |\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j|$ es la transformada de Fourier de la interacción de Coulomb y la matriz de Rashba H_R es

² No debe confundirse con la densidad superficial electrónica que utilizamos en los capítulos anteriores. De aquí en adelante, n_s se referirá a la densidad superficial.

$$H_R(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \hbar^2 k^2 / 2m^* & i\alpha \langle E_z \rangle k e^{-i\varphi} \\ -i\alpha \langle E_z \rangle k e^{i\varphi} & \hbar^2 k^2 / 2m^* \end{pmatrix}. \quad (4.12)$$

Para lo que sigue, será conveniente expresar las amplitudes $\chi_{\pm}(\mathbf{k}, s)$ en función de los ángulos polares $\theta(\mathbf{k})$ y $\phi(\mathbf{k})$ del vector unitario \mathbf{u} del eje de cuantización de espín

$$\chi_+(\mathbf{k}, +) = \cos[\theta(\mathbf{k})/2] \exp[-i\phi(\mathbf{k})/2], \quad (4.13)$$

$$\chi_-(\mathbf{k}, +) = \sin[\theta(\mathbf{k})/2] \exp[i\phi(\mathbf{k})/2], \quad (4.14)$$

$$\chi_+(\mathbf{k}, -) = -\sin[\theta(\mathbf{k})/2] \exp[-i\phi(\mathbf{k})/2], \quad (4.15)$$

$$\chi_-(\mathbf{k}, -) = \cos[\theta(\mathbf{k})/2] \exp[i\phi(\mathbf{k})/2]. \quad (4.16)$$

Siguiendo el procedimiento indicado en los Apéndices A y B, extremamos la funcional de la Ec. (4.11) con respecto a las amplitudes $\chi_{\pm}^*(\mathbf{k}_i, s)$ y obtenemos las expresiones para las energías de HF de una partícula,

$$E(\mathbf{k}, s) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - s\alpha\langle E_z \rangle k \sin[\phi(\mathbf{k}) - \varphi] \sin \theta(\mathbf{k}) - \frac{1}{2A} \sum_{s', \mathbf{k}' \in \mathcal{D}_{s'}} v(\mathbf{k} - \mathbf{k}') [1 + ss' \mathbf{u}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{k}')], \quad (4.17)$$

donde el producto escalar es

$$\mathbf{u}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{k}') = \cos \theta(\mathbf{k}) \cos \theta(\mathbf{k}') + \sin \theta(\mathbf{k}) \sin \theta(\mathbf{k}') \cos[\phi(\mathbf{k}) - \phi(\mathbf{k}')]. \quad (4.18)$$

Con la Ecs. (4.17) y (4.18) tenemos resuelto el problema de HF pero sólo formalmente porque, en realidad, no conocemos las expresiones de $\theta(\mathbf{k})$ y $\phi(\mathbf{k})$. Para obtenerlas debemos pedir, además, que el Hamiltoniano de HF de una partícula sea diagonal en la base de los espinores de componentes $\chi_{\pm}(\mathbf{k}, s)$. De esta manera, obtenemos las siguientes dos ecuaciones que los ángulos polares $\theta(\mathbf{k})$ y $\phi(\mathbf{k})$ deben cumplir para producir dicha diagonalización:

$$2\alpha\langle E_z \rangle k \sin[\phi(\mathbf{k}) - \varphi] \cos \theta(\mathbf{k}) = \frac{1}{A} \sum_{s', \mathbf{k}' \in \mathcal{D}_{s'}} s' v(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \{ \sin \theta(\mathbf{k}) \cos \theta(\mathbf{k}') - \sin \theta(\mathbf{k}') \cos \theta(\mathbf{k}) \cos[\phi(\mathbf{k}) - \phi(\mathbf{k}')] \} \quad (4.19)$$

por la parte real y

$$2\alpha\langle E_z \rangle k \cos[\phi(\mathbf{k}) - \varphi] = \frac{1}{A} \sum_{s', \mathbf{k}' \in \mathcal{D}_{s'}} s' v(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \sin \theta(\mathbf{k}') \sin[\phi(\mathbf{k}) - \phi(\mathbf{k}')], \quad (4.20)$$

por la parte imaginaria.

En estas ecuaciones, los dominios \mathcal{D}_\pm son las regiones del espacio bidimensional recíproco ocupadas por los electrones (áreas de Fermi). Estos dominios, en principio, son desconocidos pero sus áreas deben ser iguales a N_\pm respectivamente

$$\sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{D}_s} = N_s, \quad s = \pm 1 \quad (4.21)$$

Desde el punto de vista matemático, las Ecs. (4.19) y (4.20) representan un problema de gran dificultad ya que estas son dos ecuaciones integrales acopladas, no lineales y auto-consistentes en el sentido que los dominios \mathcal{D}_\pm no se conocen a priori.

Comprobamos que la Ec. (4.17) se reduce a la Ec. (4.5) cuando no hay interacción de Coulomb. En efecto, en el problema de Rashba de una partícula el tercer término del lado derecho de la Ec. (4.17) es cero, $\theta(\mathbf{k}) = \pi/2$ y $\phi(\mathbf{k}) = \varphi - \pi/2$. Para este caso límite con $v(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \equiv 0$, puede verse que las Ecs. (4.19) y (4.20) son satisfechas trivialmente cuando $\theta(\mathbf{k}) = \pi/2$ y $\phi(\mathbf{k}) = \varphi - \pi/2$.

También se recuperan las energías de HF de una partícula cuando no hay acoplamiento Rashba ($\alpha \equiv 0$), pero sí interacción de Coulomb. En este caso, el eje de cuantización de espín debe estar en la dirección \mathbf{z} y por lo tanto $\mathbf{u}(\mathbf{k}) = \mathbf{u}(\mathbf{k}') = \mathbf{z}$, es decir, $\theta(\mathbf{k}) = 0$. Entonces, el segundo término del lado derecho de la Ec. (4.17) es cero y en la suma sobre s' del tercer término sólo quedan los términos con $s' = s$ debido a que $1 + ss' = 2\delta_{ss'}$, resultando $E(k, s) = \hbar^2 k^2 / 2m^* - (1/A) \sum_{\mathbf{k}' \in \mathcal{D}_s} v(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ que son las conocidas energías de HF para el 2DEG sin acoplamiento Rashba, donde los dominios \mathcal{D}_\pm son círculos de Fermi de radios $k_{F\pm}$ [42]. También en este límite, las Ecs. (4.19) y (4.20) se satisfacen trivialmente ya que $\alpha \equiv 0$ y $\theta(\mathbf{k}) = 0$.

En la sección siguiente, aprovechando las simetrías del sistema, vamos a poder simplificar el problema matemático y convertirlo en otro más manejable.

4.3.1. La solución isótropa de Hartree-Fock con acoplamiento Rashba

La inestabilidad de Pomeranchuk

La inestabilidad de Pomeranchuk (PI) [43] es una deformación de la esfera de Fermi en tres dimensiones o círculo en dos dimensiones, del estado fundamental, debido a la interacción entre las partículas. Estas deformaciones son clasificadas usualmente en canales de momento angular. El sistema, inicialmente homogéneo e isótropo, cuando se produce la inestabilidad de Pomeranchuk se vuelve anisótropo sin perder su homogeneidad. Para precisar, en un sistema 2DEG el número de onda de Fermi deja de ser una constante para pasar a ser una función $k_F(\varphi)$.

En ausencia de la inestabilidad de Pomeranchuk, los dominios \mathcal{D}_{\pm} deben tener simetría circular, es decir, deben ser círculos de radios $k_{F\pm}$. En lo que sigue, basándonos en la bibliografía existente, vamos a argumentar en favor de que la inestabilidad de Pomeranchuk no puede existir en nuestro sistema 2DEG en el modelo de *jellium*.

La cuestión de la ocurrencia de PI, en líquidos de Fermi con interacciones centrales e isótropas, es materia actual de estudio tanto en dos dimensiones (2D) como en tres dimensiones (3D) [44, 45]. En el caso de la interacción de Coulomb desnuda, que es nuestro caso, la teoría existente hasta el momento no está en condiciones de predecir o descartar categóricamente la existencia de PI. Sin embargo, una interacción de Coulomb con apantallamiento no produce PI [44], lo cual puede ser tomado como una indicación de que tampoco debería haber PI para la interacción de Coulomb desnuda. En general, es seguro asumir que no existe PI a menos que:

1. exista una longitud característica bien definida en la interacción
2. esta longitud característica sea mayor que la distancia media entre partículas [46]

Estas condiciones, claramente, no son satisfechas por la interacción de Coulomb desnuda

dado que no posee una longitud característica. Es seguro, entonces, asumir que los dominios de integración \mathcal{D}_{\pm} deben ser círculos de radios $k_{F\pm}$.

La simetría circular

La simetría circular de los dominios de integración nos lleva a pensar que la relación de dispersión $E(\mathbf{k}, s)$ representada por la Eq. (4.17) no debería depender de φ , al menos debería existir una relación de dispersión con la simetría del problema. Repasemos esta simetría:

1. la relación de dispersión en el problema de Rashba de un electrón es independiente de φ
2. la relación de dispersión en el 2DEG sin acoplamiento Rashba, en la aproximación de HF, es independiente de φ debido a que la transformada de Fourier del potencial de Coulomb $v(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \sim [k^2 + k'^2 - 2kk'\cos(\varphi - \varphi')]^{-1/2}$ depende de $|\varphi - \varphi'|$ y la dependencia en φ desaparece en la integración

Entonces, es natural proponer soluciones en donde $\theta(\mathbf{k})$ sea independiente de φ y $\phi(\mathbf{k})$ sea tal que $\phi(\mathbf{k}) - \phi(\mathbf{k}') = \varphi - \varphi'$. De esta forma, la dependencia en φ también desaparecerá luego de integrar en φ' en la Ec. (4.19).

Lo más natural, es proponer $\phi(\mathbf{k}) = \varphi - \pi/2$, como en el problema de Rashba de un sólo electrón [47]. Es decir, el eje de cuantización de espín está contenido en el plano definido por el eje z y el eje de cuantización del problema de Rashba de un electrón. De este modo, la Ec. (4.19) se convierte en

$$px \cos \theta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{x_c}^1 \int_0^{2\pi} \frac{x' dx' d\varphi'}{\sqrt{x^2 + x'^2 - 2xx' \cos(\varphi - \varphi')}} \times [\sin \theta(x) \cos \theta(x') - \cos \theta(x) \sin \theta(x') \cos(\varphi - \varphi')]. \quad (4.22)$$

Con la elección de $\theta(k)$ independiente de φ y $\phi(\varphi) = \varphi - \pi/2$, la Ec. (4.20) resulta satisfecha porque en el segundo miembro tenemos $\int_0^{2\pi} d\varphi' v[k, k', \cos(\varphi - \varphi')] \sin(\varphi - \varphi') = 0$ y el primer miembro es $\cos(\Phi - \varphi) = \cos(-\pi/2) = 0$.

Hemos introducido el parámetro $p = 2\alpha\langle E_z \rangle \varepsilon / e^2$ que indica el peso relativo del acoplamiento Rashba medido en términos de la interacción de Coulomb. El límite inferior de integración x_c contiene, como veremos en lo inmediato, la información de los dominios de integración \mathcal{D}_\pm , de simetría circular, introducidos anteriormente.

Antes de pasar a describir a x_c , queremos señalar que si θ es constantemente $\pi/2$, es una solución perfectamente aceptable para la Ec. (4.22). Es decir, el eje de cuantización de espín del problema de Rashba de un electrón también pueden serlo en la aproximación de HF. Nos referiremos a esta solución como la *solución trivial*, en el sentido matemático, a diferencia de la *solución no trivial* representada por la Ec. (4.22).

Los dominios circulares de integración \mathcal{D}_\pm

Volvamos ahora al origen del parámetro x_c . Teniendo en mente la relación de dispersión del problema de Rashba de un electrón, descrita por la Ec. (4.5), la situación puede resumirse como sigue: cuando las dos ramas están ocupadas (límite de alta densidad), los dominios \mathcal{D}_\pm son círculos de Fermi llenos, de radios $k_{F\pm}$, relacionados entre sí mediante $4\pi n_s = k_{F+}^2 + k_{F-}^2$, donde $n_s = (N_+ + N_-)/A$ es la densidad del 2DEG. En este caso es $x_c = k_{F+}/k_{F-}$ y, en principio, puede tomar cualquier valor tal que $0 < x_c < 1$ (decimos en principio porque veremos más adelante que no es realmente así).

Por otro lado, si sólo está ocupada la rama más baja (límite de baja densidad), existen dos posibilidades. Si la rama más baja proviene de la *solución trivial*, tiene un mínimo en $k \neq 0$ (como en el problema de Rashba de un electrón) y el estado con $k = 0$ no podrá ser alcanzado por los electrones porque es compartido con la rama de energía más alta, que está vacía. Entonces, definimos $x_c = k_{min}/k_{max}$ en donde $k_{min}(k_{max})$ son los radios de Fermi interior (exterior). Es decir, el dominio es un círculo de radio k_{max} con un agujero circular

central de radio k_{min} que los electrones no pueden ocupar. Ambos radios están relacionados mediante $4\pi n_s = k_{max}^2 - k_{min}^2$.

Si la rama más baja proviene de la *solución no trivial*, el estado con $k = 0$ será el de más baja energía (contrariamente al problema de Rashba de un electrón). Definimos a x_c como $x_c = 0$ y el dominio es un círculo lleno de radio k_{F-} .

En el caso en que las ramas de energía provengan de la *solución no trivial*, se produce un salto de energía entre las dos ramas en $k = 0$. Esta situación puede observarse en la Fig. 4.1 en donde el salto es de un poco más de 6 meV. La existencia de este salto viene acompañada por la desaparición de la degeneración de Kramers, debido a la formación de una magnetización espontánea del estado fundamental de HF. El teorema de Kramers nos dice que la degeneración debida a la invariancia reverso temporal de un sistema de espines semi enteros, sólo puede ser removida por un campo magnético. Volveremos a este punto un poco más adelante.

En el caso en que las ramas de energía provengan de la *solución trivial*, no habrá salto de energía en $k = 0$ entre ambas ramas, la magnetización del estado fundamental de HF es cero y la simetría reverso temporal se mantiene. En la Ec. (4.22), $x = |\mathbf{x}| \equiv |\mathbf{k}|/k_{F-}$ o $x = |\mathbf{k}|/k_{max}$, según el contexto que acabamos de describir.

Volvamos al hecho que los autoestados del problema de Rashba de un electrón ($\theta = \pi/2$ y $\phi = \varphi - \pi/2$) son la *solución trivial* de la Ec. (4.22). Lo mismo sucede en el caso del 2DEG sin acoplamiento Rashba: los estados de onda plana, que son autoestados del Hamiltoniano del electrón libre, son también autoestados del Hamiltoniano de HF de un electrón [42]. Nos referiremos a este tipo de estados *en el plano* (IP) como integrantes de la fase paramagnética y es la que mencionábamos anteriormente como aquella que tiene la rama de menor energía con un mínimo en $k \neq 0$. La solución *no trivial*, da lugar a la fase que llamaremos fase *fuera del plano* (OP) que, como veremos, es ferromagnética y es a la que nos referíamos como aquella en donde los estados con $k = 0$ tienen el menor valor de energía en la rama.

La ecuación integral angular

Antes de resolver la Eq. (4.22), podemos integrar analíticamente sobre la variable φ' y obtener una *ecuación integral angular* que depende de una sola variable de integración

$$px \cos \theta(x) = \sin \theta(x) \int_{x_c}^1 \frac{x' dx'}{x + x'} \cos \theta(x') K(\lambda) + \cos \theta(x) \int_{x_c}^1 \frac{x' dx'}{x + x'} \sin \theta(x') K(\lambda) - \cos \theta(x) \int_{x_c}^1 \frac{(x + x') dx'}{2x} \sin \theta(x') [K(\lambda) - E(\lambda)], \quad (4.23)$$

con

$$\lambda = \frac{2\sqrt{xx'}}{x + x'}. \quad (4.24)$$

Las funciones $K(\lambda)$ y $E(\lambda)$ son las integrales elípticas de primera y segunda clase respectivamente, multiplicadas por $2/\pi$

$$K(\lambda) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} (1 - \lambda \sin^2 \theta)^{-1/2} d\theta, \quad (4.25)$$

y

$$E(\lambda) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} (1 - \lambda \sin^2 \theta)^{1/2} d\theta. \quad (4.26)$$

En idéntica forma podemos obtener la expresión para las energías de HF (Apéndice B) obteniendo

$$\begin{aligned}
E(x, s) = & \frac{2}{r_s} \frac{U_e^*}{\sqrt{1+x_c^2}} \left\{ \frac{2}{r_s} \frac{x^2}{\sqrt{1+x_c^2}} + spx \sin \theta(x) - [F_+(x) + F_-(x)] \right. \\
& + s \left[\cos \theta(x) \int_{x_c}^1 \frac{x' dx'}{x+x'} \cos \theta(x') K(\lambda) \right. \\
& \left. \left. - \sin \theta(x) \int_{x_c}^1 \frac{x' dx'}{x+x'} \sin \theta(x') \left[\frac{2}{\lambda^2} [E(\lambda) - K(\lambda)] + K(\lambda) \right] \right] \right\}, \quad (4.27)
\end{aligned}$$

donde U_e^* es la constante de Rydberg efectiva en el material: $U_e^* = \frac{e^2}{2\epsilon a_B^*} = 5.8$ meV en GaAs. Las funciones $F_{\pm}(x)$ están desarrolladas en el Apéndice B.

A primera vista, parecería que la Ec. (4.23) tiene divergencias en $x = 0$ en el tercer término y, en los tres términos, cada vez que $x = x'$ cuando $x \geq x_c$ debido a que en este caso es $\lambda = 1$ y $K(\lambda = 1)$ diverge. Pero estas divergencias son sólo aparentes debido a que en primer lugar, $K(\lambda) - E(\lambda) \approx \lambda^2/2 = 2xx'/(x+x')^2$ cuando $x \approx 0$, cancelando la divergencia aparente en el denominador del tercer término y, en segundo lugar, podemos agrupar los términos con $x = x'$, aparentemente divergentes, y ver que son proporcionales a $K(\lambda)(1 - \lambda^2)$, cuyo límite es cero cuando $\lambda \rightarrow 1$ [48].

Debido a la simetría del problema y a la ausencia de inestabilidad de Pomeranchuk, hemos logrado transformar un problema matemático de difícil abordaje, como es el de solucionar en forma autoconsistente un sistema de dos ecuaciones integrales no lineales y acopladas (Ecs. (4.19) y (4.20)), en otro más sencillo: resolver una ecuación integral no lineal y dependiente de dos parámetros p y x_c .

La ecuación integral angular y el contexto matemático

Podríamos hacernos dos preguntas: (i) si la Ec. (4.23) tendrá solución única y (ii) si podrían existir otro tipo de soluciones para las Ecs. (4.19) y (4.20), con simetría diferente a la del problema que nos condujo a la *ecuación integral angular* (4.23).

