

Universidad Nacional Autónoma de México

00382 4 L

ELECTRONES DE BLOCH Y EFECTO HALL CUÁNTICO

T E S I S QUE PARA OBTENER EL GRADO DE DOCTOR EN CIENCIAS (FISICA) PRESENTA EL MAESTRO EN CIENCIAS

ALEJANDRO KUNOLD BELLO

TUTOR MANUEL TORRES PRINCIPAL LABANSAT

Rocío Jáuregui Comité Renaud Tutoral Gerardo García Naumis



México D.F.

MAYO, 2003



posgrado en ciencias físicas u n a m



Universidad Nacional Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

PAGINACIÓN DISCONTINUA

A Fernanda y Mateo

T

Agradecimientos

A las siguientes personas e instituciones:

- A mis padres Yuyo y Jaime.
- A Manuel Torres quien dirigió paciente y comprensivamente la realización de este trabajo, ayudando a salvar de manera inteligente y atinada los obstáculos que se presentaron.
- A Rocío Jáuregui y Gerardo García por las asesorías como miembros del Comité Tutoral y por la lectura de la tesis y sus valiosos comentarios como miembros del Jurado.
- A los miembros del Jurado Eleuterio Castaño, Arkady A. Krokhin, Gastón García y Chumin Wang Chen por la lectura de la tesis y sus valiosos comentarios.
- A José Luis Cardoso y Pedro Pereyra por las discusiones y valiosos comentarios.
- A José Luis Mateos por sus valiosos comentarios y asesoría.
- A Jaime Grabinsky por la cuidadosa lectura y crítica del manuscrito.
- A Carlos Bunge, Cesar Terrero y Hector Vucetich por las asesorías en cómputo.
- A mis maestros Alejandro Ayala, Rafael A. Barrio, Gerardo Carmona, Juan Carlos D'Olivo, Jaime Grabinsky, Rocío Jáuregui, Eugenio Ley-Koo, Manuel Lozano, Myriam Mondragon, Lukas Nellen, Pedro Pereyra y Manuel Torres.
- A Yanalté Herrero y Luisa E. Tinoco.
- A Ma. Luisa Araujo, Lizette Ramírez y Martha Tinoco.
- A Pilar Gonzáles y Georgina Moreno.
- A Conacyt por el apoyo económico prestado durante la realización de la tesis.



- A la División de Ciencias Básicas e Ingeniería y al Departamento de Ciencias Básicas de la UAM-A, por el apoyo económico.
- Al Instituto de Física de la UNAM por el apoyo económico y hospitalidad.

DE ORI

Resumen

El propósito de este trabajo es estudiar el efecto Hall Cuántico a través de sus simetrías y aspectos topológicos. Consideramos el modelo que consiste de un electrón en un potencial periódico bidimensional sujeto a campos eléctrico y magnético uniformes. El campo magnético se encuentra en dirección perpendicular al plano y el campo eléctrico es paralelo al mismo. Denominamos a éste el problema eléctrico magnético de Bloch bidimensional (EMB).

Se estudian las simetrías del problema EMB, entre ellas las traslaciones eléctrico-magnéticas. Aplicando condiciones de conmensurabilidad, racionalidad del flujo magnético y de la dirección del campo eléctrico, se obtiene un conjunto completo de simetrías que conmutan entre si y la base de funciones de Bloch-Floquet.

Por medio de una representación matricial del problema EMB que generaliza a la ecuación de Harper incluyendo los efectos del campo eléctrico y el acoplamiento entre niveles de Landau, se obtiene el espectro del electrón.

El problema EMB presenta interesantes fenómenos de localización y difusión que son de gran interés en el estudio experimental de la mecánica cuántica de sistemas clásicamente caóticos. Por medio de la evolución de un paquete de ondas se estudian algunos de estos fenómenos.

Utilizando los formalismos de segunda cuantización y dinámica semiclásica se calcula la conductividad de Hall que es expresada como un invariante topológico entero e independiente de la intensidad del campo eléctrico. Los valores obtenidos corresponden con algunos resultados experimentales en redes artificiales de puntos cuánticos. VI

.



Abstract

The object of the present work is to study the quantum Hall effect through its symmetries and topological aspects. We consider the model of an electron moving in a two-dimensional lattice in the presence of applied in-plain electric field and perpendicular magnetic field. We refer to this as the two dimensional electric-magnetic Bloch problem (EMB).

The electric-magnetic translation operators are studied along with other symmetries of the EMB problem. Applying conditions of commensurability, i.e. rationality of the magnetic flux and of the direction of the electric field, we obtain a complete set of self commuting symmetries and the base of Bloch-Floquet wave functions.

The spectrum of the electron is calculated from a matrix representation of the EMB problem which generalizes the Harper equation by including the effects of the electric field and the coupling between Landau levels.

The EMB problem leads to interesting localization and diffusion phenomena that are of great interest to the experimental study of the quantum mechanics of classically chaotic systems. By means of the evolution of a wave packet some of this phenomena are investigated.

Through second quantization and semi-classical dynamics the Hall conductivity is shown to be an integer topological invariant that is independent of the intensity of electric field. The results obtained from numerical calculations correspond to some experimental results on arrays of quantum dots.

VIII Abstract



Índice general

A	gradecimientos	111	
R	esumen	v	
.	Abstract		
1.	Introducción	5	
	1.1. El Efecto Hall	5	
	1.2. Gas Bidimensional de Electrones	8	
	1.3. Oscilaciones de Shubnikov-de Haas y Efecto Hall Cuántico	10	
	1.4. El Problema Eléctrico-Magnético de Bloch	13	
	1.5. Contenido	17	
2.	Simetrías del Problema Eléctrico-Magnético de Bloch	19	
	2.1. Introducción	19	
	2.2. El Problema Eléctrico-Magnético de Bloch	19	
	2.3. Traslaciones Eléctrico-Magnéticas	21	
	2.4. Rotaciones Magnéticas	26	
	2.5. Dilataciones	27	
	2.6. Grupo Magnético de Simetrías	29	
з.	Funciones de Bloch Floquet	33	
	3.1. Introducción	33	
	3.2. Condiciones de Bloch	33	
	3.3. Conjunto de Traslaciones Eléctrico-Magnéticas	36	
	3.4. Estados de Bloch Floquet	40	
4.	Ecuación Generalizada de Harper	45	
	4.1. Introducción	45	
	4.2. Ecuación de Harper Generalizada	46	
	4.3. Diagonalización por Bloques de la Ecuación Generalizada de Harper	50	
	4.4. Espectro en Ausencia de Campo Eléctrico	54	
	4.5. Matriz de Transferencia	59	
	4.6. Rotaciones Magnéticas	60	
	4.7. Función de Green y Densidad de Estados	64	