Para responder a la pregunta (i), necesitamos tratar de clasificar o ubicar la *ecuación integral angular* en el contexto de las ecuaciones integrales no lineales existentes en la bibliografía [49, 50]. La primera clasificación sería ubicarla dentro del tipo de ecuaciones de Urysohn [51], que son ecuaciones integrales no lineales de la forma

$$\Phi(x) = \mu \int_a^b \mathcal{K}[x, s, \Phi(s)] ds, \quad x \in [a, b], \quad (4.28)$$

donde $\mathcal{K}(x, s, t)$ es una función dada, llamada núcleo, definida para $x, s \in [a, b]$ y $t \in (-\infty, \infty)$, μ es un parámetro numérico y Φ es la función desconocida. Urysohn investigó este tipo de ecuaciones y encontró que tenían soluciones positivas $\Phi(x, \mu)$ para valores de μ dentro de cierto intervalo $[\alpha, \beta]$.

Un caso especial de la ecuación de Urysohn es la ecuación de Hammerstein [52]

$$\Phi(x) = \mu \int_a^b \mathcal{K}[x, s] f[s, \Phi(s)] ds, \quad x \in [a, b], \quad (4.29)$$

donde $\mathcal{K}(x, s)$ y $f(s, t)$ son funciones conocidas. Hammerstein estableció teoremas de existencia y unicidad de soluciones para este tipo de ecuaciones. Un ejemplo de ecuación de Hammerstein es la *ecuación H* de Chandrasekhar [53], que tiene un papel importante en procesos de transmisión de radiación en estrellas de neutrones

$$H(t) = 1 + \frac{c}{2} \int_0^1 \frac{tH(t)H(s)}{t+s} ds. \quad (4.30)$$

Lo que destacamos es que estas ecuaciones, bajo ciertas condiciones de existencia y unicidad, tienen solución única y la misma se obtiene por el método de aproximaciones sucesivas. Si nuestras ecuaciones integrales acopladas (4.19) y (4.20), pudieran clasificarse como del tipo de Hammerstein, dado que al igual que la *ecuación H* de Chandrasekhar, contiene a la función desconocida en ambos miembros, podríamos decir que las soluciones dadas por la (4.23) junto con $\phi(\varphi) = \varphi - \pi/2$ serían las soluciones definitivas del problema y no deberíamos esperar otras. No hemos investigado sobre las condiciones de existencia y unicidad de las soluciones de las Ecs. (4.19) y (4.20) para poder descartar definitivamente la existencia de otras soluciones no halladas en esta tesis.

Propiedades de la ecuación integral angular

Una vez habiendo analizado brevemente el problema de la clasificación de la ecuación integral, volvamos a la cuestión del límite inferior de integración $x_c = \frac{k_{F+}}{k_{F-}} \left(= \sqrt{\frac{N_+}{N_-}} \right)$ que determina la población relativa de ambas ramas.

Hemos encontrado durante el proceso de cálculo que $x_c = \frac{k_{F+}}{k_{F-}}$ no puede ser arbitrariamente menor que uno sino que, para un dado valor del parámetro p , sólo existe solución *no trivial* $\theta(x)$ si x_c se mantiene inferior a un cierto valor máximo $x_{c,max}(p)$ que depende de p . En otras palabras, la existencia de la fase OP impone un límite superior a la población N_+ , de la rama de mayor energía ($s = +1$).

En la Fig. 4.2, la curva con círculos muestra la relación entre p y $x_{c,max}$ encontrada durante el proceso de cálculo. Si bien no hemos encontrado la relación analítica entre p y $x_{c,max}$, hemos logrado probar que x_c debe ser siempre menor que un cierto valor $x_{c,sup}(p)$ (Apéndice C), dado por la relación

$$x_{c,sup}(p) = \frac{1}{1 + \frac{\pi}{2}p}, \quad (4.31)$$

representada en la Fig. 4.2 por la curva con trazo de puntos. Puede verse de la figura que $x_{c,max}(p) < x_{c,sup}(p)$, es decir hemos obtenido un límite superior para x_c que es mayor que el $x_{c,max}(p)$ encontrado durante el proceso de cálculo pero, de todos modos queda probada la existencia de un límite superior para N_+ más allá del cual la fase OP no puede existir. A su vez mostramos como resultado del proceso de cálculo pero sin demostración rigurosa que x_c es mayor que un cierto valor $x_{c,inf}(p)$ dado por

$$x_{c,inf}(p) = 1 - \frac{\pi}{2}p, \quad (4.32)$$

que se muestra con trazo de rayas y puntos, en la misma figura. En particular, notemos que si $p > 1.57$ (valor notablemente próximo a $\pi/2$), no hay solución posible para ningún valor de x_c , es decir, la fase OP (ferromagnética) no puede existir en un 2DEG.

Una vez obtenidos los pares de puntos $x_{c,max} - p$, resolvemos la Ec. (4.23) por iteración aplicando el método de aproximaciones sucesivas para un dado p y para una serie de 36 valores de x_c igualmente espaciados en el intervalo $[0, x_{c,max}(p)]$.

Para resolver la *ecuación integral angular* comenzamos con una propuesta inicial $\theta_0(x) = 0$, la cual nos da $\theta_1(x)$ luego de integrar. Con $\theta_1(x)$ como una nueva entrada, obtenemos $\theta_2(x)$ y así siguiendo. Consideramos que la Ec. (4.23) está resuelta, cuando luego de n iteraciones $\theta_n(x)$ y $\theta_{n-1}(x)$ difieren en menos de 0.1 por ciento. Siguiendo este procedimiento para cada p , se obtienen distintas familias de soluciones rotuladas por p , cada una integrada por 36 soluciones con los valores de x_c igualmente espaciados en el intervalo $0 \leq x_c \leq x_{c,max}(p)$ que luego serán utilizadas para calcular las energías del estado fundamental en la fase OP. Es decir, fijada una densidad n_s y un valor del parámetro p , podremos elegir de esta familia

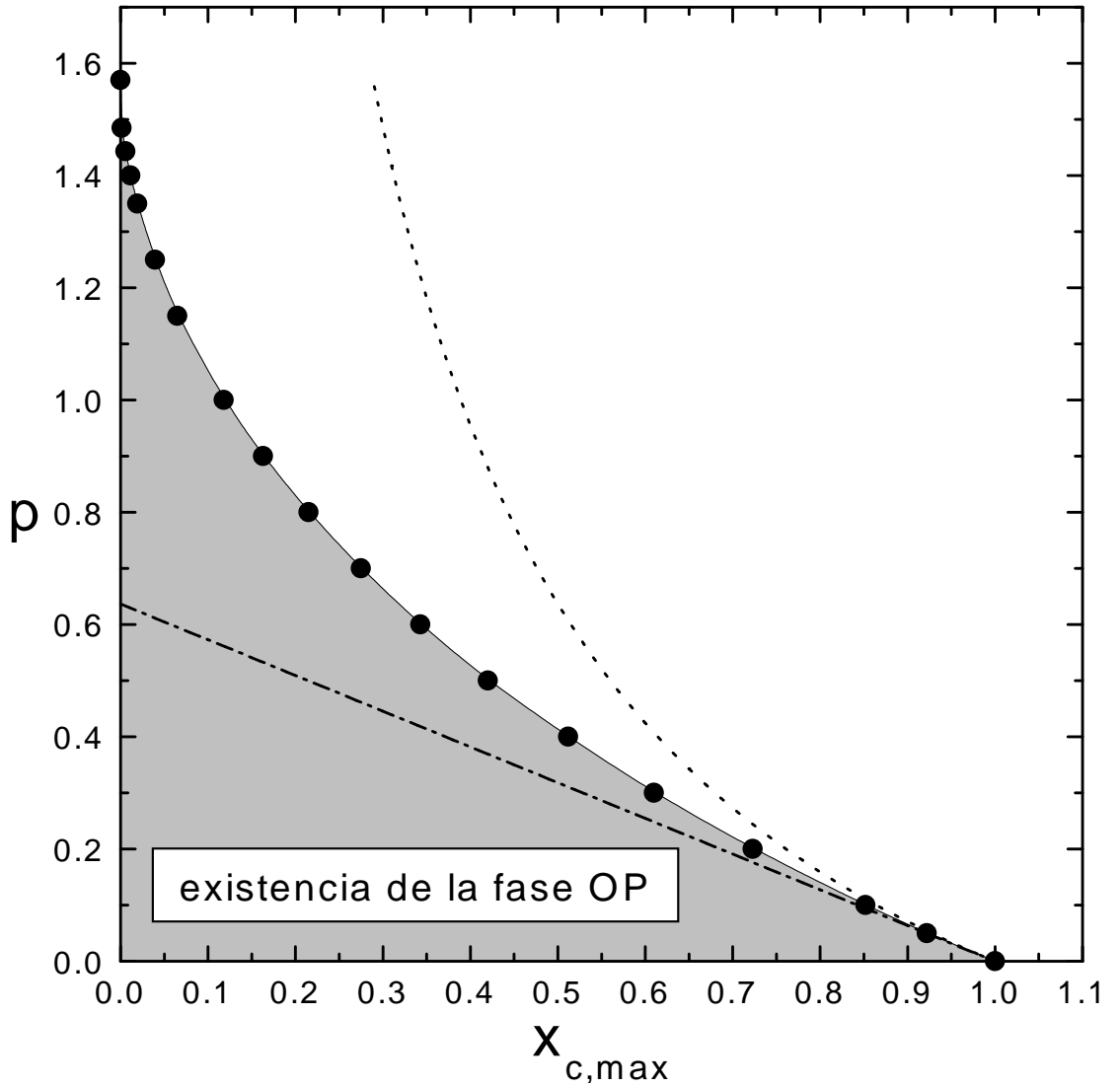


Figura 4.2: La curva con círculos representa la relación entre el parámetro $p = 2\alpha\langle E_z \rangle \varepsilon / e^2$ (que indica el peso relativo de la interacción de Rashba medida en términos de la interacción de Coulomb) vs. $x_{c,max}$, la relación máxima entre k_{F+} y k_{F-} más allá de la cual no hay solución para la *ecuación integral angular* (4.23). La zona sombreada es la región del espacio de parámetros $x_{c,max} - p$ donde puede existir la fase OP. La recta (rayas y puntos) es la cota inferior dada por $p = (2/\pi)(1 - x_{c,inf})$ y la curva punteada es la cota superior dada por $p = (2/\pi)(1/x_{c,sup} - 1)$, deducidas en el Apéndice C.

de soluciones cual será la que produzca la menor energía del estado fundamental dentro de dicha fase y también que valor tendrá $x_c = \sqrt{\frac{N_+}{N_-}}$, es decir la población relativa de ambas ramas.

A continuación vamos a enumerar las principales propiedades que hemos encontrado para las soluciones $\theta(x)$ de la Ec. (4.23) y que pueden verse en la Fig. 4.3:

- (i) $\theta(0) = 0$ para todo valor de p (la interacción espín-órbita de Rashba es nula cuando $k=0$ y, en consecuencia, el eje de cuantización de espín debe estar en la dirección \mathbf{z})
- (ii) $\theta(x)$ es una función monótona creciente para cualquier valor de los parámetros p y x_c
- (iii) $\theta(x)$ crece cuando p aumenta a $x_c = const$ y $x = const$
- (iv) a p y x fijos, $\theta(x)$ crece cuando x_c crece
- (v) $\theta(x)$ nunca cruza el valor $\pi/2$, es decir, el eje de cuantización de espín apunta siempre al semiespacio definido por $z > 0$. Con respecto a esto, podemos decir algo más: $\theta(x)$ nunca puede alcanzar el valor $\pi/2$ sin que toda la solución sea idénticamente $\pi/2$ para todo valor de x en su intervalo (la solución *trivial*)
- (vi) para un dado p , $x_{c,max}(p)$ es el último valor de x_c que produce una solución *no trivial* bien diferenciada de la solución *trivial* es decir $\theta(x, p, x_{c,max})$ es una curva límite.

La demostración de la mayoría de estas propiedades puede encontrarse en el Apéndice C. La propiedad (i), descrita en el párrafo anterior, nos permitió encontrar el valor de x_c para el cual las sucesivas iteraciones comenzaban a producir $\cos \theta(0) < 1$. Es decir, el incumplimiento de la propiedad (i) indica que se encontró el valor $x_{c,max}$. La repetición de este proceso para cada p , da lugar a la Fig. 4.2.

En la Fig. 4.3 mostramos algunas soluciones de la Ec. (4.23) para $p = 1.0$ y $p = 0.5$ y para los valores $x_c = 0$, $x_c = x_{c,max}$ y un valor intermedio para cada p .

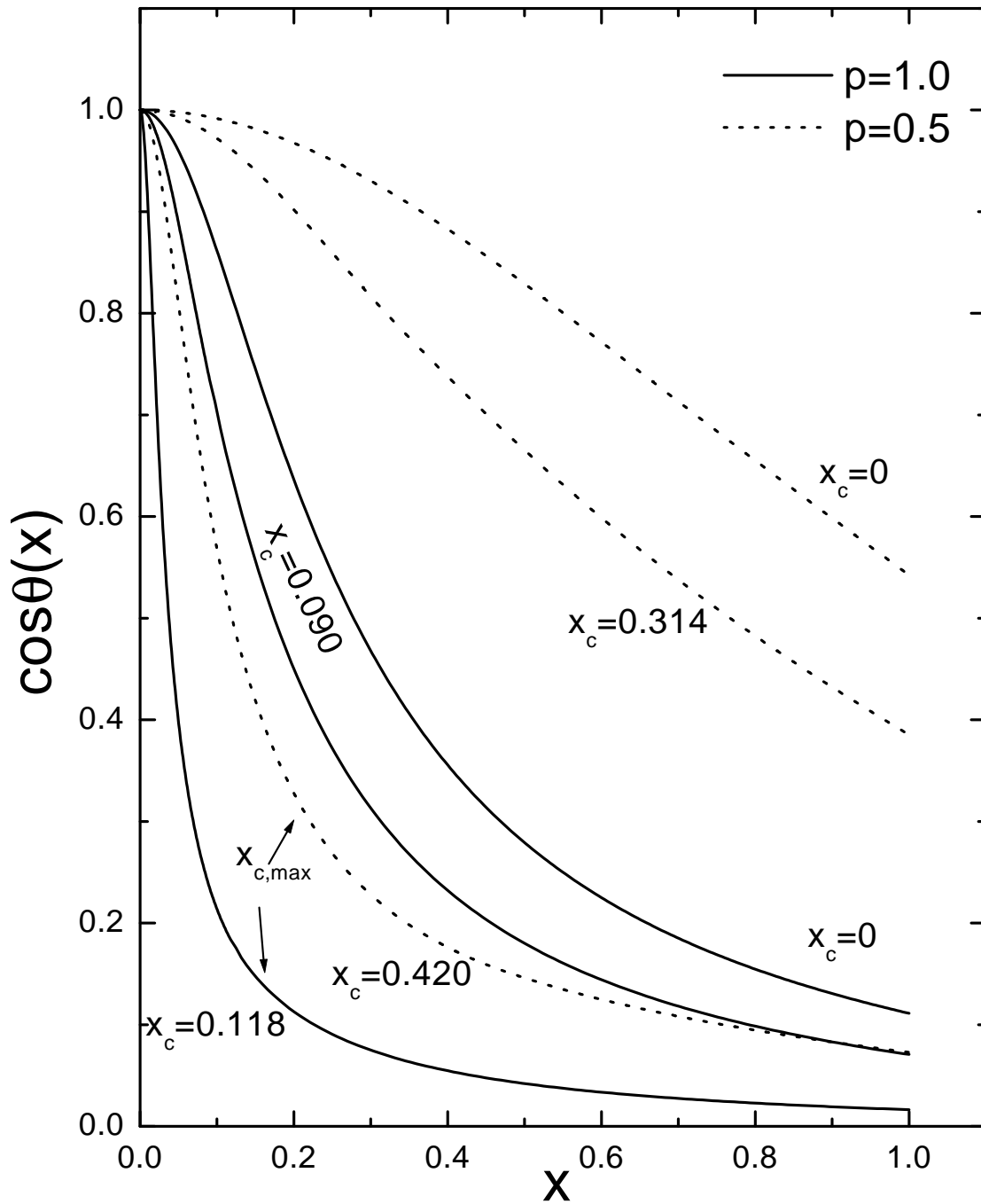


Figura 4.3: Soluciones de la *ecuación integral angular* (4.23): $\cos\theta(x)$. Las curvas con trazo continuo corresponden a $p = 1.0$ y las de trazo con línea de puntos a $p = 0.5$, para diferentes valores de $x_c \equiv k_{F+}/k_{F-}$: $x_c = 0$, $x_c = x_{c,max}$ y un valor intermedio para cada $p = 2\alpha\langle E_z \rangle \varepsilon / e^2$.

La Fig. 4.3 nos permite formarnos una imagen tridimensional de la ubicación del eje de cuantización de espín en el espacio 3D formado por el eje z y el plano definido por el vector \mathbf{k} , para los distintos estados. El eje describe un cono centrado alrededor del eje z , de apertura $\theta(k/k_{F-})$ cuando el vector de onda \mathbf{k} gira describiendo una circunferencia de radio k . Para k pequeño, el cono se cierra debido al predominio de la interacción de intercambio respecto del acoplamiento Rashba, que es débil en esa zona del círculo. En la medida que k aumenta, el cono se abre por el aumento del acoplamiento Rashba, que tiende a dirigir al eje de cuantización hacia el plano. La máxima apertura para cada k que el cono puede tener, sin caer hacia el plano, es cuando $x_c = x_{c,max}$. En este caso, los electrones con espín hacia *arriba* (o de *mano izquierda*) tienen un eje con una apertura máxima dada por $\cos\theta(x_{c,max})$. En cambio, los electrones con espín hacia *abajo* (o de *mano derecha*) tienen un eje de cuantización de espín con una apertura máxima mayor, dada por $\cos\theta(1)$.

Utilizando las propiedades de $\theta(x)$ en la Ec. (4.17), podemos expresar el salto de energía en $k = 0$ entre las dos ramas de la fase OP al que hacíamos referencia anteriormente como,

$$\Delta E = E(0, +) - E(0, -) = \frac{e^2}{\varepsilon} \frac{2}{r_s a_B^*} \frac{1}{\sqrt{1 + x_c^2}} \int_{x_c}^1 \cos\theta(x) dx. \quad (4.33)$$

En la fase IP es $\theta(x) = \pi/2$ y entonces $\Delta E = 0$. Es decir, la dos ramas parten del mismo punto al igual que en el caso de acoplamiento Rashba sin interacción de Coulomb. En la fase OP, en cambio, tenemos $\Delta E \neq 0$. En la Fig. 4.1 podemos ver claramente lo que acabamos de expresar, notando que $\Delta E \approx 6.5$ meV en la fase OP, para $r_s = 1$, $p = 1$ y $x_c = 0.062$.

Este salto no es una particularidad de la fase OP en el acoplamiento Rashba pues aparece también en la teoría de HF del 2DEG sin dicho acoplamiento. En efecto, fijando $\theta(x) = 0$ obtenemos $\Delta E = (e^2/\varepsilon)(k_{F-} - k_{F+})$ mostrando que el salto está indefectiblemente

relacionado con un estado fundamental polarizado, en donde $k_{F+} \neq k_{F-}$ (es decir, $N_+ \neq N_-$)³.

4.4. El estado fundamental de Hartree-Fock con acoplamiento Rashba

La tarea que sigue es determinar, dados p y r_s , cual de las dos fases OP e IP llevan a la menor energía del estado fundamental del 2DEG en la aproximación de Hartree-Fock.

4.4.1. Energía del estado fundamental de HF con acoplamiento Rashba

En la fase OP y para cualquier valor de x_c , es decir ambas ramas ocupadas o sólo ocupada la rama más baja, la energía del estado fundamental viene dada por

$$\frac{E_{HF}}{N} = \frac{U_e}{r_s} \left\{ \frac{2}{r_s} \frac{1+x_c^4}{(1+x_c^2)^2} - \frac{16}{3\pi} \frac{1+x_c^3}{(1+x_c^2)^{3/2}} - \frac{4}{(1+x_c^2)^{3/2}} \int_{x_c}^1 dx \left[px \sin \theta(x) + \frac{1}{2} \langle \mathbf{u}_{OP}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}_{OP}(\mathbf{x}') - 1 \rangle \right] \right\}, \quad (4.34)$$

donde, recordemos que, $r_s \equiv 1/\sqrt{\pi n_s} a_B^*$, n_s es la densidad superficial, a_B^* es el radio de Bohr efectivo en el material ($a_B^* = 98.7 \text{ \AA}$ en GaAs) y $U_e = e^2/2\epsilon a_B^*$ es una constante de energía (la constante de Rydberg efectiva en el material).

Para la fase IP y sólo para el caso en que ambas ramas están ocupadas, es decir x_c representa al cociente de los radios de Fermi k_{F+}/k_{F-} , la energía del estado fundamental

³ Una expresión idéntica para ΔE multiplicada por $2/\pi$ puede obtenerse en un 3DEG: ver la expresión para ϵ_k^\pm cuando $k \rightarrow 0$ en la p. 82 de la Ref. [42]

viene expresada por

$$\frac{E_{HF}}{N} = \frac{U_e}{r_s} \left\{ \frac{2}{r_s} \frac{1+x_c^4}{(1+x_c^2)^2} - \frac{16}{3\pi} \frac{1+x_c^3}{(1+x_c^2)^{3/2}} - \frac{4}{(1+x_c^2)^{3/2}} \int_{x_c}^1 x dx \left[px + \frac{1}{2} \langle \mathbf{u}_{IP}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}_{IP}(\mathbf{x}') - 1 \rangle \right] \right\}, \quad (4.35)$$

La energía del estado fundamental de HF para la fase IP cuando sólo está ocupada la rama de energía más baja resulta

$$\frac{E_{HF}}{N} = \frac{U_e}{r_s} \left\{ \frac{2}{r_s} \frac{1+x_c^2}{1-x_c^2} - \frac{16}{3\pi} \frac{1+x_c^3}{(1-x_c^2)^{3/2}} + \frac{8}{3} \frac{1+x_c^2}{(1-x_c^2)^{3/2}} E(x_c) - \frac{8}{3} \frac{1}{(1-x_c^2)^{1/2}} K(x_c) - \frac{4}{(1-x_c^2)^{3/2}} \int_{x_c}^1 x dx \left[px + \frac{1}{2} \langle \mathbf{u}_{IP}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}_{IP}(\mathbf{x}') - 1 \rangle \right] \right\}, \quad (4.36)$$

donde x_c representa al cociente de los radios k_{min} y k_{max} . Los productos escalares son

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{u}_{OP}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}_{OP}(\mathbf{x}') - 1 \rangle &= \int_{x_c}^1 \frac{x' dx'}{x+x'} [\cos \theta(x) \cos \theta(x') - 1] K(\lambda) \\ - \sin \theta(x) \int_{x_c}^1 \frac{x' dx'}{x+x'} \sin \theta(x') K(\lambda) &+ \sin \theta(x) \int_{x_c}^1 \frac{(x+x') dx'}{2x} \sin \theta(x') [K(\lambda) - E(\lambda)], \end{aligned} \quad (4.37)$$

y

$$\langle \mathbf{u}_{IP}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}_{IP}(\mathbf{x}') - 1 \rangle = -2 \int_{x_c}^1 \frac{x' dx'}{x+x'} K(\lambda) + \int_{x_c}^1 \frac{(x+x') dx'}{2x} [K(\lambda) - E(\lambda)]. \quad (4.38)$$

Los primeros dos términos de la Ec. (4.34) se deben exclusivamente a la aproximación de HF para el 2DEG sin acoplamiento Rashba [16]. El tercer término, en cambio, sólo existe cuando está presente este acoplamiento. A su vez, la primera parte de este último se debe exclusivamente a Rashba, mientras que la segunda depende de ambos acoplamientos.

Si el acoplamiento Rashba es cero, el eje de cuantización representado por el vector unitario \mathbf{u}_{OP} estará en la dirección \mathbf{z} anulando dicho término. Si la interacción de Coulomb es cero, los términos que contienen a $K(\lambda)$ y $E(\lambda)$ como factor no existirían ya que estos provienen de la integración angular de la interacción Coulombiana.

Por otro lado, la Ec. (4.36) sólo tiene sentido cuando hay acoplamiento Rashba dado que presupone que el dominio de integración es un círculo con un agujero circular central que los electrones no pueden ocupar es decir, requiere de una rama de energía que tenga un mínimo como función de k .

Para resumir, la Ec. (4.34) no tiene restricciones para la fase OP. La Ec. (4.35) es sólo para la fase IP y está limitada al caso en que están ocupadas ambas ramas ($x_c = k_+/k_- > 0$). Por otro lado, la Ec. (4.36) sólo vale para la fase IP y en el caso en que sólo esté ocupada la rama más baja ($x_c = k_{min}/k_{max} > 0$).

Notemos que las ecuaciones (4.35) y (4.36) coinciden en el caso límite $x_c = 0$ para la fase IP. En efecto, $E(0) = K(0) = 1$ y los productos escalares, dados por las Ecs. (4.37) y (4.38), son iguales cuando $\theta(x) = \pi/2$ para todo valor de x .

4.4.2. Diagrama de fases en el espacio de parámetros $p - r_s$

Dados p y r_s , el valor de x_c que minimiza la energía de cada fase es obtenido numéricamente, de allí la necesidad de tener una familia de soluciones de la Ec. (4.23) para cada p , con una cantidad razonable de valores de x_c entre $x_c = 0$ y $x_c = x_{c,max}(p)$ para la fase OP (en nuestro caso 36 valores).

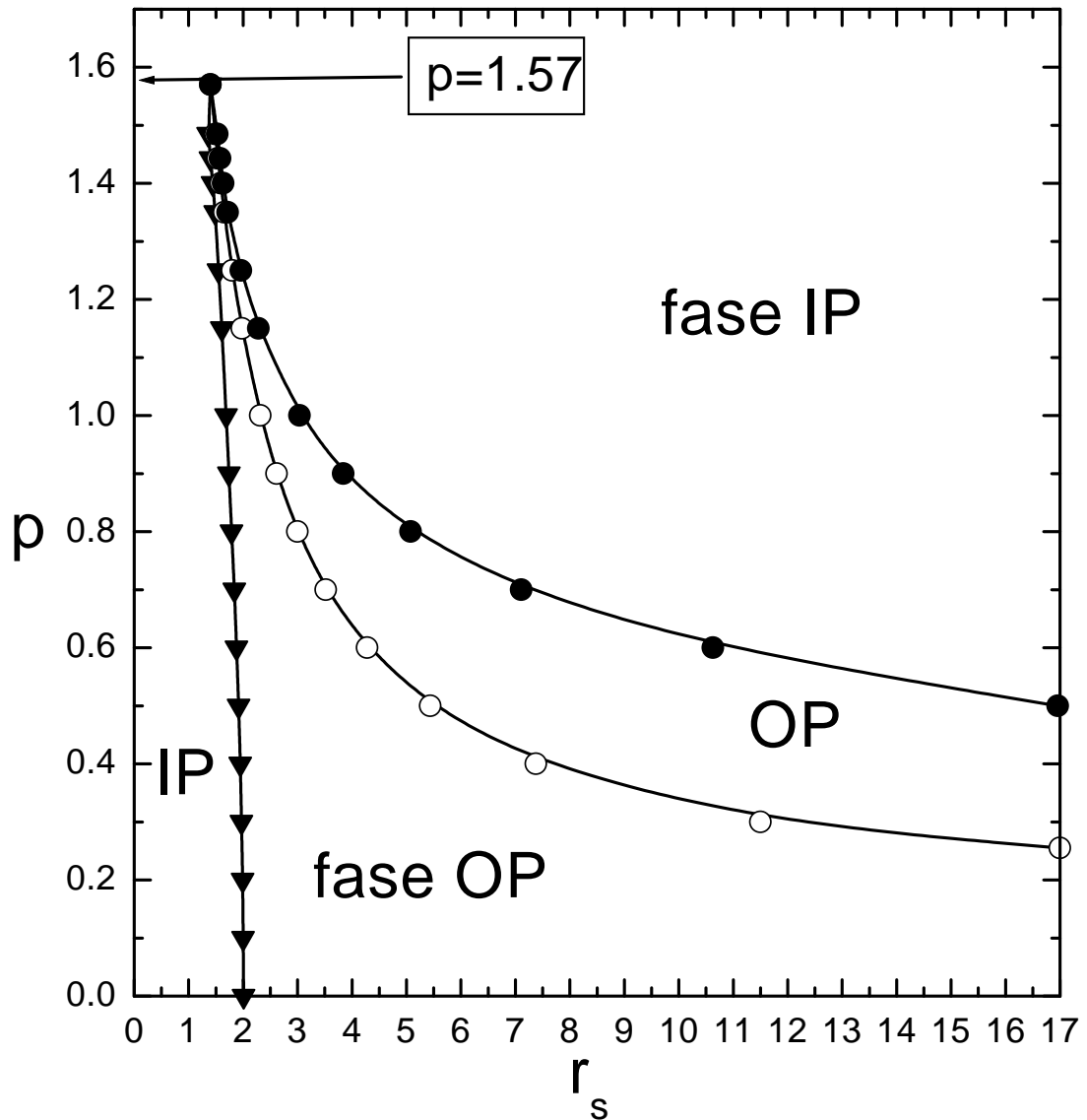


Figura 4.4: Diagrama de fases en la aproximación de Hartree-Fock en términos del parámetro de densidad r_s y el cociente entre las energías de Rashba y de Coulomb representado por p . La curva con triángulos representa la situación en la que la fase OP comienza a tener menor energía que la fase IP. La situación contraria viene dada por la curva con círculos llenos. La curva con círculos vacíos muestra para que valores, la fase IP pasa a ocupar una sola rama.

En la Fig. 4.4 mostramos el diagrama de fases que hemos obtenido, en términos de los parámetros r_s y p . Una característica importante de este diagrama es que, para valores del parámetro p definidos por el intervalo $0 < p < 1.57$, la fase OP (ferromagnética) aparece restringida a una ventana de r_s (o ventana de densidades) para desaparecer por completo si $p > 1.57$. Como esperábamos para $p = 0$, recuperamos el valor $r_s = 2.01$ (Refs. [16] y [29]) para la transición espontánea de espín en un 2DEG en la aproximación de HF, que viéramos en secciones anteriores.

Cuando p aumenta, la transición del lado izquierdo (triángulos) se desplaza ligeramente hacia valores de r_s menores. En otras palabras, la presencia del acoplamiento Rashba anticipa (en r_s) la creación de la fase con polarización de espín aunque, como veremos más adelante, esta polarización ahora es parcial (recordemos que para el sistema 2DEG sin acoplamiento Rashba, la fase ferromagnética tiene polarización completa). También notamos que en la medida que p aumenta, el ancho de la ventana en r_s (o densidades) disminuye.

La curva intermedia (círculos vacíos) muestra el valor de r_s para el cual la fase IP pasaría a ocupar sólo la rama de menor energía si la fase OP no fuera la más favorable energéticamente para ese valor de r_s .

4.4.3. Círculos de Fermi y polarización parcial

Círculos de Fermi: $x_c = \frac{k_{F+}}{k_{F-}}$ o $x_c = \frac{k_{min}}{k_{max}}$

La dependencia de x_c con r_s , que hace mínima la energía de cada fase, puede verse en la Fig. 4.5 para el caso $p = 1$. La curva con trazo continuo corresponde a la fase IP cuando están ocupadas ambas ramas quedando x_c , en consecuencia, definido como $\frac{k_{F+}}{k_{F-}}$.

La curva con línea de puntos se refiere a la misma fase IP donde sólo está ocupada la rama de energía más baja, respondiendo x_c al cociente $\frac{k_{min}}{k_{max}}$. Para $r_s = 2.3$, ambas curvas se tocan en $x_c = 0$ cuando deja de estar ocupada la rama superior. Esta situación puede verse en el diagrama de fases de la Fig. 4.4, representada por la curva con círculos vacíos.

Las curvas de trazo continuo y línea de puntos, correspondientes a la fase IP de la

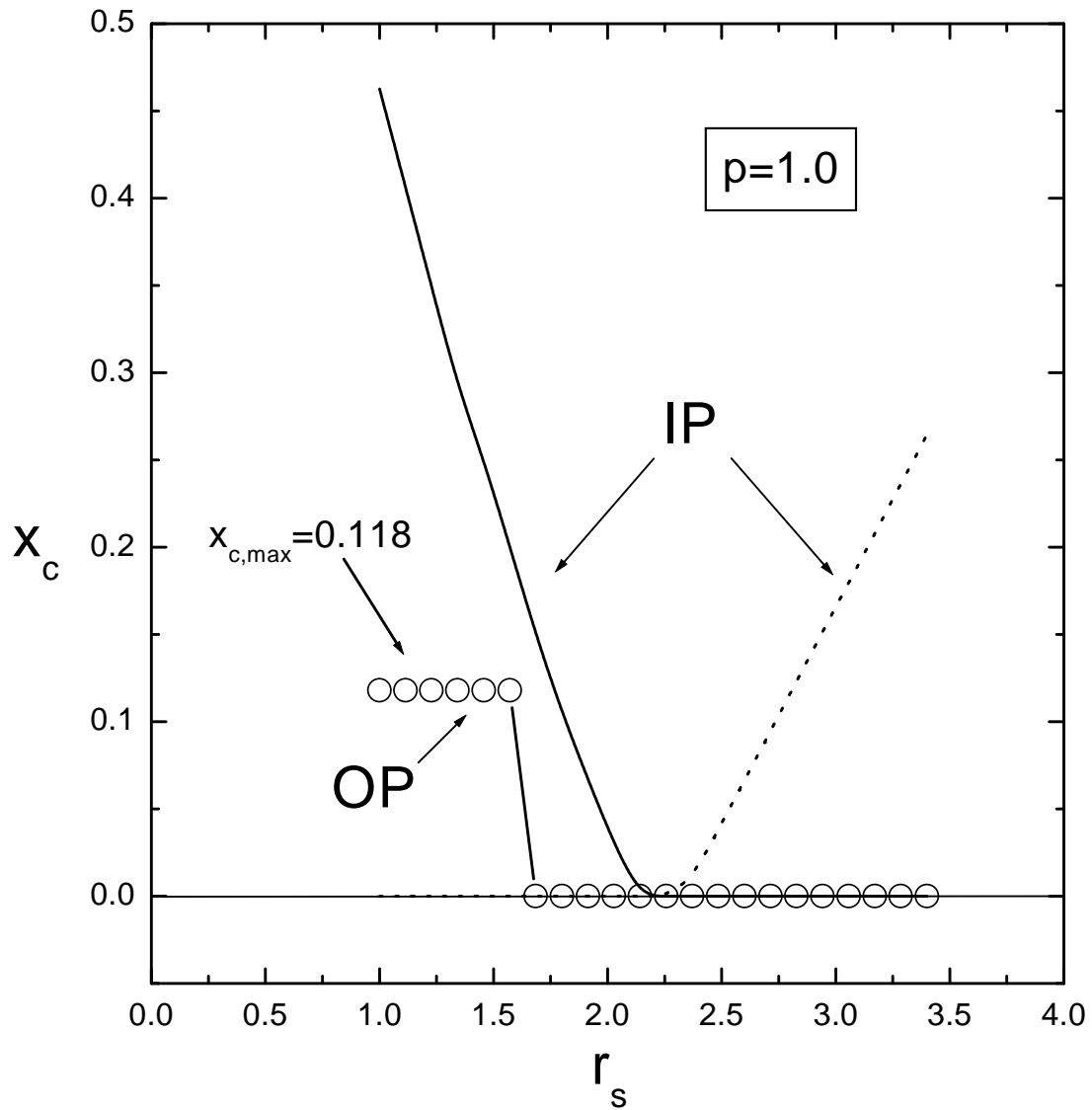


Figura 4.5: Relación entre el cociente x_c y el parámetro de densidad r_s para $p = 1$. La curva de trazo continuo corresponde a la fase IP cuando ambas ramas están ocupadas mientras que la de trazo con línea de puntos se refiere a cuando la fase IP tiene ocupada sólo la rama de menor energía. Los círculos representan la relación entre x_c y r_s para la fase OP.

Fig. 4.5 son continuas, a diferencia de la correspondiente a la fase OP representada por círculos.

Analicemos el comportamiento de $x_c = \frac{k_{F+}}{k_{F-}}$ para la fase OP. Para densidades altas ($r_s < 1.6$) la fase OP se encuentra en una situación de máxima ocupación de la rama de mayor energía ($s = +1$). Es decir, el valor de x_c está limitado por $x_{c,max}(p) = 0.118$ lo que determina una ocupación relativa de $\frac{N_+}{N_-} = 0.014$ (recordemos que la fase OP no puede existir para $x_c > x_{c,max}(p)$). Cuando $r_s \approx 1.6$, el valor de x_c cambia a $x_c = 0$ en forma abrupta o discontinua, es decir se despuebla completamente la rama $s = +1$. Para resumir, la fase OP pasa de una situación de máxima ocupación posible de ambas ramas (compatible con la existencia de la fase OP) a una situación de ocupación única de la rama $s = -1$. Para cuando esto ocurre, la energía de la fase IP es igual a la energía de la fase OP en sus dos estados de ocupación (las tres coinciden) y el valor de $x_c = \frac{k_{min}}{k_{max}}$ es $x_c = 0.2$ para dicha fase. Para $r_s > 1.6$ la fase IP se mantiene con mayor energía, situación que se invierte cuando $r_s \approx 3$ donde pasa a ser nuevamente la de menor energía.

El comportamiento de la fase OP en cuanto a x_c , es similar al que se observa para la transición ferromagnética del 2DEG sin acoplamiento Rashba (de $x_c = 1$ a $x_c = 0$) en el sentido que, a partir de un cierto r_s , las poblaciones cambian en forma abrupta o más precisamente, una de ellas desaparece por completo.