the second s

ÍNDICE GENERAL

4.8. Fracciones Continuas	68 73 76
 5. Paquetes de Ondas y Fenómenos de Dispersión 5.1. Introducción	79 79 87 87 87 88
6. Conductividad de Hall 6.1. Introducción	91 93 99 103 106
7. Conclusiones	113
A. Unidades	117
B. Electrones de Bloch	121
C. Ecuación de Harper 1 C.1. Definición del Generador de Estados Coherentes de Landau C.2. Reducción a Bloques de la Matriz del Hamiltoniano C.3. Suma de Productos de Funciones de Oscilador Armónico D. Artículo: Bloch Electrons in Electric and Magnetic Fields 1 D.1. Resumen D.2. Abstract	125 125 125 127 127 129 129
D.3. Artículo	129
E. Fórmula de Kubo	135
F. Potencial Vectorial de la Curvatura de Berry	137
G. Teoría Semiclásica G.1. Las Ecuaciones de Movimiento Semiclásicas con Campos Pertur-	139
bativos	139 142



Índice de figuras

1.1.	Esquema de la configuración experimental para medir el efecto	-
	Hall.	5
1.2.	Efecto Hall cuántico entero medido a 50mK en una heteroestruc-	~
	tura de AlGaAs/GaAs.	D
1.3.	Efecto Hall cuántico fraccionario a 85mK en una heteroestructura	-
	$de GaAs/Al_xGa_{1-x}As.$	-
1.4.	Esquema de un MOSFET	8
1.5.	Esquema de bandas de un MOSFET de Silicio.	9
1.6.	Esquema de bandas de una heterojuntura de $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$.	10
1.7.	Arreglo de antipuntos cuánticos.	11
1.8.	Densidad de estados $D(\mathcal{E})$ como función de la energía	14
1.9.	Mariposa de Hofstadter	15
1.10	. Medición de la resistencias de Hall (R_{xy}) y longitudinal (R_{xx}) en	
	una red de antipuntos cuánticos.	16
~ -		
2.1.	Rotación conmensurable	28
3.1.	Dirección conmensurable del campo eléctrico	34
	-	
4.1.	Mariposa de Hofstadter	53
4.2.	Estructura de bandas en la mariposa de Hofstadter	55
4.3.	Espectro de energías como función de σ para diferentes valores	
	del acoplamiento entre los niveles de Landau	56
4.4.	Espectro de la mariposa de Hofstadter para $K = 1, \ldots, \ldots$	57
4.5.	Rotación conmensurable	61
4.6.	Función de Green como función de la energía en la proximidad	
	de un polo simple	66
4.7.	Espectro ε del primer nivel de Landau como función del inverso	
	del flujo magnético σ en presencia del campo eléctrico	67
4.8.	Estructura de bandas en presencia de campo eléctrico como fun-	
	ción de σ y ρ	70
4.9.	Densidad de estados en presencia de campo eléctrico para $\sigma = 5/2$.	71
4.10.	Energía como función de k_2 para $\sigma = q/5$	75

TESIS CON FALLA DE ORIGEN

ÍNDICE DE FIGURAS

5.1.	Densidad de probabilidad de algunas de las funciones de onda de	
	la base $\psi_{\mu,\nu}(x,y)$.	80
5.2.	Fenómenos de localización debidos a la irracionalidad de σ	81
5.3.	Localización para $\sigma = \gamma_{\mu}$.	82
5.4.	Direcciones de mayor y menor modulación del potencial periódico.	83
5.5.	Espectro como función del acoplamiento entre los niveles de Lan-	
	dau	84
5.6.	Localización por cruzamiento frustrado de bandas.	85
5.7.	Espectro de los dos primeros niveles de Landau como función del	
	pseudomomentos k_2	86
5.8.	Localización dinámica.	89
5.9.	Dispersión media a lo largo de los ejes x y y como función del	
	tiempo	90
6.1.	Cruzamiento de bandas y curvatura de Berry	100
6.2.	Cambio de la fase de la función de onda integrada sobre el con-	
	torno de una celda magnética unitaria	104
6.3.	Curvatura de Berry de los primeros tres niveles de Landau	107
6.4.	Brechas del espectro de la mariposa de Hofstadter caracterizadas	
	por la conductividad ζ_{α}	109
6.5.	Variación de la conductividad de Hall ζ_{α} como función de la	
	energía de Fermi ε_F	111
6.6.	Densidad de estados como función del acoplamiento entre los ni-	
	veles de Landau K	112
B 1	Estructura de handas del espectre de un electrón de Bloch	100
D.1.	Estructura de bandas del espectro de un electron de Bloch.	199
D.2.	Estructura de Dandas del espectro de un electron de Dioch	43





Capítulo 1

Introducción

1.1. El Efecto Hall

El efecto Hall cuántico (EHC), descubierto por Klitzing, Dorda y Pepper en 1980 [1] y el efecto Hall fraccionario, encontrado en 1982 por Tsui, Störmer y Gossard [2] han sido campos de estudio muy activos en la física de la materia condensada por más de dos décadas.

La configuración experimental para estudiar el efecto Hall, ya sea clásico o cuántico, es esencialmente la misma en cuanto a la disposición de los campos eléctrico y magnético aplicados, así como los contactos requeridos para medir voltajes y corrientes. Esta configuración se muestra en la figura 1.1. Una película de un material conductor o semiconductor lleva una corriente I_L debido a la aplicación de un campo eléctrico E que establece una carda de potencial V_L a lo largo de la muestra. La aplicación de un campo magnético B perpendicular a la muestra produce una fuerza de Lorentz que desvía a los electrones y huecos lateralmente dando lugar a la acumulación de cargas de signos pouestos en la



Figura 1.1: Esquema de la configuración experimental para medir el efecto Hall.



Introducción



Figura 1.2: Efecto Hall cuántico entero medido a 50mK en una heteroestructura de AlGaAs/GaAs [3]. (a) La Resistencia de Hall R_H como función del campo magnético B presenta escalones en h/ie^2 donde i es un número entero. (b) La magnetoresistencia R_L prácticamente se cancela en las mismas regiones donde se presentan las mesetas de R_H .

dirección transversal. El gradiente de densidad de carga, a su vez, genera un campo eléctrico que contrarresta a la fuerza de Lorentz. Así se establece una diferencia de potencial V_{H} , llamado potencial de Hall.