Polarización parcial y población parcial

En la Fig. 4.6 representamos la polarización parcial de espín en unidades de \hbar , como el valor medio de S_z por electrón y viene dada por la expresión (ver Apéndice B)

$$\langle S_z \rangle = - \int_{x_c=0}^1 x \cos \theta(x) dx. \quad (4.39)$$

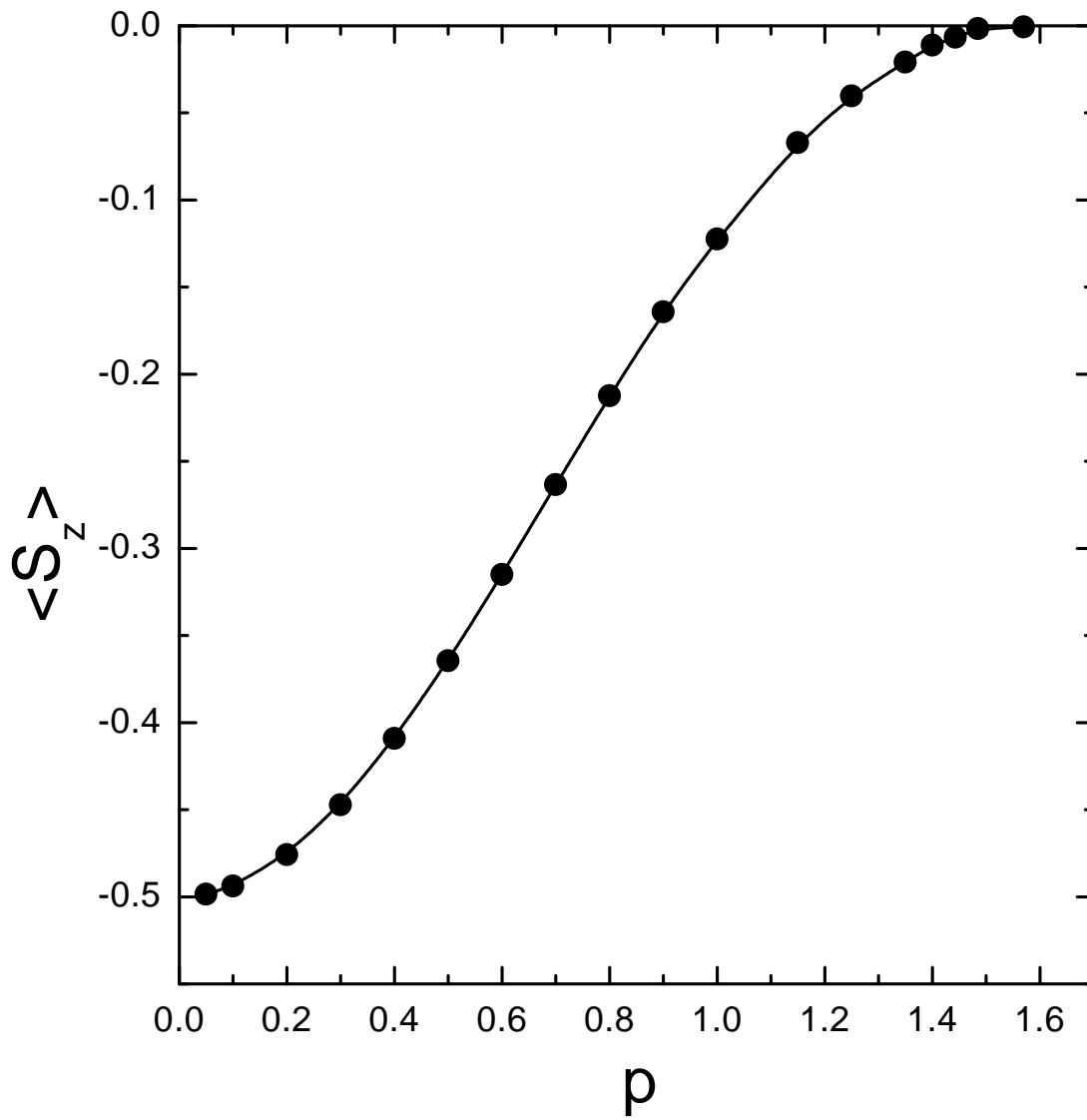


Figura 4.6: Valor medio de la proyección perpendicular de espín por partícula ($\hbar = 1$) en la fase OP como una función de p , la relación entre las energías de Rashba y de Coulomb.

Recordemos que, debido a la simetría según φ , $\langle S_x \rangle = \langle S_y \rangle = 0$ para ambas fases IP y OP. Notemos que $\langle S_z \rangle$ no depende de r_s dado que cuando la fase OP tiene menor energía que la fase IP (ventana en r_s del diagrama de fases) x_c es constante e igual a cero.

La polarización parcial de espín tiene un significado diferente al que conocemos del 2DEG sin acoplamiento Rashba en la aproximación de Hartree-Fock. En nuestro caso, debido a la inclinación del eje de cuantización de espín en la fase OP, la polarización debe ser necesariamente menor que la de un 2DEG sin acoplamiento Rashba, en donde el eje de cuantización de espín apunta siempre en la dirección z . Es decir la polarización parcial no está originada por una ocupación parcial de estados de espín. En ambos sistemas (con y sin acoplamiento Rashba), en la fase ferromagnética, los electrones ocupan plenamente un estado de espín dejando vacío el estado opuesto. En nuestro caso, la inclinación del eje, que origina la polarización parcial, es el resultado de la competencia entre el acoplamiento Rashba, que tiende a inclinar al eje hacia el plano y la interacción de intercambio que tiende a orientarlo hacia la dirección z [54].

4.4.4. La transición de Bloch y el experimento

Revisión del experimento de Ghosh *et al.*

Volvamos al experimento de Ghosh *et al.* [40] que analizáramos en la sección 3.4. Recordemos brevemente que estos autores reportan una posible polarización espontánea y parcial de espín, en sistemas cuasi-2DEG formados en QWs de GaAs/AlGaAs dopados con silicio y de estructura triangular fuertemente asimétrica, debido a la presencia de un campo eléctrico E_z muy elevado⁴. Debido a este campo eléctrico, se genera una fuerte asimetría de inversión dando lugar a un importante acoplamiento Rashba, siempre presente en sistemas sin simetría de inversión [23].

⁴ Los autores no reportan datos sobre el valor de E_z ni del parámetro α de acoplamiento Rashba. Pero es sabido que para campos eléctricos $E_z \geq 30$ kV/cm, el pozo cuántico se transforma en una heteroestructura simple de forma triangular [23].

Las densidades electrónicas fueron seleccionadas alrededor de $n_s = 5 \times 10^9 \text{cm}^{-2}$, que equivale a $r_s = 7.6$. La temperatura fue fijada en $T \approx 40 \text{ mK}$ o bien $T/T_F \approx 0.02$ dado que $T_F = 2.3 \text{ K}$ para $r_s = 7.6$ en GaAs.

De acuerdo a como los autores interpretan sus propios datos, encuentran polarización parcial de espín $\zeta \equiv (N_+ - N_-)/N \approx 0.2$, dentro de una ventana de densidades de ancho $\Delta r_s \approx 1.8$, centrada alrededor de $r_s \approx 6.5$.

Concluyen que dicha polarización de espín se debe a la interacción de intercambio, tal como lo predice el modelo de HF para el 2DEG en la transición de Bloch pero, afirman que el hecho que sea parcial se debe a que la temperatura es finita. Recordemos que, como vimos en la introducción, esta transición es de primer orden y los cálculos de MC la ubican entre $r_s \approx 13$ (Ref. [4]) y $r_s \approx 25$ (Ref. [6]).

Esta interpretación, contradice los resultados teóricos obtenidos por Dharma-wardana y Perrot [25] en el sentido que la polarización parcial, con origen en la interacción de intercambio, ocurre para T/T_F entre 0.3 y 1.6, es decir, muy por encima del valor $T/T_F \approx 0.02$ fijado en el experimento de Ghosh *et al.*

Los autores descartan que sus observaciones se deban a efectos de espín-órbita (Rashba) por considerar que la diferencia de energía entre las dos ramas es mucho menor que 0.05 meV. Se basan en un trabajo [55] perteneciente a una serie de artículos teóricos, básicamente enfocados a estudiar solamente el coeficiente α (llamado a veces pre factor de acoplamiento) [56, 57, 58, 59, 60]. Los datos experimentales de hoy día indican que el salto de energía debido al acoplamiento Rashba está entre 0.1 - 10 meV [23].

Por el contrario, nuestra aproximación de HF con acoplamiento Rashba, que es a $T = 0$, muestra que la ventana de densidades y la polarización parcial de espín, surgen naturalmente de la competencia entre las dos fases, OP (ferromagnética) e IP (paramagnética), como se muestra en el diagrama de fases de la Fig. 4.4 y en la Fig. 4.6. En efecto, de la Fig. 4.6 podemos ver que $\zeta \approx 0.2$, que equivale a $\langle S_z \rangle \approx 0.1$, se corresponde con $p \approx 1$. Con este valor de p , vamos a la Fig. 4.4 y observamos que la ventana de densidades tiene un

ancho de $\Delta r_s \approx 1.5$ (1.8 en el experimento) centrada alrededor de $r_s \approx 2.5$ (6.5 en el experimento). Esto muestra que desde el punto de vista cualitativo, la teoría de HF con acoplamiento Rashba y a $T = 0$, puede dar una descripción del experimento de Ghosh *et al.* [40], razonablemente satisfactoria si comparamos estos valores con los que se obtienen del experimento.

Correlaciones de Coulomb y acoplamiento Rashba

Desde el punto de vista cuantitativo, la teoría de HF sobreestima los efectos de la interacción de intercambio, dado que no tiene en cuenta las correlaciones de Coulomb. Creemos que la inclusión de estas últimas tendrían el efecto de correr el diagrama de fases de la Fig. 4.4 hacia valores de r_s mayores, más cercanos a los del experimento. Sin embargo, no resulta claro si en presencia del acoplamiento Rashba, el efecto de las correlaciones dinámicas será tan importante como lo es en el 2DEG sin dicho acoplamiento, como para lograr que $r_s \approx 25$. En lo que sigue, vamos a analizar este punto.

En el sistema 2DEG sin acoplamiento Rashba, el corrimiento tan fuerte que sufre el valor de r_s para la transición de Bloch, desde $r_s \approx 2$ en la aproximación de HF hasta $r_s \approx 25$ dado por los cálculos de Monte Carlo (FN-DMC), se puede entender como un efecto combinado de las correlaciones de Coulomb y el principio de exclusión de Pauli. Sabemos que la energía de correlación es negativa (la energía del estado fundamental verdadero debe ser menor que la que proporciona Hartree-Fock) y es la energía que el sistema puede disminuir gracias a las correlaciones entre un electrón y los que están a su alrededor. Cuando el medio está totalmente polarizado, digamos hacia arriba ($s = +1$) (el eje de cuantización es único y está en la dirección z), un electrón cualquiera que se encuentra en un punto \mathbf{r} estará representado por un estado $\Psi_+(\mathbf{r})$ formado por una superposición de estados de HF todos con espín $s = +1$, verá que los otros electrones no pueden acercarse demasiado debido a la repulsión de Pauli que se produce porque todos tienen el mismo espín. Cuando el 2DEG no está polarizado, existe una mitad de los electrones a los que les sucede lo mismo

pero, en cambio, ahora existe otra mitad con espín opuesto, que al no sufrir repulsión de Pauli con el electrón en el punto \mathbf{r} , podrán estar más próximos a este, aumentando en valor absoluto su energía de correlación y así bajar la energía del estado fundamental.

En síntesis, la introducción de las correlaciones de Coulomb favorece al estado no polarizado, lo que obliga a aumentar r_s para que el peso relativo de la energía de intercambio (negativa) sea mayor y así recuperar la transición de Bloch. Notemos que en este contexto, a un electrón no le cuesta energía cambiar de espín debido a la degeneración de este grado de libertad.

Este argumento sencillo, resulta ahora complicado por la pérdida del eje de cuantización común cuando intentamos aplicarlo a las fases OP e IP en donde en ambas, hay un eje de cuantización para cada estado de momento \mathbf{k} . Recordemos que en ambas fases, el número cuántico de espín s de un electrón denota el signo de la proyección sobre un eje de cuantización \mathbf{u} , que pertenece a una terna izquierda dada por $\{\mathbf{z}, \mathbf{k}, \mathbf{u}\}$. Entonces, podemos decir que un electrón con $s = +1$ es de *mano izquierda* y un electrón con $s = -1$ es de *mano derecha* y se puede hacer una superposición de estados de HF (con acoplamiento Rashba), todos con el mismo s (es decir de la misma *mano*), para lograr un estado $\psi(\mathbf{r}, s)$ con un s bien definido.

En lo que sigue, trataremos de entender como funciona el argumento que describimos anteriormente para el 2DEG ahora con el agregado del acoplamiento Rashba. Nuevamente, podríamos pensar que al sistema le conviene $x_c = 1$, es decir $k_{F+} = k_{F-}$, para tener una mitad de los electrones con $s = +1$ (*mano izquierda*) y la otra mitad con $s = -1$ (*mano derecha*) y librarse de la repulsión de Pauli para una mitad de ellos. Pero ahora, a diferencia de cuando no hay acoplamiento Rashba, promover un electrón del estado $s = -1$ al estado $s = +1$ manteniendo su momento \mathbf{k} , tiene un costo de energía dado por $\Delta E = 2\alpha\langle E_z \rangle k$ (como vimos en la sección 4.2.1) generando una oposición que las correlaciones tienen que vencer.

En la sección 4.2.1 hicimos una estimación de este valor para GaAs que aquí repasamos:

se puede ver que para $r_s \approx 25$ y para un 2DEG con acoplamiento Rashba pero sin interacción de Coulomb, sólo estarán ocupados los estados con energías muy cercanas al mínimo de la rama más baja. Para que un electrón en estas condiciones, cambie a $s = +1$ manteniendo su momento \mathbf{k} , es necesario que adquiera una energía $4\Delta_R \approx 0.17$ meV [23], valor que es mayor aunque comparable a la diferencia de energía de correlación por partícula, entre el 2DEG polarizado y no polarizado también para el mismo $r_s \approx 25$, $\Delta E_c^{(1,0)} \approx 0.11$ meV en GaAs.

Para este cálculo, hemos utilizado que $\langle \alpha E_z \rangle = 10^{-11}$ eVm por considerar que es un valor razonable para GaAs, teniendo en cuenta que el acoplamiento Rashba es fuertemente creciente con r_s a partir de $r_s \approx 8$ (aumenta un factor 6 cuando r_s pasa de 8 a 15) [61, 23].

Este análisis, que nos permite argumentar en contra de $x_c = 1$ ($k_{F+} = k_{F-}$) cuando el acoplamiento Rashba es importante, es igualmente válido para ambas fases IP y OP porque en esta última, el hecho que el eje de cuantización de espín esté fuera del plano x - y , no modifica la posibilidad de construir un estado $\psi(\mathbf{r}, s)$, a partir de la superposición de estados con el mismo s .

Sin embargo, debería existir una situación en donde las correlaciones de Coulomb puedan ejercer su influencia en favor de un estado fundamental con población de ambas ramas ($x_c > 0$). Una segunda mirada a la Fig. 4.5 nos permitirá ubicar el lugar de intervención de las correlaciones de Coulomb cuando está presente el acoplamiento Rashba. Observemos que la transición de la fase IP a la fase OP, está caracterizada por pequeños cambios en x_c , como muestra la Fig. 4.5 para $p = 1$. En efecto, para el valor de $r_s \approx 1.6$ en donde la fase OP pasa de $x_c = 0.118$ a $x_c = 0$, la fase IP tiene $x_c \approx 0.2$ (en ambos casos x_c representa el cociente de poblaciones, más precisamente su raíz cuadrada). Este valor $x_c = 0.2$ en favor de la fase IP cuando la fase OP abandona la rama superior, equivale a una muy pequeña diferencia de poblaciones ($N_{\pm} \sim k_{F\pm}^2$), $\frac{N_+}{N} = 0.04$ y $\frac{N_-}{N} = 0.96$. Esta pequeña diferencia, podría ser suficiente para aumentar el valor absoluto de la energía de correlación de la fase IP con respecto a la energía de correlación de la fase OP con $x_c = 0$ (donde la repulsión

de Pauli sería más fuerte dado que todos tienen el mismo número cuántico s). De esta manera, se retrasaría la formación de la fase ferromagnética con $x_c = 0$ pues ahora debería aumentar r_s para que la energía de intercambio (negativa) pueda compensar esta diferencia de energías de correlación en favor de la fase IP.

Aquí podemos notar un aparente problema: r_s no puede aumentar libremente sin que se produzca la segunda transición, es decir el restablecimiento de la fase IP con la sola ocupación de la rama más baja, que para $p = 1$ está en $r_s \approx 3$. En esta situación, como ambas fases tienen todos sus electrones en el mismo estado *derecho*, no habrá una diferencia de energía de correlación de una fase con respecto a la otra, no debiéndose esperar un nuevo aumento de r_s para esta transición. Esto nos lleva a pensar que $p = 1$ podría no resultar aceptable para la fase OP, pero sí seguramente algún valor menor, en donde el recorrido de r_s entre ambas transiciones sea mayor es decir, además de desplazarse hacia la derecha, el diagrama de fases podría quedar algo recortado en su parte superior.

En síntesis, este análisis nos lleva a pensar que en presencia del acoplamiento Rashba, el efecto de las correlaciones de Coulomb podría verse disminuido, dando lugar a valores de r_s menores a $r_s \approx 25$ (FN-DMC), y más cercanos a $r_s \approx 7$ del experimento de Ghosh *et al.* [40]. Estas ideas podrían ser puestas a prueba mediante experimentos en sistemas cuasi-2DEG sin simetría de inversión, en donde se pueda variar en forma independiente, la densidad del 2DEG y la intensidad del acoplamiento Rashba $\langle \alpha E_z \rangle$ [62] y con él, el parámetro p .

Capítulo 5

Resumen final y conclusiones

En esta tesis hemos estudiado la transición espontánea de espín o transición de Bloch en el gas de electrones confinado en pozos cuánticos de semiconductores. Nuestro interés fue estudiar los aspectos inherentes al experimento que pudieran alterar los valores calculados mediante el método de Monte Carlo, efectuados en el modelo idealizado de *jellium* para el gas de electrones estrictamente bidimensional. Nuestra herramienta de análisis fue la aproximación de Hartree-Fock con apantallamiento de Thomas Fermi.