El efecto Hall clásico puede entenderse en términos de estas consideraciones. La resistencia de Hall clásica R_H , definida como el cociente de la diferencia de potencial de Hall y la corriente depende linealmente del campo magnético

$$R_H = \frac{V_H}{I_L} = \frac{B}{n_0 e} \tag{1.1}$$

donde e es la carga del electrón y n_0 es la densidad superficial de portadores. La relación lineal entre la resistencia de Hall y el campo magnético fue probada experimentalmente en el siglo XIX.

La medición de la resistencia de Hall ha sido utilizada ampliamente en la determinación de algunas de las propiedades electrónicas de los materiales, por ejemplo la densidad de portadores.

La cuantización del efecto Hall (ver figura 1.2) ocurre en sistemas bidimensionales de electrones a muy bajas temperaturas e intensos campos magnéticos. Bajo estas condiciones, la conductividad de Hall como función del campo magnético presenta mesetas en los múltiplos enteros de e^2/h . Por otro lado, la resistencia presenta escalones en $R_H = h/ie^2$ donde *i* es un número entero.





Figura 1.3: Efecto Hall cuántico fraccionario a 85mK en una heteroestructura de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ [7]. La magnetoresistencia R_L y la Resistencia de Hall R_H se presentan como funciones del campo magnético. Para la resistencia de Hall pueden observarse escalones en valores fraccionarios de h/e^2 y para R_L se observar ceros coincidentes con dichos escalones.

Cada una de estas mesetas coincide con un mínimo en la magnetoresistencia

$$R_L = \frac{V_L}{I_L}.$$
 (1.2)

La cantidad $R_K = h/e^2$ ha sido adoptada como una constante universal, conocida como constante de von Klitzing, debido a la precisión de la cuantización que es independiente de factores geométricos de la muestra y de la presencia de impurezas. Es conocida con una precisión de al menos 1 en 10⁷ [4] y actualmente se acepta el valor $R_K = 25812.807\Omega$ [5]. Las mediciones del EHC se utilizan también para determinar con alta precisión la constante de estructura fina $\alpha^{-1} = 4\pi\epsilon_0 \hbar c/e^2$; considerando que la velocidad de la luz c y la constante magnética μ_0 son conocidas de manera exacta, se obtiene un valor para $\alpha^{-1} = 137.035991 \pm 0.000008$ [1, 6].

El efecto Hall cuántico ha sido observado en sistemas muy diversos. En las mediciones de EHC von Klitzing empleó un transistor de efecto de campo (MOSFET) de Si/SiO_2 con movilidades entre 3 y $5m^2/Vs$. Por otra parte, Tsui, Störmer y Gossard [2] hicieron sus mediciones en heteroestructuras de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ con mayores movilidades (entre 8 y $10m^2/Vs$ [2, 3]) y con campos magnéticos más intensos, lo que les permitió observar el EHC fraccionario. La figura 1.3 muestra mediciones típicas del EHC fraccionarios a campos magnéticos muy intensos. Se observa que la resistencia de Hall R_H como función del campo magnético presenta escalones en múltiplos fraccionarios de h/e^2 y la magnetoresistencia muestra fuertes modulaciones cuyos mínimos coinciden con las mesetas de R_H [8]. En cada escalón de R_H se observa que la resistencia





Figura 1.4: Esquema de un MOSFET. Se utiliza SiO_2 como compuerta dieléctrica. La aplicación de un voltaje V_G permite modificar la cantidad de niveles ligados en la interfase $Si - SiO_2$ y también la densidad del gas bidimensional de electrones

longitudinal prácticamente se cancela, los voltajes correspondientes pueden ser menores a $10^{-14}V$.

Los mecanismos responsables del EHC entero y fraccionario son completamente diferentes a pesar de la aparente similitud entre los resultados experimentales. En el primer caso el papel de los electrones independientes es decisivo mientras, que el segundo sólo puede ser entendido a través de la interacción electrón-electrón que da lugar a fenómenos colectivos.

1.2. Gas Bidimensional de Electrones

El ímpetu en el estudio del efecto Hall cuántico, de sistemas bidimensionales casi ideales de electrones. Estos sistemas pueden lograrse por medio del confinamiento de electrones en pozos cuánticos muy delgados.

El EHC es comúnmente observado en un MOSFET como el que se muestra en la figura 1.4 [9]. Estos sistemas consisten de un semiconductor (Si) dopado positivamente, una película aislante (SiO_2) y un electrodo metálico. Al aplicarse un voltaje de compuerta V_G entre el metal y la interfase semiconductor-aislante, las bandas de valencia y conducción del Si se doblan. A medida que la banda de conducción se curva por debajo de la energía de Fermi, se forma un potencial atractivo para los electrones en la interfase entre el semiconductor y el aislante. Este pozo de potencial posee niveles ligados ε_j para los electrones de la banda de conducción (ver la figura 1.5). Si V_G es suficientemente intenso, los electrones se acumulan en el pozo de potencial formando un gas bidimensional de electrones en la interfase $Si - SiO_2$. La ventaja de este dispositivo es que permite variar la cantidad de electrones en el pozo.





Figura 1.5: Esquema de bandas de un MOSFET de Silicio. El Si, dopado positivamente tiene niveles aceptores en \mathcal{E}_A . El potencial de compuerta V_G dobla la banda de conducción hasta que queda por debajo de la energía de Fermi en la interfase $Si - SiO_2$. En esta región los electrones de la banda de conducción pueden ocupar los niveles ligados ε_j formando un gas bidimensional.