Como primer punto de acercamiento al experimento estudiamos la dependencia del valor de la densidad crítica de la transición de Bloch con el ancho del pozo cuántico pero de profundidad infinita, dejando para más adelante posibles efectos de barrera. En este sentido, nuestro principal resultado fue la gran sensibilidad de la densidad de transición con respecto al ancho del pozo: son suficientes 50 Å para que la densidad crítica de transición se reduzca a la mitad respecto de su valor para el 2D ideal. Un segundo resultado para destacar es que encontramos que la interacción de intercambio, que en un sistema 2D puro juega un papel fundamental en la formación de la fase ferromagnética, en el caso de sistemas cuasi-2D su accionar se presenta dividido en dos términos: un primer término con origen en el 2D puro que favorece la transición y un segundo término, con origen en el ancho finito del cuasi-2D, que tiene un efecto contrario al anterior, opuesto a la transición de Bloch. Como resultado

de este juego entre ambos términos surge la dependencia de la densidad crítica con el ancho del pozo. En este sentido, pudimos obtener una relación funcional entre la densidad crítica y el ancho del pozo muy ajustada a los cálculos exactos. Esta relación nos permitió obtener un tercer resultado fundamental a la hora del experimento: existe un ancho máximo de alrededor de 2.4 veces el radio de Bohr efectivo en el material (240 Å para un pozo de arseniuro de galio) a partir del cual ya no es posible la transición de Bloch.

Un segundo punto de acercamiento al experimento fue el incorporar en los pozos características reales como la profundidad finita y el ancho finito de las barreras laterales. Aquí observamos un gráfico completamente diferente para la densidad de transición en función del ancho nominal del pozo cuántico: desaparece la dependencia monótona decreciente de la densidad crítica con respecto al ancho para dar lugar a un gráfico con un máximo en alrededor de 35 Å. Interpretamos que este comportamiento diferente se debe a que ahora el ancho nominal del pozo se ve aumentado por la penetración de la función de onda electrónica en las barreras laterales, haciendo que el ancho efectivo sea mayor. Este hecho produjo una reducción general de toda la curva porque por ejemplo, un pozo cuántico de profundidad finita de 247 meV y de un ancho nominal de 50 Å tiene la misma densidad crítica que un pozo de profundidad infinita de ancho 100 Å. El máximo en 35 Å divide al gráfico de densidades críticas en dos zonas: del máximo hacia la derecha (valores de pozo creciente) el ancho nominal domina sobre la longitud de penetración y viceversa, del máximo hacia la izquierda dominan los efectos de penetración en las barreras por sobre el ancho nominal, dato útil a tener en cuenta para el diseño experimental.

Aparte de los aspectos relacionados con la forma del sistema cuasi-bidimensional que acabamos de describir, encontramos que el efecto de apantallar la interacción de intercambio mediante la aproximación de Thomas-Fermi produjo un efecto en el sentido esperado, elevando el parámetro r_s de 2.01 a 4.32. Sin embargo, no fue lo suficiente como para acercarnos a los valores predichos por los cálculos de Monte Carlo que, dependiendo del método empleado, lo ubican entre $r_s = 13$ (método variacional) y $r_s = 25$ (método por difusión

con nodo fijo). Nuestra estrategia de agregar apantallamiento de Thomas-Fermi a la aproximación de Hartree-Fock fue mejorada con el desarrollo de la idea de masas efectivas dependientes de la polarización.

Este fue nuestro tercer paso de acercamiento al experimento, en donde las correlaciones dinámicas debido a la interacción de Coulomb son más fuertes que lo que la aproximación de Thomas-Fermi puede representar. Nuestra idea, luego verificada experimental y teóricamente, consistió en advertir que la masa efectiva del 2D no polarizado debía ser superior en forma notable, a la de su par en el caso totalmente polarizado. Definimos entonces el factor de masas efectivas $f = m_1^*/m_0^* < 1$ y, siempre dentro de la aproximación de Hartree-Fock con apantallamiento de Thomas-Fermi para el 2D ideal, obtuvimos un resultado sorprendente: $f = 0.65$ reproducía el valor crítico $r_s = 13$ para la transición de Bloch calculada por Monte Carlo Variacional y simultáneamente, las diferencias de energías del estado fundamental entre ambas polarizaciones en un amplio rango de $r_s = 10$ a $r_s = 50$. En trabajos teóricos posteriores que utilizaron la aproximación de fases al azar (RPA) se encontró que $f = 0.70$ para $r_s = 10$, en buen acuerdo con nuestro resultado $f = 0.65$.

Al aplicar el mismo método pero ahora a los resultados del Monte Carlo por Difusión, encontramos que no era posible que un único valor de f pudiera reproducir simultáneamente la transición de Bloch en $r_s = 25$ y las diferencias de energía del estado fundamental entre ambas polarizaciones. Decidimos entonces tomar un camino inverso: conociendo las parametrizaciones de las energías del estado fundamental para un amplio rango de r_s obtuvimos el factor $f(r_s)$ (ahora dependiente de r_s) que reproducía sus diferencias con nuestras expresiones de Hartree-Fock con masas efectivas diferentes y apantallamiento de Thomas-Fermi. De esta forma obtuvimos la curva $f(r_s)$ obteniendo $f = 0.61$ para $r_s = 10$. Recientemente, se obtuvo experimentalmente $f = 0.59$ para el mismo valor de r_s .

Elaborada la idea de masas efectivas dependientes de la polarización y ajustado su factor f con el método de Monte Carlo en sus dos versiones más conocidas para el 2D ideal, pudimos volver a los sistemas cuasi-bidimensionales e incorporar allí el factor de masas f .

De esta forma obtuvimos lo que creemos son los valores más aproximados al experimento, teniendo en cuenta factores de forma y correlaciones de Coulomb. Un resultado importante fue que el ancho máximo para los pozos no resultó afectado por la incorporación de f . Tampoco el máximo en 35 \AA y las características generales de los gráficos de densidad crítica en función del ancho. Sí se observó un importante decrecimiento global de la densidad crítica debido a la incorporación de f . Como comentario final de esta parte de la tesis podemos decir que con la aproximación de Hartree-Fock con apantallamiento de Thomas-Fermi y masas efectivas dependientes de la polarización pudimos dar una predicción, que creemos ajustada, de lo que sería la densidad crítica para la transición de Bloch en sistemas cuasi-bidimensionales, en donde cálculos mediante el método de Monte Carlo aún son inaccesibles por las complicaciones numéricas y el elevado tiempo de cómputo que trae la falta de homogeneidad en la dirección z , perpendicular al 2D.

Hasta aquí hemos estudiado pozos cuánticos con simetría de inversión, sin embargo es muy común experimentalmente utilizar diseños que no posean esta simetría incorporando, a veces de manera inadvertida, los efectos del acoplamiento Rashba. Este fue nuestro siguiente paso en el acercamiento al experimento. Para ello trabajamos con sistemas 2D estrictos pero incorporando en el Hamiltoniano de un cuerpo, el término de Rashba que acopla el espín de un electrón con su propio impulso lineal. Para ello desarrollamos la aproximación de Hartree-Fock (sin apantallamiento) en presencia de este tipo de acoplamiento espín-órbita.

Como consecuencia del desarrollo de la teoría obtuvimos un primer resultado: el eje de cuantización de espín ya no está contenido en el plano del 2D como en el caso del acoplamiento Rashba para un sólo electrón sino que mantiene un ángulo $\theta(k)$ con el eje z , que sólo depende del módulo del impulso \mathbf{k} . Dicho ángulo tiene una interesante relación con k : los electrones que están muy cerca del contorno circular de Fermi tienen su eje de cuantización de espín con el mayor ángulo (Rashba predomina sobre Coulomb) mientras que para los que están muy próximos al centro del círculo de Fermi su eje de cuantización está muy cercano al eje z (Coulomb predomina sobre Rashba) variando en forma monótona

entre ambos límites.

El ángulo $\theta(k)$ es la solución de una ecuación integral no lineal que creemos puede ser clasificada como del tipo de Urysohn o Hammerstein. Estudiamos las propiedades básicas de esta ecuación integral para $\theta(k)$ encontrando que una de ellas es particularmente interesante: sólo existe solución para la ecuación integral si la relación entre la ocupación de la rama de mayor energía y la de menor energía no supera cierto valor, que depende de un parámetro que es el cociente entre la energía característica de Rashba y la energía característica de Coulomb (al que hemos denominado parámetro p). Por otra parte, encontramos también que $\theta = \pi/2$ (ángulo del eje de cuantización para el caso de un electrón con acoplamiento Rashba) es siempre solución de la ecuación integral y la hemos denominado solución *trivial*.

Obtuvimos las energías de partícula única de Hartree-Fock y con estas hemos calculado la energía del estado fundamental. Esto dio lugar al reconocimiento de dos fases bien diferentes: una fase ferromagnética con polarización fuera del plano (en donde el ángulo θ es la solución *no trivial*) cuya existencia está limitada por la propiedad que comentamos recientemente, y otra fase paramagnética en donde $\theta = \pi/2$ es la solución *trivial*.

Analizando la energía del estado fundamental para cada fase en función del parámetro r_s y para cada valor del parámetro p , construimos un diagrama de fases en el espacio r_s - p que nos permitió analizar las regiones en donde son favorables una u otra fase. Una característica interesante de este diagrama es que la fase ferromagnética tiene lugar en una ventana en r_s cuyo ancho y centro dependen de p . Es decir, para densidades altas (bajo r_s) y densidades bajas (alto r_s) el sistema es paramagnético mientras que sólo puede ser ferromagnético para densidades intermedias. En particular, si $p > 1.57$ no es posible la solución *no trivial* para ningún valor de r_s .

Otro resultado interesante es que la fase ferromagnética tiene polarización parcial de espín debido a la inclinación del eje de cuantización. Encontramos que esta polarización parcial se debe exclusivamente a la inclinación del eje y no a una posible ocupación parcial de las dos ramas de energía. La fase ferromagnética OP ocupa totalmente la rama de

menor energía, dejando vacía la otra rama. El diagrama de fases y la polarización parcial nos permitió dar una explicación diferente de un experimento relativamente reciente sobre polarización espontánea de espín en sistemas cuasi-bidimensionales. Pudimos explicar los resultados que allí se obtuvieron en términos de nuestros desarrollos de Hartree-Fock con acoplamiento Rashba y a temperatura cero.

Finalmente analizamos el papel que juegan las correlaciones de Coulomb en presencia del acoplamiento Rashba. Para ello encontramos un argumento que da cuenta de la importancia de las correlaciones de Coulomb en el aumento del valor crítico de r_s para la transición de Bloch, en ausencia de acoplamiento Rashba. Este mismo argumento, aplicado ahora al caso en que hay acoplamiento Rashba, predice que las correlaciones juegan un papel considerablemente menor. Nuestra conclusión es que el acoplamiento Rashba, al actuar como un freno o también como un regulador de las correlaciones de Coulomb podría lograr que el valor crítico de r_s fuera considerablemente menor a $r_s = 25$ (valor crítico predicho por Monte Carlo por difusión sin acoplamiento Rashba). Este puede ser un dato útil a tener en cuenta en el momento de diseñar un experimento con la idea de observar la transición de Bloch, debido a la dificultad de construir pozos cuánticos donde el gas de electrones confinado tenga muy baja densidad y a la vez se lo pueda considerar como un gas de electrones puro, libre de perturbaciones que modifiquen su condición. Como la intensidad del acoplamiento Rashba es controlable experimentalmente, también lo sería la transición de Bloch.

Creemos que nuestro estudio de la transición de Bloch en pozos cuánticos de semiconductores puede resultar una primera guía para el experimento. Sin embargo existen aspectos que son importantes en la situación experimental y que no fueron considerados en esta tesis. Podríamos citar, por ejemplo, los efectos de desorden producidos por las rugosidades de las superficies del pozo, o por la presencia de los dadores de carga positivos localizados a los costados de las barreras. También, el cambio abrupto de la masa efectiva de la subbanda en la interface de la heteroestructura introduce en esta, una dependencia con la coordenada z .

También puede ser interesante estudiar la inclusión de un segundo término de espín-órbita en el Hamiltoniano de un cuerpo, nos referimos a la interacción de Dresselhaus que proviene del volumen del semiconductor. El problema que se plantea es de mayor dificultad debido a que ahora ya no podemos hablar de círculos de Fermi sino de un contorno de Fermi que es cuasi-elíptico, lo que haría que el ángulo θ de cuantización de espín dependa de \mathbf{k} en forma completa es decir, en módulo y dirección. Este estudio está actualmente en su etapa final de desarrollo teórico pero advertimos que presentará considerables dificultades numéricas debido a la inclusión de la segunda variable φ , que lleva a la necesidad de solucionar en forma autoconsistente dos ecuaciones integrales no lineales y acopladas.

Apéndice A

La aproximación de Hartree-Fock en general

En este Apéndice vamos a describir la aproximación de Hartree-Fock (HF) para fermiones, en lo que tiene que ver con sus aspectos más esenciales que sirven como soporte a esta tesis. La idea fundamental de la aproximación de HF es convertir el problema de N partículas interactuantes, en un sistema de N partículas independientes entre sí, donde cada una de ellas está afectada por un potencial medio, generado por todas las restantes. Por simplicidad, vamos a aceptar que el potencial de interacción es local en la representación \mathbf{r}, s de posición y espín [42]. Definiendo la coordenada $x \equiv (\mathbf{r}, s)$, podemos escribir el Hamiltoniano exacto del sistema como

$$H = \sum_{i=1}^N \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + u(x_i) \right] + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1; i \neq j}^N v(x_i, x_j), \quad (\text{A.1})$$

donde $v(x_i, x_j)$ es el potencial de interacción y $u(x_i)$ es un potencial exterior. El objetivo es poder aproximar el Hamiltoniano exacto, operador de dos partículas, por un operador

efectivo de una partícula

$$H_{HF} = \sum_{i=1}^N h_{HF}^{(i)} = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + v_{HF}^{(i)} \right). \quad (\text{A.2})$$

donde v_{HF} es, precisamente, el potencial efectivo que queremos determinar e incluye al potencial exterior u . Debido a que para la aproximación de HF los fermiones son independientes, la función de onda del sistema de N partículas será el determinante de Slater

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det[\varphi_i(x_j)] \quad (\text{A.3})$$

que es solución de la ecuación de autovalores

$$H_{HF}\Phi = E\Phi. \quad (\text{A.4})$$

Los orbitales φ_j de partícula independiente, deben cumplir formalmente con la ecuación de autovalores

$$h_{HF}\varphi_j = \epsilon\varphi_j. \quad (\text{A.5})$$

Como h_{HF} depende de v_{HF} , que es desconocido, no podemos obtener los orbitales φ_j resolviendo la ecuación de autovalores. La idea de la aproximación de HF es obtenerlos a partir de extremar la variación, respecto de los φ_j , del valor medio del Hamiltoniano exacto en el estado representado por Φ . Como estos orbitales deben cumplir con la condición de normalización, la técnica que se emplea es la de recurrir a los multiplicadores de Lagrange e incluir las ecuaciones de vínculo en la funcional a extremar

$$\frac{\delta}{\delta\varphi_\alpha^*(x)} \left[\langle \Phi | H | \Phi \rangle - \sum_{i=1}^N \epsilon_i \int dy \varphi_i(y) \varphi_i^*(y) \right] = 0, \quad (\text{A.6})$$

donde los ϵ_i son los mencionados multiplicadores y $\int dy = \sum_s \int d^3r$. El valor medio del Hamiltoniano exacto en el estado Φ viene dado por

$$\langle \Phi | H | \Phi \rangle = \sum_{i=1}^N \langle i | h | i \rangle + \frac{1}{2} \left(\sum_{i,j=1}^N \langle ij | v | ij \rangle - \sum_{i,j=1}^N \langle ij | v | ji \rangle \right), \quad (\text{A.7})$$

donde h es el Hamiltoniano de una partícula. Como vemos, el valor medio del potencial de interacción consta de dos partes llamadas término *directo* y término de *intercambio*. Pasando a la representación \mathbf{r}, s , la ecuación variacional resulta

$$\begin{aligned}
& \frac{\delta}{\delta\varphi_\alpha^*(x)} \left\{ \sum_{i=1}^N \int dy \varphi_i^*(y) \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + u(y) \right] \varphi_i(y) \right. \\
& + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \int \int dy dy' \varphi_i^*(y) \varphi_j^*(y') v(y, y') \varphi_i(y) \varphi_j(y') \\
& - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \int \int dy dy' \varphi_i^*(y) \varphi_j^*(y') v(y, y') \varphi_j(y) \varphi_i(y') \\
& \left. - \sum_{i=1}^N \epsilon_i \int dy \varphi_i^*(y) \varphi_i(y) \right\} = 0 \tag{A.8}
\end{aligned}$$

Efectuando la variación respecto de $\varphi_\alpha^*(x)$ se obtiene la ecuación de Hartree-Fock

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + u(x) + \int \rho(y) v(x, y) dy \right] \varphi_\alpha(x) - \int \rho(x, y) v(x, y) \varphi_\alpha(y) dy = \epsilon_\alpha \varphi_\alpha(x) \tag{A.9}$$

donde se definen la matriz densidad y la densidad como

$$\rho(x, y) = \sum_{i=1}^N \varphi_i^*(y) \varphi_i(x) \tag{A.10}$$

y

$$\rho(y) = \sum_{i=1}^N \varphi_i^*(y) \varphi_i(y) = \rho(y, y) \tag{A.11}$$

La ecuación de Hartree-Fock nos indica como construir el potencial efectivo v_{HF} de una partícula

$$v_{HF}\varphi_i = u(x)\varphi_i(x) + \int dy\rho(y)v(x,y)\varphi_i(x) - \int \rho(x,y)v(x,y)\varphi_i(y)dy. \quad (\text{A.12})$$

Notemos que el potencial efectivo de Hartree-Fock contiene, además del potencial exterior $u(x)$ y de la energía potencial clásica $\int dy\rho(y)v(x,y)$, una parte no local, de origen cuántico, que se la conoce con el nombre de potencial de intercambio. Se puede verificar fácilmente que v_{HF} es hermítico y, por lo tanto, los multiplicadores de Lagrange ϵ_α , que son los autovalores de la Ec. (A.9), son reales.

La dificultad intrínseca de la aproximación de HF es que la matriz densidad $\rho(x,y)$ no se conoce pues depende de los orbitales φ_i que son funciones a determinar. Esto nos impide resolver la ecuación de HF (A.9) como un problema de autovalores tradicional, teniendo que recurrir a una solución por autoconsistencia, la que describimos a continuación:

1. partimos de una aproximación inicial proponiendo unos $\varphi_i(x)$, $i = 1, \dots, N$ que nos permiten obtener la densidad $\rho(y)$ y la matriz densidad $\rho(x,y)$ y luego
2. calculamos el potencial v_{HF} ,
3. resolvemos la ecuación de autovalores: $h_{HF}\varphi_\alpha = \epsilon_\alpha\varphi_\alpha$,
4. de estas soluciones, se toman las N primeros orbitales con autovalores ϵ_α más bajos y se obtiene un nuevo conjunto $\varphi_i^{(1)}$, $i = 1, \dots, N$. Con estos nuevos orbitales se vuelven a calcular la densidad y la matriz densidad y el proceso comienza nuevamente desde el paso (2). Se considera alcanzada la autoconsistencia cuando la diferencia entre la $\varphi_i^{(n-1)}$ de entrada y la $\varphi_i^{(n)}$ de salida es menor que un cierto error prefijado y considerado aceptable.