Otra forma común de crear una capa bidimensional de electrones es utilizar heterouniones de materiales que tienen diferentes anchos de brecha energética. Algunas heterouniones se crecen alternado capas de AsGa dopado a diferentes concentraciones de Al [10] o In [11]. La más utilizada es la de n - GaAs/p - $Al_xGa_{1-x}As$. Los parámetros de red de ambas aleaciones son prácticamente idénticos por lo que se consiguen uniones con altas calidades cristalinas. La brecha del GaAs es más ancha que la del $Al_xGa_{1-x}As$ por lo que al variar la concentración x de Al, la estructura de bandas puede ser ajustada entre la del GaAs y la del Als. En la figura 1.6 puede verse que en la vecindad de la unión las estructuras de bandas de ambas aleaciones, que originalmente difieren en $\mathcal{E}_{g1} - \mathcal{E}_{g2}$ (figura 1.6), se unen paulatinamente. La diferencia entre las brechas se reparte aproximadamente 40% en la banda de valencia y 60% en la

$$\Delta \mathcal{E}_C = \frac{2}{5} \left(\mathcal{E}_{g1} - \mathcal{E}_{g2} \right), \qquad \Delta \mathcal{E}_V = \frac{3}{5} \left(\mathcal{E}_{g1} - \mathcal{E}_{g2} \right), \qquad (1.3)$$

donde $\Delta \mathcal{E}_{\mathcal{C}}$ corresponde a la banda de conducción y $\Delta \mathcal{E}_{V}$ a la de valencia. El doblamiento de las bandas ocurre a lo largo de una distancia de aproximadamente 100Å, mucho mayor que la región de intercambio de cargas en la interfase. En equilibrio térmico, la energía de Fermi \mathcal{E}_{F} tiene el mismo valor en ambos lados de la unión y a bajas temperaturas se encuentra cerca de los niveles aceptores \mathcal{E}_{A} del lado dopado positivamente y de los niveles donores \mathcal{E}_{D} del lado dopado negativamente. El doblamiento de las bandas en la región de transición tiene el efecto de colocar electrones en los niveles aceptores del semiconductor tipo n. Esto da lugar al espacio de carga en el que una zona de estados ionizados fijos en el espacio forman una doble capa a lo largo de la unión. La polarización de carga produce una diferencia de potencial eléctrico que dobla las bandas formando



Introducción



Figura 1.6: Esquema de bandas de una heterojuntura de $Al_x Ga_{1-x} As/GaAs$. El GaAs, dopado positivamente tiene niveles aceptores en \mathcal{E}_A y el $Al_x Ga_{1-x} As$ tiene niveles donores en \mathcal{E}_D que se encuentran muy próximos a la energía de Fermi \mathcal{E}_F . Las bandas de ambas aleaciones empatan en una longitud de aproximadamente 100Å. El $Al_x Ga_{1-x} As$ tiene una brecha \mathcal{E}_{g1} mayor que el del GaAsdado por \mathcal{E}_{g2} . $\Delta \mathcal{E}_V$ y $\Delta \mathcal{E}_C$ son las discontinuidades de la banda de valencia y de conducción respectivamente.

un pozo cuántico cerca de la unión. Los electrones en la superficie de Fermi quedan atrapados en los niveles ligados ε_j del pozo cuántico, formando un gas bidimensional en la localidad de la unión [12].

Las interfases de AsGa han permitido la fabricación de redes artificiales de antipuntos cuánticos. Actualmente existen varias técnicas para fabricarlas. La más común es la litografía con haces de iones [13] o electrones [14, 15]. Un método más reciente para construir una red de antipuntos cuánticos, como la que se muestra en la figura 1.7, es la litografía de microscopio de fuerza atómica (MFA)[13]. La superficie de $Al_xGa_{1-x}As$ cubierta de agua, es oxidada localmente aplicando un voltaje a través de la punta de un MFA. Las regiones oxidadas funcionan como un material aislante por lo que los electrones experimentan un potencial repulsivo al encontrarse en su vecindad. De esta manera se consiguen potenciales periódicos con grandes parámetros de red (300nm) y altas movilidades (80m²/Vs).

1.3. Oscilaciones de Shubnikov-de Haas y Efecto Hall Cuántico

En esta sección y en la próxima presentaremos algunos elementos que se utilizan en la descripción de la dinámica de electrones en sistemas bidimensionales cristalinos y en presencia de campos magnéticos.

En la aproximación de masa efectiva, los eigenvalores de la energía para un





Figura 1.7: Arreglo de antipuntos cuánticos en una heteroestructura de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$. La superficie mojada de GaAs es oxidada por medio la aplicación de un voltaje entre la punta de un MFA y la heteroestructura. (a) El arreglo de antipuntos cuánticos funciona como un cristal artificial de $60\mu m$ y 20 × 20 puntos de red. (b) El parámetro de red es de aproximadamente 300nm.

electrón restringido a un plano son

$$\mathcal{E}_{j}(k_{x},k_{y}) = \frac{\hbar^{2}}{2m^{*}}k_{x}^{2} + \frac{\hbar^{2}}{2m^{*}}k_{y}^{2} + \varepsilon_{j}, \qquad j = 1, 2, \dots$$
(1.4)

donde $k_x y k_y$ son las componentes del vector de onda del electrón, m^* es la masa efectiva en el plano de movimiento libre y ε_j son los niveles ligados de energía asociados al confinamiento en la dirección z.

Si se aplica un campo magnético intenso B a lo largo del eje z el electrón es forzado a adoptar órbitas de ciclotrón cuya frecuencia está dada por

$$\omega_c = \frac{eB}{m^*}.$$
 (1.5)

Así, el campo magnético produce una cuantización adicional del espectro de energía

$$\mathcal{E}_{\nu,j} = \left(\nu + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c + \varepsilon_j, \qquad \nu, j = 0, 1, 2, \dots \qquad (1.6)$$

A temperaturas y densidades electrónicas bajas, sólo la banda inferior (ε_0) se encuentra ocupada, por lo cual el espectro queda completamente descrito por el primer término de la Ec. (1.6). Los niveles de energía obtenidos son llamados niveles de Landau.

Los niveles de Landau son altamente degenerados y uno solo de ellos puede contener un gran número de electrones. En una muestra típica, el número de estados n_e en cada nivel de Landau es igual al número de fluxones magnéticos



 $\phi_0 = h/e$ que atraviesan la superficie S de la muestra

$$n_e = \frac{SB}{\phi_0}.\tag{1.7}$$

Un nivel de Landau está lleno cuando cada uno de sus estados degenerados se encuentra ocupado por un electrón. El número de niveles de Landau que se encuentran llenos se llama factor de llenado ν_Z y es un número racional. Si \mathcal{N} es el número total de electrones, el factor de llenado está dado por

$$\nu_L = \frac{\mathcal{N}}{n_e} = n_0 \frac{\phi_0}{B}.$$
 (1.8)

El factor de llenado puede entonces ser considerado como el número de electrones de conducción por unidad de fluxón ϕ_0 . Combinando las Ecs. (1.1) y (1.8) se obtiene para la resistencia de Hall

$$R_{H} = \frac{1}{\nu_{L}} \frac{h}{e^{2}},\tag{1.9}$$

lo cual muestra que si la densidad de electrones y el campo magnético se ajustan de tal manera que ν_L sea entero, los valores observados para el EHC entero se explican por la Ec. (1.9). Todos los niveles de Landau del gas bidimensional de electrones ideal transportan la misma cantidad de corriente de Hall (ver sección 6.1). Por lo tanto, una vez que la energía de Fermi se encuentra entre dos niveles de Landau ya sea por la variación de $n_0 \circ B$, la conductividad de Hall permanece constante. Esto explica la observación experimental de los escalones en la conductividad como función de la densidad de portadores [1] o del campo magnético [2].

El EHC presenta una situación muy especial, la conductividad σ_{xx} , que describe a la densidad de corriente J a lo largo del campo eléctrico y la resistividad ρ_{xx} , que define al campo eléctrico a lo largo de la densidad de corriente, se anulan simultáneamente. La corriente y el campo eléctrico están relacionados por

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{E}, \qquad \boldsymbol{E} = \boldsymbol{\rho} \cdot \boldsymbol{J}, \qquad (1.10)$$

donde σ es el tensor de conductividad y ρ el de resistividad. Se definen como

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ -\sigma_{xy} & \sigma_{xz} \end{pmatrix}, \qquad \rho = \begin{pmatrix} \rho_{xx} & \rho_{xy} \\ -\rho_{xy} & \rho_{xx} \end{pmatrix}.$$
(1.11)

La resistencia de Hall está relacionada con el tensor de resistividad por $R_H = -\rho_{xy}$. El tensor de resistividad es el inverso del tensor de conductividad

$$\rho = \sigma^{-1} = \frac{1}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & -\sigma_{xy} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \end{pmatrix}.$$
 (1.12)

De esta última expresión observamos que $\sigma_{xx} = 0$ implica $\rho_{xx} = 0$ siempre y cuando $\sigma_{xy} \neq 0$. La corriente longitudinal depende de la ocupación de electrones



en la vecindad de la energía de Fermi, si la ocupación en \mathcal{E}_F es nula la corriente longitudinal también lo será. Entonces, si el nivel de Fermi se encuentra en la brecha entre dos niveles de Landau la conductividad y la resistividad longitudinal se anulan. Por el contrario, cuando \mathcal{E}_F coincide con un nivel de Landau, R_L toma un valor finito. De esta forma, en la magnetoresistencia se deben observar oscilaciones al variar el campo magnético. Estas son las oscilaciones de Shubnikov-de Haas.

Sin embargo, los sistemas reales son más complicados. La presencia de impurezas e imperfecciones, la interacción de los electrones con los fonones de la red y otros factores rompen la degeneración de los niveles de Landau. La densidad de estados formada por funciones δ centradas en las energías $\hbar\omega_c$ (n + 1/2) es reemplazada por bandas centradas en cada nivel de Landau como se muestra en la figura 1.8. Los centros de estas bandas contienen estados extendidos que se propagan a lo largo de la muestra, mientras que los extremos poseen estados ligados debidos al efecto localizador de las impurezas [16, 17]. El centro de las bandas se llama brecha de movilidad y los extremos bordes de movilidad [18]. Sólo los electrones que ocupan los niveles de la brecha de movilidad contribuyen a la corriente. Así, la configuración de la densidad de niveles se comporta en forma similar a la de los niveles de Landau puros.

Cabe señalar que también la dispersión debida al potencial periódico de la red desdobla la degeneración de los niveles de Landau dando lugar a sub-bandas. El estudio de la dinámica de electrones en presencia simultánea de un campo magnético y de potenciales periódicos ha tenido una larga historia y recibe el nombre de problema de Bloch Magnético (BM). Ha servido en particular para el desarrollo de la explicación topológica del efecto Hall cuántico entero, iniciada con el trabajo de Thouless, Kohmoto, Nightingale y Nijs [19]

1.4. El Problema Eléctrico-Magnético de Bloch

El problema de Bloch Magnético (BM) consiste de un electrón restringido a moverse en un plano en el que existe un potencial periódico y, perpendicular a éste, un campo magnético. La prescripción de Peierls [20] indica que se puede obtener un hamiltoniano aproximado reemplazando la energía particular de una banda $\mathcal{E}(\mathbf{k})$ por $\mathcal{E}(\mathbf{\kappa})$ donde κ es un operador cuyas componentes satisfacen

$$[\kappa_x, \kappa_y] = i \frac{e}{\hbar} B. \tag{1.13}$$

Esto es equivalente a reemplazar la ecuación de Schrödinger en ausencia de campo magnético por una en la que el índice de Bloch k es sustituida por el operador $(p - eA)/\hbar$ en la relación de dispersión. Sin embargo, la sustitución propuesta por Peierls no da información respecto al error introducido. Asumiendo esta aproximación en el modelo de amarre fuerte para un electrón, Harper derivó la ecuación que ahora lleva su nombre [21]

$$\psi_{m-1} + 2\cos\left(2\pi\phi m\right)\psi_m + \psi_{m+1} = \varepsilon\psi_m. \tag{1.14}$$





Figura 1.8: Densidad de estados $D(\mathcal{E})$ como función de la energía. Para un gas ideal de electrones, la densidad de niveles es un conjunto de deltas localizadas en las energías de Landau: $\hbar\omega_c (n + 1/2)$. En presencia de impurezas, los niveles de Landau se ensanchan dando lugar a bandas. Los estados en la vecindad de las energías de de Landau forman la brecha de movilidad, ya que los correspondientes estado son extendidos. Los estados en los bordes son localizados.

En esta ecuación ϕ es el flujo magnético en una celda unitaria en unidades de fluxón magnético ϕ_0 .

Una contribución importante para el estudio de las simetrías del problema fue hecha por Zak [22], quien encontró las representaciones del grupo de traslaciones magnéticas que resulta de notable importancia en el análisis de múltiples aspectos relacionados con el problema de Bloch magnético [23, 24].

Rauh [25] obtuvo, en el límite de campo magnético intenso, una ecuación dual a la de Harper, es decir, con una estructura idéntica a (1.14), pero con el fujo magnético reemplazado por su inverso y la energía reescalada por un factor dependiente del flujo magnético. El espectro que se obtiene para esta ecuación como función de ϕ , ya sea en la aproximación de amarre fuerte o de campo magnético intenso, se conoce como mariposa de Hofstadter y tiene la estructura que se muestra en la figura 1.9. En la sección 4.4 se estudia el procedimiento empleado para obtener este espectro.