De la ecuación de HF (A.9) podemos obtener los autovalores ϵ_α multiplicando por izquierda a ambos miembros por $\varphi_\alpha^*(x)$ e integrando respecto de x

$$\begin{aligned} \epsilon_\alpha = & \int \varphi_\alpha^*(x) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + u(x) \right] \varphi_\alpha(x) dx + \sum_{j=1}^N \int \int dx dy \varphi_\alpha^*(x) \varphi_j^*(y) v(x, y) \varphi_\alpha(x) \varphi_j(y) \\ & - \sum_{j=1}^N \int \int dx dy \varphi_\alpha^*(x) \varphi_j^*(y) v(x, y) \varphi_j(x) \varphi_\alpha(y) \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

o bien

$$\epsilon_\alpha = \langle \alpha | t + u | \alpha \rangle + \sum_{i=1}^N (\langle \alpha j | v | \alpha j \rangle - \langle \alpha j | v | j \alpha \rangle) \quad (\text{A.14})$$

donde t es el operador de partícula única sin potencial exterior. Por último, se obtiene la energía del estado fundamental E_{HF} reemplazando el determinante de Slater de los orbitales de HF en la Ec. (A.7)

$$E_{HF} = \sum_{i=1}^N \langle i | t + u | i \rangle + \frac{1}{2} \left(\sum_{i,j=1}^N \langle ij | v | ij \rangle - \sum_{i,j=1}^N \langle ij | v | ji \rangle \right), \quad (\text{A.15})$$

Sumando y restando la doble suma en esta ecuación, haciendo uso de la ecuación de Hartree-Fock (A.9) junto con la normalización de los orbitales de HF obtenemos

$$E_{HF} = \sum_{i=1}^N \epsilon_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N (\langle ij|v|ij\rangle - \langle ij|v|ji\rangle), \quad (\text{A.16})$$

y utilizando la expresión para los autovalores ϵ_α , obtenemos

$$E_{HF} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (\epsilon_i + \langle i|t + u|i\rangle). \quad (\text{A.17})$$

Es importante notar que la energía del estado fundamental E_{HF} no es la suma de las energías ϵ_i de los N estados ocupados de partícula independiente, como esperaríamos para un sistema no interactuante. Esto es así porque $\sum_{i=1}^N \epsilon_i$ fue utilizado en el punto de partida, en la Ec. (A.6) y es razonable que la energía resultante del proceso variacional sea mejor. Se puede ver que $\sum_{i=1}^N \epsilon_i$ representa una aproximación a orden cero en teoría de perturbaciones, mientras que E_{HF} lo es a primer orden. Podemos convencernos si definimos el operador de una partícula $f = v_{HF} - u$, es decir el término de interacción del potencial efectivo de HF. Entonces, podemos escribir el Hamiltoniano exacto como

$$H = \sum_{i=1}^N (t_i + u_i + f_i) + \left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N v_{ij} - \sum_{i=1}^N f_i \right) = H_{HF} + H'. \quad (\text{A.18})$$

Si tratamos a H' como una perturbación y aplicamos teoría de perturbaciones a orden cero, obtenemos

$$E^{(0)} = \langle \Phi | H_{HF} | \Phi \rangle = \sum_{i=1}^N \epsilon_i, \quad (\text{A.19})$$

y a primer orden tenemos que

$$E^{(1)} = \langle \Phi | H' | \Phi \rangle = \langle \Phi | \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N v_{ij} | \Phi \rangle - \langle \Phi | \sum_{i=1}^N f_i | \Phi \rangle = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N (\langle ij | v | ij \rangle - \langle ij | v | ji \rangle), \quad (\text{A.20})$$

y por lo tanto resulta

$$E_{HF} = E^{(0)} + E^{(1)}. \quad (\text{A.21})$$

Es decir, la energía E_{HF} que se obtiene utilizando el principio variacional, concuerda con la energía que resulta de aplicar teoría de perturbaciones primer orden.

Apéndice B

La aproximación de Hartree-Fock con acoplamiento Rashba: detalles del desarrollo

En este Apéndice vamos a desarrollar las ecuaciones básicas de la aproximación de Hartree-Fock con acoplamiento Rashba. Nos apoyaremos en el Apéndice A en donde se puede encontrar un planteo general de la aproximación de Hartree-Fock para fermiones.

B.1. Hartree-Fock y acoplamiento Rashba: planteo general

Nuestro primer paso es escribir la ecuación a extremar (A.6) que contiene el valor medio del Hamiltoniano en el estado fundamental de Hartree-Fock $\langle \Phi | H | \Phi \rangle$, similar a la Ec. (A.7) para nuestros estados $|i\rangle$ de partícula única de HF que están representados por

$$\langle \mathbf{r} | i \rangle = \psi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}, s_i) = \frac{1}{\sqrt{A}} e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} \begin{pmatrix} \chi_+(\mathbf{k}_i, s_i) \\ \chi_-(\mathbf{k}_i, s_i) \end{pmatrix}. \quad (\text{B.1})$$

Con esta representación para $|i\rangle$, podemos obtener los elementos de matriz directo y de intercambio del potencial de Coulomb $\langle ij|v|ij\rangle$ y $\langle ij|v|ji\rangle$ respectivamente. Sabemos que en el modelo de *jellium* del gas de electrones, el término directo (que es divergente) se cancela con términos similares provenientes de la energía electrostática del fondo neutralizante de cargas positivas y de la interacción entre los electrones y dicho fondo. Por esta razón, sólo describiremos el término de intercambio que resulta

$$\langle ij|v|ji\rangle = \frac{1}{A} v(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) \sum_{\epsilon_1, \epsilon_2} \chi_{\epsilon_1}^*(\mathbf{k}_i, s_i) \chi_{\epsilon_2}^*(\mathbf{k}_j, s_j) \chi_{\epsilon_1}(\mathbf{k}_j, s_j) \chi_{\epsilon_2}(\mathbf{k}_i, s_i), \quad (\text{B.2})$$

donde $v(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) = \frac{2\pi e^2}{\epsilon |\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j|}$ es la transformada de Fourier del potencial de Coulomb $v(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) = \frac{e^2}{\epsilon |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$ y A es el area del 2DEG.

El elemento de matriz $\langle i|h|i\rangle$ correspondiente a la parte de un cuerpo del Hamiltoniano es

$$\langle i|h|i\rangle = \sum_{\epsilon_1, \epsilon_2} \chi_{\epsilon_1}^*(\mathbf{k}_i, s_i) h_{\epsilon_1 \epsilon_2}(\mathbf{k}_i) \chi_{\epsilon_2}(\mathbf{k}_i, s_i). \quad (\text{B.3})$$

Los elementos de matriz $h_{\epsilon_1 \epsilon_2}(\mathbf{k}_i)$ corresponden a la matriz

$$h(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \hbar^2 k^2 / 2m^* & i\alpha \langle E_z \rangle k e^{-i\varphi} \\ -i\alpha \langle E_z \rangle k e^{i\varphi} & \hbar^2 k^2 / 2m^* \end{pmatrix}. \quad (\text{B.4})$$

El término correspondiente a los multiplicadores de Lagrange es

$$\langle i|i \rangle = \sum_{\epsilon} \chi_{\epsilon}^*(\mathbf{k}_i, s_i) \chi_{\epsilon}(\mathbf{k}_i, s_i). \quad (\text{B.5})$$

Con estos elementos, ya podemos escribir la funcional a extremar equivalente a la que encontramos en la Ec. (A.6)

$$\begin{aligned}
\mathcal{F} = & \sum_{\epsilon_1, \epsilon_2} \left[\sum_i^{N_+} \chi_{\epsilon_1}^*(\mathbf{k}_i, +) h_{\epsilon_1 \epsilon_2} \chi_{\epsilon_2}(\mathbf{k}_i, +) + \sum_i^{N_-} \chi_{\epsilon_1}^*(\mathbf{k}_i, -) h_{\epsilon_1 \epsilon_2} \chi_{\epsilon_2}(\mathbf{k}_i, -) \right] \\
& - \frac{1}{2A} \sum_{\epsilon_1, \epsilon_2} \left\{ \sum_i^{N_+} \left[\sum_j^{N_+} v(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) \chi_{\epsilon_2}^*(\mathbf{k}_j, +) \chi_{\epsilon_1}(\mathbf{k}_j, +) \right. \right. \\
& + \left. \sum_j^{N_-} v(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) \chi_{\epsilon_2}^*(\mathbf{k}_j, -) \chi_{\epsilon_1}(\mathbf{k}_j, -) \right] \chi_{\epsilon_1}^*(\mathbf{k}_i, +) \chi_{\epsilon_2}(\mathbf{k}_i, +) \\
& + \sum_i^{N_-} \left[\sum_j^{N_+} v(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) \chi_{\epsilon_2}^*(\mathbf{k}_j, +) \chi_{\epsilon_1}(\mathbf{k}_j, +) \right. \\
& + \left. \sum_j^{N_-} v(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) \chi_{\epsilon_2}^*(\mathbf{k}_j, -) \chi_{\epsilon_1}(\mathbf{k}_j, -) \right] \chi_{\epsilon_1}^*(\mathbf{k}_i, -) \chi_{\epsilon_2}(\mathbf{k}_i, -) \left. \right\} \\
& - \sum_{\epsilon} \left[\sum_i^{N_+} E(\mathbf{k}_i, +) \chi_{\epsilon}^*(\mathbf{k}_i, +) \chi_{\epsilon}(\mathbf{k}_i, +) + \sum_i^{N_-} E(\mathbf{k}_i, -) \chi_{\epsilon}^*(\mathbf{k}_i, -) \chi_{\epsilon}(\mathbf{k}_i, -) \right], \quad (\text{B.6})
\end{aligned}$$

donde N_{\pm} es el número de orbitales ocupados con $s = \pm 1$ y $E(\mathbf{k}_i, \pm)$ son los multiplicadores de Lagrange es decir, las energías de una partícula de HF.

B.2. Ecuaciones de Hartree-Fock con acoplamiento Rashba

Lo que sigue ahora es extremar la funcional \mathcal{F} respecto de $\chi_{\epsilon}^*(\mathbf{k}_i, s_i)$ para obtener las ecuaciones de Hartree-Fock. El resultado de la variación igualado a cero es

$$\begin{aligned}
 & \sum_{\epsilon} h_{\epsilon\alpha\epsilon}(\mathbf{k}_{\alpha})\chi_{\epsilon}(\mathbf{k}_{\alpha}, s) \\
 & - \frac{1}{A} \left[\sum_{\epsilon} \sum_i^{N_+} v(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_{\alpha})\chi_{\epsilon}(\mathbf{k}_{\alpha}, s)\chi_{\epsilon}^*(\mathbf{k}_i, s)\chi_{\epsilon\alpha}(\mathbf{k}_i, s) \right. \\
 & \left. + \sum_{\epsilon} \sum_j^{N_-} v(\mathbf{k}_{\alpha} - \mathbf{k}_j)\chi_{\epsilon}(\mathbf{k}_{\alpha}, s)\chi_{\epsilon}^*(\mathbf{k}_j, -s)\chi_{\epsilon\alpha}(\mathbf{k}_j, -s) \right] \\
 & - E(\mathbf{k}_{\alpha}, s)\chi_{\epsilon\alpha}(\mathbf{k}_{\alpha}, s) = 0. \tag{B.7}
 \end{aligned}$$

Multiplicando a ambos miembros por $\chi_{\epsilon\alpha}^*(\mathbf{k}_{\alpha}, s)$ y sumando sobre ϵ_{α} obtenemos las energías de Hartree-Fock

$$\begin{aligned}
 E(\mathbf{k}_{\alpha}, s) &= \sum_{\epsilon_{\alpha}\epsilon} \chi_{\epsilon_{\alpha}}^*(\mathbf{k}_{\alpha}, s)h_{\epsilon_{\alpha}\epsilon}(\mathbf{k}_{\alpha})\chi_{\epsilon}(\mathbf{k}_{\alpha}, s) \\
 & - \frac{1}{A} \left[\sum_{\epsilon_{\alpha}} \sum_{\epsilon} \sum_i^{N_+} v(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_{\alpha})\chi_{\epsilon_{\alpha}}^*(\mathbf{k}_{\alpha}, s)\chi_{\epsilon}(\mathbf{k}_{\alpha}, s)\chi_{\epsilon}^*(\mathbf{k}_i, s)\chi_{\epsilon_{\alpha}}(\mathbf{k}_i, s) \right. \\
 & \left. + \sum_{\epsilon_{\alpha}} \sum_{\epsilon} \sum_j^{N_-} v(\mathbf{k}_{\alpha} - \mathbf{k}_j)\chi_{\epsilon_{\alpha}}^*(\mathbf{k}_{\alpha}, s)\chi_{\epsilon}(\mathbf{k}_{\alpha}, s)\chi_{\epsilon}^*(\mathbf{k}_j, -s)\chi_{\epsilon_{\alpha}}(\mathbf{k}_j, -s) \right]. \tag{B.8}
 \end{aligned}$$

B.2.1. Diagonalización del Hamiltoniano de Hartree-Fock con acoplamiento Rashba

Una vez obtenidas las energías de los orbitales, tenemos que encontrar las condiciones para que el Hamiltoniano de Hartree-Fock de una partícula $h_{HF}^{(s)}$ sea diagonal en la base de los espinores $\chi(\mathbf{k}, s)$. La Ec. (B.7) nos está dando la forma de operar de dicho Hamiltoniano

$$\begin{aligned}
 h_{HF}^{(s)}\chi_{\epsilon\alpha}(\mathbf{k}_\alpha, s) &= \sum_{\epsilon} h_{\epsilon\alpha\epsilon}(\mathbf{k}_\alpha)\chi_{\epsilon}(\mathbf{k}_\alpha, s) \\
 &- \frac{1}{A} \left[\sum_{\epsilon} \sum_i^{N_+} v(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_\alpha)\chi_{\epsilon}(\mathbf{k}_\alpha, s)\chi_{\epsilon}^*(\mathbf{k}_i, s)\chi_{\epsilon\alpha}(\mathbf{k}_i, s) \right. \\
 &\left. + \sum_{\epsilon} \sum_j^{N_-} v(\mathbf{k}_\alpha - \mathbf{k}_j)\chi_{\epsilon}(\mathbf{k}_\alpha, s)\chi_{\epsilon}^*(\mathbf{k}_j, -s)\chi_{\epsilon\alpha}(\mathbf{k}_j, -s) \right], \quad (\text{B.9})
 \end{aligned}$$

donde $h_{HF}^{(s)}$ es el Hamiltoniano de Hartree-Fock de una partícula con número cuántico s .

Obtenemos las condiciones de diagonalización a partir de

$$\sum_{\epsilon\alpha} \chi_{\epsilon\alpha}^*(\mathbf{k}_\alpha, -s)h_{HF}^{(s)}\chi_{\epsilon\alpha}(\mathbf{k}_\alpha, s) = 0, \quad (\text{B.10})$$

y utilizando la Ec. (B.9) resulta la siguiente ecuación compleja

$$\begin{aligned}
 \sum_{\epsilon\alpha\epsilon} \chi_{\epsilon\alpha}^*(\mathbf{k}_\alpha, -s)h_{\epsilon\alpha\epsilon}(\mathbf{k}_\alpha)\chi_{\epsilon}(\mathbf{k}_\alpha, s) &= \\
 \frac{1}{A} \sum_{\epsilon} \sum_{\epsilon\alpha} \left[\chi_{\epsilon\alpha}^*(\mathbf{k}_\alpha, -s)\chi_{\epsilon}(\mathbf{k}_\alpha, s) \sum_i^{N_+} v(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_\alpha)\chi_{\epsilon}^*(\mathbf{k}_i, s)\chi_{\epsilon\alpha}(\mathbf{k}_i, s) \right. \\
 \left. + \chi_{\epsilon\alpha}^*(\mathbf{k}_\alpha, -s)\chi_{\epsilon}(\mathbf{k}_\alpha, s) \sum_i^{N_-} v(\mathbf{k}_\alpha - \mathbf{k}_i)\chi_{\epsilon}^*(\mathbf{k}_i, -s)\chi_{\epsilon\alpha}(\mathbf{k}_i, -s) \right], \quad (\text{B.11})
 \end{aligned}$$

que equivale a dos ecuaciones reales, una para la parte real y otra para la parte imaginaria.

Ahora va a resultar conveniente realizar una transformación de notación en los espinores $\chi(\mathbf{k}, s)$. Sean $\theta(\mathbf{k})$ y $\phi(\mathbf{k})$ los ángulos polares de un vector unitario $\mathbf{u}(\mathbf{k})$ tal que los espinores

$\chi(\mathbf{k}, s)$ son autoestados de la proyección de espín S_u en la dirección \mathbf{u} , con autovalores $s\frac{\hbar}{2}$

$$S_u \chi(\mathbf{k}, s) = s \frac{\hbar}{2} \chi(\mathbf{k}, s). \quad (\text{B.12})$$

Las componentes de los espinores resultan [63]

$$\chi_+(\mathbf{k}, +) = \cos[\theta(\mathbf{k})/2] \exp[-i\phi(\mathbf{k})/2], \quad (\text{B.13})$$

$$\chi_-(\mathbf{k}, +) = \sin[\theta(\mathbf{k})/2] \exp[i\phi(\mathbf{k})/2], \quad (\text{B.14})$$

$$\chi_+(\mathbf{k}, -) = -\sin[\theta(\mathbf{k})/2] \exp[-i\phi(\mathbf{k})/2], \quad (\text{B.15})$$

$$\chi_-(\mathbf{k}, -) = \cos[\theta(\mathbf{k})/2] \exp[i\phi(\mathbf{k})/2]. \quad (\text{B.16})$$

Efectuando las sumas sobre los índices de espín ϵ y ϵ_α se obtienen las siguientes dos ecuaciones

$$\begin{aligned} & 2\alpha \langle E_z \rangle k \sin[\phi(\mathbf{k}) - \varphi] \cos \theta(\mathbf{k}) = \\ & \frac{1}{A} \sum_{s', \mathbf{k}' \in \mathcal{D}_{s'}} s' v(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \{ \sin \theta(\mathbf{k}) \cos \theta(\mathbf{k}') \\ & - \sin \theta(\mathbf{k}') \cos \theta(\mathbf{k}) \cos[\phi(\mathbf{k}) - \phi(\mathbf{k}')] \}, \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

por la parte real y

$$2\alpha\langle E_z \rangle k \cos[\phi(\mathbf{k}) - \varphi] = \frac{1}{A} \sum_{s', \mathbf{k}' \in \mathcal{D}_{s'}} s' v(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \sin \theta(\mathbf{k}') \sin[\phi(\mathbf{k}) - \phi(\mathbf{k}')], \quad (\text{B.18})$$

por la parte imaginaria. Hemos efectuado un ligero cambio de notación: los dominios \mathcal{D}_{\pm} son las regiones del espacio \mathbf{k} ocupadas por los electrones, es decir $\sum_i^{N_{\pm}} = \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{D}_{\pm}}$.