Hofstadter [26, 27] mostró que éste espectro presenta una gran complejidad que incluye varios tipos de escalamiento. Cuando ϕ es un número racional p/q el espectro se compone de q niveles. Dado que en la proximidad de cualquier flujo racional es posible encontrar números irracionales para los que el número de niveles sería infinito, no resulta obvio que la estructura mostrada se mantenga y más aun que pueda ser observada. Hofstadter encontró que para ϕ irracional el espectro de la mariposa adquiere una estructura homeomórfica al conjunto





Figura 1.9: Mariposa de Hofstadter. Los puntos indican los eigenvalores de la energía como función del flujo magnético por unidad de celda por unidad de fluxón magnético ϕ_0 .

de Cantor [27]; es decir corresponde a un conjunto infinito no numerable pero de medida cero. Lo anterior explica porqué, aun cuando se agrega el efecto de valores irracionales de ϕ , los niveles se organizan de acuerdo a patrones bien definidos como los observados en la figura 1.9. Es interesante observar que la estructura fractal del espectro de Hofstadter resulta de la competencia del campo magnético, que por si sólo produciría estados discretos, con el efecto de la red periódica, que en ausencia de campo magnético daría lugar a bandas continuas.

El espectro de la mariposa de Hofstadter ha sido observado experimentalmente en arreglos de dispersores resonantes dentro de guías de microondas [28] y ondas acústicas [29]. Las ecuaciones que describen a tales sistemas son similares a la de Harper.

Sin embargo, no resulta fácil observar el espectro de la mariposa en sistemas bidimensionales de electrones. Para ello se requieren valores de ϕ/ϕ_0 del orden de la unidad, pero aun para los campos magnéticos más intensos que se producen en el laboratorio, ϕ resulta ser sumamente pequeño debido a los diminutos parámetros de red que poseen los cristales naturales. No obstante, es posible encontrar evidencia del espectro de la mariposa en heteroestructuras laterales de alta calidad [30] y en redes artificiales de antipuntos cuánticos [15]. En este último experimento, von Klitzing y sus colaboradores, por medio de un haz de iones que incide sobre una heteroestructura de GaAs, consiguieron trazar un potencial periódico artificial que posee parámetros de red del orden de 120nm. En estos sistemas la evidencia del espectro de la maripoea se puede obtener,

Introducción



Figura 1.10: Medición de la resistencias de Hall (R_{xy}) y longitudinal (R_{xx}) en una red de antipuntos cuánticos con un parámetro de red de 120nm (tomado de [15]). (a) Resistencia longitudinal y resistencia inversa de Hall $(1/R_{xy})$. Los valores enteros del inverso de la resistencia de Hall están marcados por medio de lineas punteadas horizontales. (b) Comportamientos de la conductancia de Hall como función de la energía. Cuando el inverso del flujo magnético por celda en unidades de $\phi_0 < 0.5$ la serie de valores que se obtienen para la conductividad de Hall son 0 y 1. En el caso en el que $\phi_0 > 0.5$ la serie de valores que se obtienen para la conductividad de Hall son 0, 1, 0 y 1.

aunque de forma indirecta y limitada, a través del análisis de la conductividad de Hall.

La idea de este experimento se origina en el trabajo de Thouless. Kohmoto. Nightingale y den Nijs [19], quienes mostraron, utilizando la teoría de la respuesta lineal de Kubo, que la conductividad de Hall se puede expresar como un invariante topológico que toma valores enteros. Para niveles llenos de Landau la conductividad adquiere valores que son múltiplos de e^2/h , y a medida que se incrementa la energía de Fermi presenta una variación monótona ascendente, de manera similar a lo observado en la figura 1.2. Es razonable esperar que las sub-bandas de un nivel de Landau contribuyan a la conductividad con una fracción del valor total e^2/h . Sin embargo, resulta notable que cada una de las sub-bandas contribuye con un múltiplo entero de e^2/h y los valores enteros correspondientes no siguen en general una secuencia monótona. Así por ejemplo, para $\phi/\phi_0 = 3$ un nivel de Landau se rompe en tres sub-bandas que contribuyen a la conductividad con valores (en unidades de e^2/h): 0,1,0. Mientras que para $\phi/\phi_0 = 3/2$, también se tienen tres sub-bandas pero con contribuciones a la conductividad que siguen la secuencia: 1,-1,1. Así, en el primer caso se espera que a medida que la energía de Fermi cruce por las tres sub-bandas la conductividad simplemente se incremente de 0 a 1; mientras que en el segundo caso se espera observar una secuencia en la que aumente, disminuya y finalmente vuelva a aumentar. Esto es precisamente el comportamiento observado



1.5 Contenido

por von Klitzing y sus colaboradores [15], tal y como se muestra en la figura 1.10. Otros valores de ϕ pueden seguir secuencias que denotan una estructura de sub-bandas más compleja, sin embargo dichos efectos son muy difíciles de observar experimentalmente.

La mayoría de los trabajos descritos, o bien no consideran el campo eléctrico, o su efecto se incorpora a través de la teoría de la respuesta lineal. En esta tesis mostramos que las ideas desarrolladas por Zak [22] en relación al problema magnético de Bloch y el acercamiento topológico sugerido por Thouless et al. [19] para el cálculo de la conductividad de Hall, se pueden extender para incluir en forma exacta el efecto del campo eléctrico.

Llamamos problema eléctrico-magnético de Bloch (EMB) a aquel en el que el campo eléctrico se incluye en forma exacta. La simetrías del problema EMB combinan las traslaciones espacio-temporales con transformaciones de norma, de tal manera que las traslaciones espaciales y las evoluciones temporales del problema de Bloch se generalizan dando lugar a las traslaciones eléctrico-magnéticas. Dichas simetrías resultan fundamentales para encontrar los eigenvalores de la energía del sistema y los correspondientes eigenvectores. El espectro obtenido para el problema EMB es una generalización del espectro de la mariposa de Hofstadter. El formalismo desarrollado sirve para analizar algunas propiedades de localización electrónica. Además, permite extender los resultados de Thouless *et al.* relacionados con la interpretación topológica de la conductividad de Hall. Debido a que el método no se restringe a la teoría de la respuesta lineal, es posible calcular correcciones no-lineales para la conductividad de Hall, y la magnetoresistencia.

1.5. Contenido

En el capítulo 2 se estudian las simetrías del problema EMB, entre ellas las traslaciones eléctrico-magnéticas. Se discute como al agregar las rotaciones, dilataciones y boosts se obtiene el grupo magnético de simetrías.

En el capítulo 3 se discuten las condiciones de conmensurabilidad, que son necesarias para obtener un conjunto completo de simetrías que conmutan entre si a partir de las traslaciones eléctrico-magnéticas. Se introduce el llamado operador de traslación de la energía. Con estos ingredientes se construyen las funciones de Bloch-Floquet y se estudian sus propiedades. En particular se deduce un ecuación efectiva de Schrödinger, en la cual la derivada temporal es sustituida por una derivada direccional del pseudomomento.

En el capítulo 4 se obtiene una ecuación secular que generaliza a la de Harper al incluir los efectos del campo eléctrico y el acoplamiento entre niveles de Landau. Se obtiene un representación matricial explícita para esta ecuación describiéndose los métodos utilizados para obtener resultados numéricos, entre los cuales se incluyen: método de fracciones continuas y solución adiabática. Se discute en detalle el espectro, así como otras propiedades de las soluciones para diversas elecciones de los parámetros relevantes del problema.

En el capítulo 5 se analiza la evolución de un paquete de ondas, así como su



relación con algunas propiedades de localización y difusión.

Con base en los resultados anteriores y utilizando los formalismos de segunda cuantización y dinámica semiclásica, en el capítulo 6 se analiza la conductividad de Hall. Se demuestra que ésta puede expresarse en términos de un invariante topológico, que toma valores enteros. Se presenta un método numérico para calcular dichos enteros y se analizan las secuencias obtenidas.

Finalmente, en el capítulo 7 se presentan las conclusiones de este trabajo.

and the second state and a second state of the

DE ORIGEI

Capítulo 2

Simetrías del Problema Eléctrico-Magnético de Bloch

2.1. Introducción

En el capítulo anterior se explicaron las configuraciones experimentales en las que se puede observar el EHC. Todas ellas consisten de un sistema bidimensional de electrones sometido a la acción de campos magnético y eléctrico y un potencial periódico. Este último puede deberse principalmente a la estructura cristalina natural del material o, a la presencia de una red artificial de antipuntos cuánticos. En algunos de estos sistemas la presencia de impurezas juega un papel muy importante, pero en este trabajo, despreciaremos su efecto.

Por ello se justifica el estudio del sistema formado por un electrón de Bloch en presencia de campos magnético y eléctrico uniformes. Un electrón de Bloch consiste en un electrón que está sometido al efecto de un potencial periódico que, en este caso, se encuentra sobre un plano. El campo magnético uniforme es perpendicular al plano y el campo eléctrico se encuentra contenido en él. Llamamos a éste el problema de Bloch eléctrico-magnético (EMB). En particular, estamos interesados en las simetrías de este problema. En este capítulo se obtienen y estudian las simetrías que posee el problema de Bloch eléctrico-magnético.

2.2. El Problema Eléctrico-Magnético de Bloch

Para el propósito de nuestra investigación consideramos el movimiento de un electrón en un potencial periódico bidimensional, sujeto a un campo magnético uniforme B aplicado perpendicularmente al plano, y a un campo eléctrico constante E paralelo al mismo. La dinámica del electrón puede ser descrita por la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Es posible elegir una norma

> TESIS CON FALLA DE ORIGEN

en la que la ecuación de Schrödinger sea independiente del tiempo, pero, como veremos más adelante los operadores de simetría se vuelven dependientes del tiempo. La ecuación de Schrödinger es entonces

$$S |\psi\rangle = \left[\frac{1}{2} (\Pi_1^2 + \Pi_2^2) + V - \Pi_0\right] |\psi\rangle = 0,$$
 (2.1)

donde los operadores de velocidad [31] están dados por

$$\Pi_{\mu} = p_{\mu} + A_{\mu}, \qquad (2.2)$$

con p_0 y $p_{1(2)}$ los operadores de energía $p_0 = i\partial/\partial t$ y momento $p_1 = -i\partial/\partial x$, $p_2 = -i\partial/\partial y$. Las unidades han sido elegidas de tal manera que $B = \hbar = e = m = 1$. Esto es equivalente a medir energías en unidades de

$$\hbar\omega_c = \frac{\hbar eB}{m},\tag{2.3}$$

donde ω_c es la frecuencia angular de ciclotrón, e y m son la carga y la masa efectiva del electrón y B el módulo del campo magnético. Las longitudes se miden en unidades de la longitud magnética ℓ_0 dada por

$$\ell_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}} \tag{2.4}$$

y, consecuentemente, los momentos se miden en unidades de \hbar/ℓ_0 . En el apéndice A se explica como restaurar las unidades en las cantidades que aparecen a lo largo del texto.

Frecuentemente utilizaremos notación covariante con los vectores espaciotemporales $x_0 = t$, $x_1 = x$ y $x_2 = y$.

La Ec. (2.1) puede ser considerada como una ecuación de eigenvalores para el operador S con eigenvalor 0. Con la finalidad de simplificar la discusión posterior de los operadores de simetría, es conveniente considerar el potencial vectorial A_{μ} en una norma arbitraria. Para ello se introduce un conjunto de parámetros β_0 , β_1 y β_2 asociados a la norma. Los resultados físicos deben ser independientes de estos parámetros. Los potenciales escalar y vectorial quedan dados por

$$A_{0} = \left(\beta_{1} - \frac{1}{2}\right) E_{x}x + \left(\beta_{2} - \frac{1}{2}\right) E_{y}y,$$

$$A_{1} = -\left(\beta_{1} + \frac{1}{2}\right) E_{x}t + \left(\beta_{0} - \frac{1}{2}\right) By,$$

$$A_{2} = -\left(\beta_{2} + \frac{1}{2}\right) E_{y}t + \left(\beta_{0} + \frac{1}{2}\right) Bx$$

$$(2.5)$$

y en forma abreviada se puede escribir como

$$A_{\mu} = A_{\mu\nu} x^{\nu}, \qquad (2.6)$$





donde

$$A_{\mu\nu} = -\begin{pmatrix} 0 & (\beta_1 - \frac{1}{2}) E_x & (\beta_2 - \frac{1}{2}) E_y \\ (\beta_1 + \frac{1}{2}) E_x & 0 & (\beta_0 - \frac{1}{2}) B \\ (\beta_2 + \frac{1}{2}) E_y & (\beta_0 + \frac{1}{2}) B & 0 \end{pmatrix}.$$
 (2.7)

Este potencial produce los campos correctos e independientes de los parámetros β . La parte antisimétrica del tensor $A_{\mu\nu}$ contiene la información de los campos y la simétrica la de la función de norma.