B.2.2. Simetría circular en Hartree-Fock con acoplamiento Rashba

Para el caso en que los dominios \mathcal{D}_{\pm} son círculos llenos de radios $k_{F\pm}$ y los ángulos polares son $\theta(k)$ independiente de φ y $\phi(\varphi) = \varphi - \frac{\pi}{2}$ independiente de k , la ecuación de diagonalización (B.17) se transforma en $\left(\sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{D}_{\pm}} = \frac{A}{(2\pi)^2} \int_0^{k_{F\pm}} d^2k \right)$

$$\begin{aligned} 2\alpha\langle E_z \rangle \frac{\varepsilon}{e^2} k \cos \theta(k) = & \\ \int_{k_{F+}}^{k_{F-}} k' dk' \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi'}{2\pi} \frac{1}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|} \{ \sin \theta(k) \cos \theta(k') & \\ - \cos \theta(k) \sin \theta(k') \cos(\varphi - \varphi') \}. & \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

Haciendo el cambio de variable $x' = \frac{k'}{k_{F-}}$, definiendo $x = \frac{k}{k_{F-}}$, $x_c = \frac{k_{F+}}{k_{F-}}$ y $p = 2\alpha\langle E_z \rangle \frac{\varepsilon}{e^2}$ resulta

$$\begin{aligned} px \cos \theta(x) = \sin \theta(x) \int_{x_c}^1 x' dx' \cos \theta(x') \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi'}{2\pi} \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} & \\ - \cos \theta(x) \int_{x_c}^1 x' dx' \sin \theta(x') \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi'}{2\pi} \frac{\cos(\varphi - \varphi')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}. & \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

Las integrales angulares pueden resolverse, quedando expresadas en la siguiente forma

$$\int_0^{2\pi} \frac{d\varphi'}{2\pi} \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} = \frac{1}{x + x'} K(\lambda) \quad (\text{B.21})$$

y

$$\int_0^{2\pi} \frac{d\varphi'}{2\pi} \frac{\cos(\varphi - \varphi')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} = -\frac{1}{x + x'} \left\{ \frac{2}{\lambda^2} [E(\lambda) - K(\lambda)] + K(\lambda) \right\} \quad (\text{B.22})$$

con

$$\lambda = \frac{2\sqrt{xx'}}{x + x'}. \quad (\text{B.23})$$

Las funciones $K(\lambda)$ y $E(\lambda)$ son las integrales elípticas de primera y segunda clase respectivamente, multiplicadas por $2/\pi$

$$K(\lambda) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} (1 - \lambda \sin^2 \theta)^{-1/2} d\theta, \quad (\text{B.24})$$

y

$$E(\lambda) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} (1 - \lambda \sin^2 \theta)^{1/2} d\theta. \quad (\text{B.25})$$

Reemplazando las expresiones dadas por las Ecs. (B.21) y (B.22) en la Ec. (B.20) obtenemos la *ecuación integral angular*

$$\begin{aligned} px \cos \theta(x) &= \sin \theta(x) \int_{x_c}^1 \frac{x' dx'}{x + x'} \cos \theta(x') K(\lambda) + \cos \theta(x) \int_{x_c}^1 \frac{x' dx'}{x + x'} \sin \theta(x') K(\lambda) \\ &- \cos \theta(x) \int_{x_c}^1 \frac{(x + x') dx'}{2x} \sin \theta(x') [K(\lambda) - E(\lambda)]. \end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

que corresponde a la parte real de la ecuación de diagonalización del Hamiltoniano de Hartree-Fock de una partícula. La ecuación (B.18) correspondiente a la parte imaginaria se satisface directamente porque, por simetría es

$$\int_0^{2\pi} \frac{d\varphi'}{2\pi} \frac{\sin(\varphi - \varphi')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} = 0. \quad (\text{B.27})$$

Para continuar, vamos a encontrar la forma que toma la ecuación (B.8) de la energía de los orbitales de Hartree-Fock si adoptamos la solución con simetría circular que dio lugar a la *ecuación integral angular* (B.26). Efectuando las sumas sobre los índices de espín ϵ y ϵ_α se obtiene

$$\begin{aligned} E(k, s) &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + s\alpha \langle E_z \rangle k \sin \theta(k) \\ &- \frac{1}{2} \frac{e^2}{\epsilon} \left\{ \int_0^{k_{F+}} k' dk' \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi'}{2\pi} \frac{1}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|} + \int_0^{k_{F-}} k' dk' \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi'}{2\pi} \frac{1}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|} \right. \\ &- s \left[\cos \theta(k) \int_{k_{F+}}^{k_{F-}} k' dk' \cos \theta(k') \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi'}{2\pi} \frac{1}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|} \right. \\ &\left. \left. + \sin \theta(k) \int_{k_{F+}}^{k_{F-}} k' dk' \sin \theta(k') \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi'}{2\pi} \frac{\cos(\varphi - \varphi')}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|} \right] \right\}. \quad (\text{B.28}) \end{aligned}$$

Utilizando las Ecs. (B.21) y (B.22) junto con

$$\int_0^{k_{F\pm}} \frac{k' dk'}{k+k'} K\left(\frac{2\sqrt{kk'}}{k+k'}\right) = k_{F\pm} E\left(\frac{k}{k_{F\pm}}\right), \quad k \leq k_{F\pm} \quad (\text{B.29})$$

y

$$\int_0^{k_{F\pm}} \frac{k' dk'}{k+k'} K\left(\frac{2\sqrt{kk'}}{k+k'}\right) = k \left\{ E\left(\frac{k_{F\pm}}{k}\right) - \left[1 - \left(\frac{k_{F\pm}}{k}\right)^2\right] K\left(\frac{k_{F\pm}}{k}\right) \right\} \quad (\text{B.30})$$

si $k \geq k_{F\pm}$, podemos obtener la energía de partícula única de HF

$$\begin{aligned} E(k, s) &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + s\alpha \langle E_z \rangle k \sin \theta(k) - \frac{1}{2} \frac{e^2}{\varepsilon} [F_+(k) + F_-(k)] \\ &+ \frac{1}{2} \frac{e^2}{\varepsilon} s \left\{ \cos \theta(k) \int_{k_{F+}}^{k_{F-}} \frac{k' dk'}{k+k'} \cos \theta(k') K(\lambda) \right. \\ &\left. - \sin \theta(k) \int_{k_{F+}}^{k_{F-}} \frac{k' dk'}{k+k'} \sin \theta(k') \left[\frac{2}{\lambda^2} [E(\lambda) - K(\lambda)] + K(\lambda) \right] \right\}. \quad (\text{B.31}) \end{aligned}$$

donde las funciones $F_{\pm}(k)$ son las Ecs. (B.29) y (B.30) según sea $k \leq k_{F\pm}$ o $k \geq k_{F\pm}$ respectivamente. Hay que tener en cuenta que quedan definidas tres zonas para k : (i) $k \leq k_{F+}$, (ii) $k_{F+} < k \leq k_{F-}$ y (iii) $k_{F-} < k$. Efectuando los cambios de variable $x = \frac{k}{k_{F-}}$ y $x' = \frac{k'}{k_{F-}}$ obtenemos

$$\begin{aligned} E(x, s) &= \frac{2}{r_s} \frac{U_e^*}{\sqrt{1+x_c^2}} \left\{ \frac{2}{r_s} \frac{x^2}{\sqrt{1+x_c^2}} + s p x \sin \theta(x) - [F_+(x) + F_-(x)] \right. \\ &+ s \left[\cos \theta(x) \int_{x_c}^1 \frac{x' dx'}{x+x'} \cos \theta(x') K(\lambda) \right. \\ &\left. \left. - \sin \theta(x) \int_{x_c}^1 \frac{x' dx'}{x+x'} \sin \theta(x') \left[\frac{2}{\lambda^2} [E(\lambda) - K(\lambda)] + K(\lambda) \right] \right] \right\}, \quad (\text{B.32}) \end{aligned}$$

donde U_e^* es la constante de Rydberg efectiva en el material: $U_e^* = \frac{e^2}{2\epsilon a_B^*} = 5.8$ meV en GaAs. Las funciones $F \pm (x)$ ahora son

$$F_+(x) = x_c E \left(\frac{x}{x_c} \right), \quad x < x_c \quad (\text{B.33})$$

$$F_+(x) = x \left\{ E \left(\frac{x_c}{x} \right) - \left[1 - \left(\frac{x_c}{x} \right)^2 \right] K \left(\frac{x_c}{x} \right) \right\}, \quad x > x_c \quad (\text{B.34})$$

y

$$F_-(x) = E(x), \quad x < 1 \quad (\text{B.35})$$

$$F_-(x) = x \left\{ E \left(\frac{1}{x} \right) - \left[1 - \left(\frac{1}{x} \right)^2 \right] K \left(\frac{1}{x} \right) \right\}, \quad x > 1 \quad (\text{B.36})$$

B.2.3. Polarización de espín en Hartree-Fock con acoplamiento Rashba

Para la misma simetría circular, es decir círculos de Fermi de radios $k_{F\pm}$, $\theta(k)$ independiente de φ y $\phi(\varphi) = \varphi - \frac{\pi}{2}$ independiente de k , podemos obtener la polarización de espín en el estado fundamental de Hartree-Fock. Para ello necesitamos conocer el valor medio del operador S_z de un electrón en el estado dado por el espinor $\chi(\mathbf{k}, s)$. Para ello utilizamos las expresiones de la componentes del espinor en función de los ángulos polares dados por las Ecs. (B.13), (B.14), (B.15) y (B.16). El resultado es

$$\langle S_z(k, s) \rangle = \frac{\hbar}{2} s \cos \theta(k). \quad (\text{B.37})$$

Con este resultado, podemos sumar sobre todos los electrones en el estado fundamental de HF

$$\langle S_z \rangle = \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_{F+}} \langle S_z(k, +) \rangle + \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_{F-}} \langle S_z(k, -) \rangle = -\frac{A \hbar}{2\pi} \frac{1}{2} \int_{k_{F+}}^{k_{F-}} k dk \cos \theta(k). \quad (\text{B.38})$$

Efectuando el cambio de variable $x = \frac{k}{k_{F-}}$, recordando que $x_c = \frac{k_{F+}}{k_{F-}}$ y $4\pi n_s = k_{F+}^2 + k_{F-}^2$ (n_s es la densidad del 2DEG), el espín promedio por electrón en la dirección z resulta

$$\langle S_z \rangle = -\frac{\hbar}{2} \frac{2}{1 + x_c^2} \int_{x_c}^1 x dx \cos \theta(x; p, x_c). \quad (\text{B.39})$$

Las energías del estado fundamental de Hartree-Fock para cada fase pueden calcularse sin problema utilizando los elementos que vimos en este Apéndice, junto con la Ec. (A.17).

Apéndice C

Propiedades de la ecuación integral angular

En este Apéndice vamos a enunciar y demostrar algunas propiedades que hemos encontrado que tiene la *ecuación integral angular* (4.23). Por autonomía del Apéndice la repetimos aquí

$$\begin{aligned} px \cos \theta(x) &= \sin \theta(x) \int_{x_c}^1 \frac{x' dx'}{x + x'} \cos \theta(x') K(\lambda) + \cos \theta(x) \int_{x_c}^1 \frac{x' dx'}{x + x'} \sin \theta(x') K(\lambda) \\ &- \cos \theta(x) \int_{x_c}^1 \frac{(x + x') dx'}{2x} \sin \theta(x') [K(\lambda) - E(\lambda)], \end{aligned} \quad (\text{C.1})$$

con

$$\lambda = \frac{2\sqrt{xx'}}{x + x'}. \quad (\text{C.2})$$

Las funciones $K(\lambda)$ y $E(\lambda)$ son las integrales elípticas de primera y segunda clase respectivamente, multiplicadas por $\frac{2}{\pi}$

$$K(\lambda) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} (1 - \lambda \sin^2 \varphi)^{-1/2} d\varphi, \quad (\text{C.3})$$

y

$$E(\lambda) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} (1 - \lambda \sin^2 \varphi)^{1/2} d\varphi. \quad (\text{C.4})$$

Propiedad 1. Si $\theta(x)$ es solución de la Ec. (C.1), también lo es $\theta'(x) = \pi - \theta(x)$.

Se puede verificar directamente reemplazando $\theta(x)$ por $\pi - \theta(x)$ en la Ec. (C.1) y utilizando que $\cos[\pi - \theta(x)] = -\cos \theta(x)$ y $\sin[\pi - \theta(x)] = \sin \theta(x)$.

Propiedad 2. La solución $\cos \theta(x)$ es siempre positiva o siempre negativa. Es decir, no puede cambiar de signo en el dominio.

Supongamos lo contrario, es decir, la solución $\cos \theta(x)$ es positiva hasta un cierto x_0 (o sea, $\theta(x) < \pi/2$) en donde pasa por cero y se vuelve negativa para los siguientes $x > x_0$ (es decir, $\theta(x) > \pi/2$). Tomemos uno de esos x para el que $\theta(x) > \pi/2$. Sabemos por la **Propiedad 1**, que existirá una solución positiva en $\theta'(x) = \pi - \theta(x) < \pi/2$. Es decir, a partir de x_0 , la solución quedaría dividida en dos ramas, una rama negativa y otra rama positiva que sería la imagen especular de la primera. En este caso, la solución $\cos \theta(x)$ sería

bivaluada en todos esos puntos pero siempre podríamos elegir la rama positiva.

Propiedad 3. Para cualquier valor de p y x_c es $\cos\theta(0) = 1$, es decir $\theta(0) = 0$.

Para demostrarlo, antes de reemplazar por $x = 0$ en la Ec. (C.1), es conveniente desarrollar primero $K(\lambda)$ y $E(\lambda)$ a primer orden no nulo en λ , para $x \rightarrow 0$, obteniendo

$$K(\lambda) \approx 1 + \frac{1}{4}\lambda^2 = 1 + \frac{xx'}{(x+x')^2}, \quad (\text{C.5})$$

y

$$E(\lambda) \approx 1 - \frac{1}{4}\lambda^2 = 1 - \frac{xx'}{(x+x')^2}, \quad (\text{C.6})$$

siendo su diferencia

$$K(\lambda) - E(\lambda) \approx \frac{1}{2}\lambda^2 = \frac{2xx'}{(x+x')^2}. \quad (\text{C.7})$$

Reemplazando las Ecs. (C.5) y (C.7) en la Ec. (C.1) y tomando límite para $x \rightarrow 0$ obtenemos

$$\sin\theta(0) \int_{x_c}^1 dx' \cos\theta(x') = 0. \quad (\text{C.8})$$

La integral no puede ser cero porque el integrando es siempre del mismo signo (por la

Propiedad 2), con lo que debe ser $\sin \theta(0) = 0$, es decir $\cos \theta(0) = 1$.

Propiedad 4. La solución no trivial $\cos \theta(x)$ no puede anularse en ningún punto x del dominio definido por el intervalo $[0, 1]$ porque, de lo contrario, debería anularse en todo punto.

Supongamos que existe un $x \in [0, 1]$ para el cual resulta $\cos \theta(x) = 0$. Entonces, la Ec. (C.1) se convierte en

$$\int_{x_c}^1 \frac{x' dx'}{x + x'} \cos \theta(x') K(\lambda) = 0. \quad (\text{C.9})$$

Pero, nuevamente, por la **Propiedad 2**, el integrando tiene signo definido en todo el intervalo de integración y la integral no puede anularse salvo que sea $\cos \theta(x') = 0$ para todo $x_c \leq x' \leq 1$. Hasta aquí hemos probado que $\cos \theta(x) = 0$ si $x \in [x_c, 1]$. Falta probar que lo mismo ocurre si $x \in (0, x_c)$. Supongamos, entonces, que existe un $x_0 \in [0, 1]$ tal que $\cos \theta(x_0) = 0$. Sabemos por lo demostrado hasta aquí que debe ser $\cos \theta(x) = 0$ para todo $x \in [x_c, 1]$. Ahora, queremos saber si podría existir $x \in (0, x_c)$, tal que $\cos \theta(x) \neq 0$ (excluimos $x = 0$ porque sabemos, por la **Propiedad 3**, que $\cos \theta(0) = 1$). En este caso, la Ec. (C.1) se convierte en

$$px \cos \theta(x) = \cos \theta(x) \int_{x_c}^1 \frac{x' dx'}{x + x'} K(\lambda) - \cos \theta(x) \int_{x_c}^1 \frac{(x + x') dx'}{2x} [K(\lambda) - E(\lambda)], \quad (\text{C.10})$$

o bien

$$\cos \theta(x) \left\{ px - \int_{x_c}^1 \frac{x' dx'}{x + x'} K(\lambda) + \int_{x_c}^1 \frac{(x + x') dx'}{2x} [K(\lambda) - E(\lambda)] \right\} = 0, \quad (\text{C.11})$$

y como se supuso $\cos \theta(x) \neq 0$, debe ser

$$px + \int_{x_c}^1 \left\{ \frac{x + x'}{2x} [K(\lambda) - E(\lambda)] - \frac{x'}{x + x'} K(\lambda) \right\} dx' = 0. \quad (\text{C.12})$$

Si logramos probar que el integrando es siempre positivo, esta ecuación nunca podría ser satisfecha y quedaría probada la propiedad. Para ello reordenamos el integrando $I(x, x')$ y obtenemos

$$I(x, x') = \frac{x^2 + x'^2}{2x(x + x')} [K(\lambda) - E(\lambda)] - \frac{x'}{x + x'} E(\lambda). \quad (\text{C.13})$$

Para lo que sigue, resultará conveniente escribir las expresiones en serie de potencias de λ de las integrales elípticas $K(\lambda)$ y $E(\lambda)$ [64]

$$K(\lambda) = 1 + \left(\frac{1}{2}\right)^2 \lambda^2 + \left(\frac{1.3}{2.4}\right)^2 \lambda^4 + \left(\frac{1.3.5}{2.4.6}\right)^2 \lambda^6 + \dots \quad (\text{C.14})$$

y

$$E(\lambda) = 1 - \left(\frac{1}{2}\right)^2 \frac{\lambda^2}{1} - \left(\frac{1.3}{2.4}\right)^2 \frac{\lambda^4}{3} - \left(\frac{1.3.5}{2.4.6}\right)^2 \frac{\lambda^6}{5} - \dots \quad (\text{C.15})$$

Podemos ver en estas expresiones que $1 - E(\lambda)$ y $K(\lambda) - E(\lambda)$ son ambas positivas y crecientes respecto de λ . Por otra parte, $\lambda = \frac{2\sqrt{xx'}}{x+x'}$ es función creciente de x siempre que $x < x'$, que es nuestro caso pues $x \in (0, x_c)$ y $x' \in [x_c, 1]$. Por lo tanto, podemos afirmar que $1 - E(\lambda)$ y $K(\lambda) - E(\lambda)$ son también funciones crecientes de x . Resultará útil reescribir la Ec. (C.13) para obtener

$$I(x, x') = \frac{x^2 + x'^2}{2x(x + x')} [K(\lambda) - E(\lambda)] + \frac{x'}{x + x'} [1 - E(\lambda)] - \frac{x'}{x + x'}. \quad (\text{C.16})$$

Por otro lado, $\frac{x'}{x+x'}$ es positiva y decreciente respecto de x . Entonces, bastaría con probar que $I(x \approx 0, x') > 0$. Para ello, vamos a desarrollar la Ec. (C.16) a primer orden en x/x' , para lo cual necesitamos los desarrollos en serie hasta λ^4 , dados por las Ecs. (C.14) y (C.15). Definiendo $z = x/x'$ y reemplazando $K(\lambda) - E(\lambda)$ y $1 - E(\lambda)$ por sus desarrollos hasta λ^4 , obtenemos

$$I(z) \approx -\frac{1}{(1+z)} + \frac{z^2 + z + 1}{(1+z)^3} + \frac{6z^3 + 3z^2 + 6z}{4(1+z)^5}. \quad (\text{C.17})$$

Como estamos buscando un desarrollo a primer orden en z , podemos despreciar en el numerador los términos de orden mayor o igual a z^2 y obtener

$$I(z) \approx -\frac{1}{(1+z)} + \frac{1}{(1+z)^2} + \frac{3z}{2(1+z)^5}. \quad (\text{C.18})$$

Finalmente, desarrollando los denominadores de los dos primeros términos a primer orden y el tercer a orden cero, obtenemos

$$I(x \approx 0, x') \approx \frac{1}{2} \frac{x}{x'}, \quad (\text{C.19})$$

a primer orden en x/x' . Entonces, el integrando de la Ec. (C.12) será siempre positivo y la igualdad nunca podrá cumplirse, requiriendo entonces que $\cos\theta(x) = 0$ en la Ec. (C.11), como queríamos demostrar.

Propiedad 5. *Para cada p , existe un valor máximo para x_c , más allá del cual la única solución posible de la Ec. (C.1) es la trivial, es decir, $\cos\theta(x) = 0$ para todo $x \in [0, 1]$. Una cota superior para este valor máximo, viene dada por $x_{c,sup} = (1 + \frac{\pi}{2}p)^{-1}$.*

Para demostrar esta propiedad, vamos a recurrir al teorema del valor medio del cálculo integral. El mismo, nos asegura que la integral definida de una función $f(x)$, continua en el intervalo cerrado $[a, b]$, se puede escribir como $\int_a^b f(x)dx = f(x_0)(b - a)$, donde $x_0 \in (a, b)$. Si aplicamos el teorema a la Ec. (C.1) obtenemos

$$px \cos \theta(x) = (1 - x_c) \left\{ [\sin \theta(x) \cos \theta(x_0) + \cos \theta(x) \sin \theta(x_0)] \frac{x_0}{x + x_0} K(x, x_0) - \cos \theta(x) \sin \theta(x_0) \frac{x + x_0}{2x} [K(x, x_0) - E(x, x_0)] \right\} = (1 - x_c) F(x, x_0), \quad (\text{C.20})$$

donde la función continua $F(x, x')$ es el integrando de la Ec. (C.1) y $x_0 \in (x_c, 1)$ es, a su vez, función de x como variable y de p y x_c como parámetros. Es decir, $x_0 = g(x; p, x_c)$ (en lo que sigue, para abreviar la notación, omitiremos la dependencia con p y x_c).

En lo que sigue vamos a demostrar que existe al menos un punto x del dominio, que es a su vez el punto medio al que se refiere el teorema del valor medio. El dominio de la función $g(x)$ es el intervalo cerrado $D = [0, 1]$ y su imagen I , es un subconjunto de D , es decir, $I \subset D$. Para lo que sigue, será fundamental determinar si I es también un intervalo, o si tiene algunos puntos excluidos en su interior, es decir, queremos saber si $g(x)$ es una función continua. Supongamos que la imagen es $I = [x_1, x_e) \cup (x_e, x_2]$, es decir, el punto x_e está excluido. Sabemos que $F(x, x')$ es continua y, por lo tanto, al acercarnos con x' hacia x_e todo lo que queramos, deberá ocurrir que $\lim_{x' \rightarrow x_e} F(x, x') = F(x, x_e)$. Por otra parte, para los $x' \in I$ infinitamente próximos a x_e , por derecha y por izquierda, la integral deberá ser $(1 - x_c)F(x, x_e)$. Pero esto significa que $x_e \in I$ siendo, entonces, la imagen $I = [x_1, x_2]$ un intervalo, es decir, $g(x)$ debe ser continua.

Al ser g continua, podemos afirmar que existirá al menos un punto $x_0 \in D$, tal que $g(x_0) = x_0 \in I$. Para convencernos, pensemos en la gráfica de la función $g(x)$. La misma se extenderá, de izquierda a derecha, desde $x = 0$ hasta $x = 1$ y estará contenida en una banda vertical, definida por $y(x) = x_1$ e $y(x) = x_2$. La recta definida por $y(x) = x$, atraviesa dicha banda y la divide en dos zonas. El recorrido de $g(x)$, por ser continuo, deberá cortar a la recta $y(x)$ y, en ese caso, será $g(x_0) = x_0$ para algún x_0 tal que $x_1 \leq x_0 \leq x_2$.

Ahora podemos asegurar que existe al menos un punto del dominio que es a su vez el

punto medio al que hace referencia el teorema del valor medio y entonces es posible reemplazar a x por x_0 en la Ec. (C.20) y obtener la siguiente relación

$$px_0 = \frac{2}{\pi}(1 - x_c) \sin \theta(x_0), \quad (\text{C.21})$$

donde hemos reemplazamos $E(1)$ por su valor $2/\pi$ y descartamos que $\cos \theta(x_0) = 0$, de lo contrario, por la **Propiedad 4**, la solución sería la trivial.

Hasta aquí, la Ec. (C.21) es general y nos da una relación entre p , x_c , $\sin \theta(x_0)$ y x_0 que tiene que cumplirse para al menos un punto $x_0 \in (x_c, 1)$. Sabemos que $x_c < x_0$ y dado que $\sin \theta(x_0) < 1$, podemos obtener la siguiente desigualdad a partir de la Ec. (C.21):

$$px_c < \frac{2}{\pi}(1 - x_c), \quad (\text{C.22})$$

y reordenando algunos términos resulta

$$x_c < \frac{1}{1 + \frac{\pi}{2}p} = x_{c,sup}(p). \quad (\text{C.23})$$

Es decir, hemos encontrado un valor máximo para x_c , dependiente de p , dado por $x_{c,sup}(p) = (1 + \frac{\pi}{2}p)^{-1}$, como queríamos demostrar.

La función $x_{c,sup}(p)$ de la Ec. (C.23), representa una cota superior para los valores encontrados durante el proceso de cálculo representado por la curva con círculos llenos en la

Fig. 4.2. Se puede observar que las acotaciones son bastante ajustadas para $p \leq 2$ y excedidas para el resto de los valores de p . Para visualizar mejor esto último, podemos volver a la Ec. (C.21) y hacer uso de un resultado que hemos obtenido en el curso del proceso de cálculo para obtener la Fig. 4.2: cuando x_c toma el valor máximo es $\sin \theta(x_c) \approx 1$, para todos los valores de p estudiados. Con este resultado, y como $x_c < x_0$, resulta $\sin \theta(x_c) < \sin \theta(x_0)$ ($\theta(x)$ es siempre creciente, para cualquier valor de p) podemos escribir

$$p(x_{c,max} + \chi_0) \approx \frac{2}{\pi}(1 - x_{c,max}), \quad (\text{C.24})$$

donde $0 < \chi_0(p) < 1 - x_{c,max}$ es el excedente respecto de $x_{c,max}$. Reordenando términos obtenemos

$$x_{c,max} \approx \frac{1 - \frac{\pi}{2}p\chi_0(p)}{1 + \frac{\pi}{2}p}, \quad (\text{C.25})$$

la cual nos permite mostrar un acercamiento a los valores de la Fig. 4.2. Haciendo $\chi_0 = 0$ en la Ec. (C.25) podemos obtener la Ec. (C.23) que, como vimos, es una cota superior. Por otro lado, haciendo $\chi_0 = 1 - x_{c,max}$ obtenemos

$$x_{c,max} \approx 1 - \frac{\pi}{2}p, \quad (\text{C.26})$$

que representa una cota inferior para la curva de la Fig. 4.2.

Propiedad 6. En la medida que x_c se aproxima a x_{cmax} , la solución se aproxima a una curva límite es decir, no tiende con continuidad hacia cero en todo punto salvo en el origen.

Supongamos lo contrario, es decir, para un dado p , cuando x_c se aproxima a $x_{c,max}$, la solución $\cos\theta(x)$ se vuelve tan pequeña como se quiera (pero no nula), salvo para valores muy pequeños de x tales que $x/x_c \ll 1$. Además, pidamos que x sea tan próximo a cero como para que $\cos\theta(x) \approx 1 - \frac{1}{2}\theta(x)^2 \approx 1$ a primer orden en $\theta(x)$. Analicemos la Ec. (C.1) bajo estas condiciones:

- (a) En el primer miembro y en los dos últimos términos del segundo miembro, podemos aproximar $\cos\theta(x) = 1$.
- (b) El primer término del segundo miembro es de orden superior respecto del segundo, tercero y del primer miembro.
- (c) En el segundo y tercer término del segundo miembro podemos aproximar $\sin\theta(x') = 1$.

De acuerdo con (a), (b) y (c), la Ec. (C.1) resulta, para $x/x_c \ll 1$:

$$px \approx \int_{x_c}^1 \frac{x'dx'}{x+x'} K(\lambda) - \int_{x_c}^1 \frac{(x+x')dx'}{2x} [K(\lambda) - E(\lambda)]. \quad (C.27)$$

Ahora tenemos que desarrollar a primer orden en x/x' , pero esto ya lo hicimos cuando analizamos, en la **Propiedad 4**, el signo del integrando de la Ec. (C.12). Siguiendo ese

razonamiento llegamos a

$$p \approx -\frac{1}{2} \int_{x_c}^1 \frac{dx'}{x'} = \frac{1}{2} \ln x_c < 0, \quad (\text{C.28})$$

pero, como sabemos, es $p > 0$. El absurdo provino de la negación de la hipótesis, con lo que queda demostrada la existencia de una curva límite, como indica la propiedad.

Agradecimientos

Agradezco profundamente al Dr. Pablo I. Tamborenea por su constante dedicación y atención a mi trabajo de investigación, en un marco de respeto y libertad creativa. Agradezco también al Departamento de Física por las materias, seminarios y coloquios que fueron muy importantes para la realización de la tesis y completar mi formación. Finalmente, gracias a mi familia y a mis amigos que me apoyaron siempre.

TRABAJOS PUBLICADOS

Trabajos publicados y presentaciones en reuniones científicas durante el período de doctorado:

- *Spontaneous spin polarization in doped semiconductor quantum wells.* L. O. Juri and P. I. Tamborenea, Eur. Phys. J. B **45**, 9-17 (2005).
- *Hartree-Fock ground state of the two-dimensional electron gas with Rashba spin-orbit interaction.* L. O. Juri and P. I. Tamborenea, Phys. Rev. B **77**, 233310 (2008).
- *90 Reunión Anual de la AFA, 26-29 septiembre 2005.* La plata.
- *Frontiers of Condensed Matter Physics, 2008.* Laboratorio Tandar.

Bibliografía

- [1] Philippe Nozières and David Pines, *The Theory of Quantum Liquids* (W. A. Benjamin, 1966).
- [2] Gabriele F. Giuliani and Giovanni Vignale, *Quantum Theory of the Electron Liquid* (Cambridge University Press, Cambridge, 2005).
- [3] F. Bloch, *Z. Phys.* **57**, 545 (1929).
- [4] D. Ceperley, *Phys. Rev. B* **18**, 3126 (1978).
- [5] B. Tanatar and D. M. Ceperley, *Phys. Rev. B* **39**, 5005 (1989).
- [6] C. Attaccalite, S. Moroni, P. Gori-Giorgi, and G. B. Bachelet, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 256601 (2002).
- [7] G. Ortiz, M. Harris, and P. Ballone, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 5317 (1999).
- [8] W. M. C. Foulkes, L. Mitas, R. J. Needs and G. Rajagopal, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 33 (2001).
- [9] Y. Kwon, D. M. Ceperley and R. M. Martin, *Phys. Rev. B* **48**, 12037 (1993).
- [10] T. Ando, A. B. Fowler, and F. Stern, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 437 (1982).
- [11] F. T. Vasko and A. V. Kuznetsov, *Electronic States and Optical Transitions in Semiconductor Heterostructures* (Springer-Verlag, New York, 1999).

-
- [12] J. H. Davies, *The Physics of Low-Dimensional Semiconductors* (Cambridge University Press, New York, 1998).
- [13] G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures* (Halsted Press, New York, 1988).
- [14] H. Haug and S. W. Koch, *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductor*, Second Edition (World Scientific, Singapore, 1993), chapter 7.
- [15] A. L. Subasi and B. Tanatar, Phys. Rev. B **78**, 155304 (2008).
- [16] R. J. Radtke, P. I. Tamborenea, and S. Das Sarma, Phys. Rev. B **54**, 13832 (1996).
- [17] J. Zhu, H. L. Stormer, L. N. Pfeiffer, K. W. Baldwin, and K. W. West, Phys. Rev. Lett. **90**, 056805 (2003).
- [18] Ying Zhang and S. Das Sarma, Phys. Rev. Lett. **95**, 256603 (2005).
- [19] Medini Padmanabhan, T. Gokmen, N. C. Bishop, and M. Shayegan, Phys. Rev. Lett. **101**, 026402 (2008).
- [20] *Semiconductor Spintronics and Quantum Computation*, edited by D. D. Awschalom, D. Loss, and N. Samarth (Springer, Berlin, 2002).
- [21] I. Zutic, J. Fabian, and S. Das Sarma, Rev. Mod. Phys. **76**, 323 (2004).
- [22] E. I. Rashba, Sov. Phys. Solid State **2**, 1109 (1960). Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, JETP Lett. **39**, 78 (1984); J. Phys. C **17**, 6039 (1984).
- [23] R. Winkler, *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems* (Springer, Berlin, 2003).
- [24] M. S. C. Luo, S. L. Chuang, S. Schmitt-Rink, and A. Pinczuk, Phys. Rev. B **48**, 11086 (1993).

-
- [25] M. W. C. Dharma-wardana and François Perrot, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 136601 (2003).
- [26] L. O. Juri and P. I. Tamborenea, *Eur. Phys. J. B* **45**, 9 (2005).
- [27] A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill, Boston, 1971).
- [28] E. Tutuc, S. Melinte, E. P. De Poortere, M. Shayegan and R. Winkler, *Phys. Rev. B* **67**, 241309(R) (2003).
- [29] A. K. Rajagopal and J. C. Kimball, *Phys. Rev. B* **15**, 2819 (1977).
- [30] Y.-R. Jang and B. I. Min, *Phys. Rev. B* **48**, 1914 (1993).
- [31] A. Krakovsky and J. K. Percus, *Phys. Rev. B* **53**, 7352 (1996).
- [32] T. Gokmen, Medini Padmanabhan, and M. Shayegan, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 146405 (2008).
- [33] F. Perez, *Phys. Rev. B* **79**, 045306 (2009).
- [34] T. Gokmen, Medini Padmanabhan, K. Vakili, E. Tutuc, and M. Shayegan, *Phys. Rev. B* **79**, 195311 (2009).
- [35] S. A. Vitkalov, H. Zheng, K. M. Mertes, M. P. Sarachik, and T. M. Klapwijk, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 086401 (2001).
- [36] V. M. Pudalov, M. E. Gershenson, H. Kojima, N. Butch, E. M. Dizhur, G. Brunthaler, A. Prinz, and G. Bauer, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 196404 (2002).
- [37] E. Tutuc, S. Melinte, and M. Shayegan, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 036805 (2002).
- [38] A. A. Shashkin, Maryam Rahimi, S. Anissimova, S. V. Kravchenko, V. T. Dolgoplov, and T. M. Klapwijk, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 046403 (2003).

-
- [39] Y. -W. Tan, J. Zhu, H. L. Stormer, L. N. Pfeiffer, K. W. Baldwin, and K. W. West, Phys. Rev. Lett. **94**, 016405 (2005).
- [40] A. Ghosh, C. J. B. Ford, M. Pepper, H. E. Beere, and D. A. Ritchie, Phys. Rev. Lett. **92**, 116601 (2004).
- [41] E. I. Rashba, Phys. Rev. B **68**, 241315(R) (2003).
- [42] E. K. U. Gross, E. Runge, and O. Heinonen, *Many-Particle Theory* (Hilger, Bristol, 1991).
- [43] I. Ia. Pomeranchuk, Sov. Phys. JETP **35**, 524 (1958).
- [44] J. Quintanilla and A. J. Schofield, Phys. Rev. B **74**, 115126 (2006).
- [45] J. Quintanilla, C. Hooley, B. J. Powell, A. J. Schofield and M. Haque, Physica B **403**, 1279 (2008).
- [46] J. Quintanilla (private communication).
- [47] L. O. Juri and P. I. Tamborenea, Phys. Rev. B **77**, 233310 (2008).
- [48] L. S. Gradshteyn and L. M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and Products* (Academic Press, San Diego, 2000).
- [49] F. G. Tricomi, *Integral Equations* (Dover, New York, 1985).
- [50] M. A. Krasnosel'skii, *Topological Methods in the Theory of Nonlinear Integral Equations* (Pergamon, 1964).
- [51] P. S. Urysohn, Mat. Sb. **31**, 236 (1923).
- [52] A. Hammerstein, Acta Math. **54**, 117 (1930).
- [53] K. E. Atkinson, Journal of Integral Equations and Applications, **4**, 15 (1992).

-
- [54] Luego de haber enviado a publicar el manuscrito correspondiente a esta parte de la tesis, tomamos conocimiento de la existencia de un trabajo con resultados similares a los nuestros en S. Chesi, G. Simion, and G. F. Giuliani, arXiv:cond-mat/0702060 (unpublished).
- [55] P. Pfeffer and W. Zawadzki, Phys. Rev. B **52**, 14332 (1995).
- [56] G. Lommer, F. Malcher and U. Rössler, Phys. Rev. B **32**, 6965 (1985).
- [57] R. Lassnig, Phys. Rev. B **31**, 8076 (1985).
- [58] G. Lommer, F. Malcher and U. Rössler, Phys. Rev. Lett. **60**, 728 (1988).
- [59] P. Pfeffer, Phys. Rev. B **55**(12), R7935 (1997).
- [60] P. Pfeffer and W. Zawadzki, Phys. Rev. B **59**, R5312 (1999).
- [61] G. H. Chen and M. E. Raikh, Phys. Rev. B **60**, 4826 (1999).
- [62] S. J. Papadakis, E. P. De Poortere, H. C. Manoharan, M. Shayegan and R. Winkler, Science **283**, 2056 (1999).
- [63] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë, *Quantum Mechanics* (John Wiley, New York, 1997).
- [64] George B. Arfken and Hans J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists* (Academic Press, San Diego, 1995).