El potencial periódico de la red puede ser representado por una descomposición de Fourier

$$V(x,y) = \sum_{r,s} v_{rs} \exp\left(i\frac{2\pi rx}{a} + i\frac{2\pi sy}{a}\right), \qquad (2.8)$$

sin embargo, por simplicidad en varias ocasiones consideraremos el potencial anisotrópico

$$V(x,y) = U_0\left[\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) + \lambda\cos\left(\frac{2\pi y}{a}\right)\right].$$
 (2.9)

El parámetro λ permite modificar la anisotropía de la red. El caso especial $\lambda = 1$ corresponde a un potencial isotrópico.

2.3. Traslaciones Eléctrico-Magnéticas

A pesar de que las ecuaciones de movimiento clásicas permanecen invariantes ante traslaciones espaciales y evoluciones temporales, la ecuación de Schrödinger se transforma. Esto se debe a que la dinámica cuántica utiliza al potencial vectorial que depende de las coordenadas espaciales y el tiempo. Una traslación o evolución temporal de la forma $x^{\nu} \to x^{\nu} + c^{\nu}$ ocasiona que el potencial vectorial se incremente en una constante $\delta A_{\mu} = A_{\mu\nu}c^{\nu}$ que altera la estructura de la ecuación de Schrödinger (2.1) a través del operador de velocidad. Sin embargo, el cambio en el potencial vectorial puede también ser entendido como una transformación de norma de la forma $A_{\mu} \to A_{\mu} + \partial \Lambda / \partial x^{\mu}$ en la que $\Lambda = A_{\mu\nu}x^{\mu}c^{\nu}$. Esto sugiere que la dinámica cuántica del sistema permanecerá invariante ante la acción combinada de una traslación espacio temporal y una transformación de norma. Basados en esta idea se pueden obtener los correspondientes generadores de simetría.

Es interesante observar que a nivel clásico aparecen constantes de movimiento análogas a las que obtenemos en el caso cuántico. Empezamos por estudiar el problema clásico y consideremos primero un electrón en un plano sujeto a un campo magnético uniforme B perpendicular al plano y a un campo eléctrico constante E sobre el mismo caracterizado por la función lagrangiana siguiente

$$L\left(\boldsymbol{x}, \dot{\boldsymbol{x}}, \dot{\boldsymbol{\Lambda}}\right) = \frac{1}{2}\left(\dot{\boldsymbol{x}}^{2} + \dot{\boldsymbol{y}}^{2}\right) - \boldsymbol{A} \cdot \dot{\boldsymbol{x}} + A_{0} + \dot{\boldsymbol{\Lambda}}, \qquad (2.10)$$

donde A es una función arbitraria que está asociada a la norma elegida para el potencial vectorial. A participa en la función lagrangiana como una derivada total del tiempo por lo que no altera la dinámica del sistema.



Simetrías del Problema Eléctrico-Magnético de Bloch

La función lagrangiana del sistema también puede escribirse en forma covariante como

$$L\left(x^{\mu}, \dot{x}^{\mu}, \dot{\Lambda}\right) = -\frac{1}{2}\dot{x}^{\mu}\dot{x}_{\mu} + \dot{x}^{\mu}x^{\nu}A_{\mu\nu} + \dot{\Lambda}, \qquad (2.11)$$

donde hemos usado la relación $\dot{x}^2 + \dot{y}^2 - 1 = \dot{x}^{\mu} \dot{x}_{\mu}$.

Para obtener las corrientes conservadas de este sistema [32] estudiamos una transformación que deja invariante a la función lagrangiana. Esta consiste de la composición de una traslación espacio temporal uniforme e infinitesimal y una transformación de norma, dadas por

$$x_{\mu} \rightarrow x_{\mu} + \delta x_{\mu}, \qquad \Lambda \rightarrow \Lambda - A_{\mu\nu} x^{\mu} \delta x^{\nu}, \qquad (2.12)$$

donde $\delta x^{\mu} = (\delta t, \delta x, \delta y)$. Utilizando las ecuaciones de movimiento, la variación total de la función lagrangiana se puede escribir como

$$\delta L = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta x + \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} \delta y + \frac{\partial L}{\partial \dot{\Lambda}} \delta \Lambda \right) + \frac{\partial L}{\partial t} \delta t.$$
(2.13)

La derivada con respecto al tiempo en el término de la derecha de la ecuación anterior corresponde a la función de energía $p_t = p_0$ [33]

$$\frac{\partial L}{\partial t} = -\frac{dp_t}{dt},\tag{2.14}$$

donde

$$p_t = \dot{x} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} + \dot{y} \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} + \dot{\Lambda} \frac{\partial L}{\partial \dot{\Lambda}} - L \qquad (2.15)$$

y en este caso particular corresponde a la energía del sistema. Es importante notar que p_t no depende de la norma dado que en los últimos dos términos de la ecuación anterior se cancela toda dependencia de A. Sustituyendo en la variación de la función lagrangiana obtenemos

$$\delta L = \frac{d}{dt} \left(-p_t \delta t + p_x \delta x + p_y \delta y + \delta \Lambda \right)$$
$$= \frac{d}{dt} \left(-p_\mu \delta x^\mu - A_{\nu\mu} x^\nu \delta x^\mu \right) = -\frac{d}{dt} \left(\mathcal{O}_\mu \delta x^\mu \right) \quad (2.16)$$

donde

$$\mathcal{O}_{\mu} = p_{\mu} + A_{\nu\mu} x^{\nu} = p_{\mu} + \tilde{A}_{\mu}. \tag{2.17}$$

Hemos entonces demostrado que la conservación de la cantidad O_{μ} es una consecuencia de la invariancia de la función lagrangiana ante la combinación de una traslación espacio temporal y un cambio de norma de la forma (2.12). Como veremos a continuación estas corrientes conservadas tienen la misma estructura que los generadores de las traslaciones y evoluciones eléctrico-magnéticas EM.

Las corrientes (2.17) también pueden ser deducidas por medio de argumentos cuánticos. Consideramos primero la ecuación de Schrödinger sin potencial periódico

$$-\left[\frac{1}{2}\left(\Pi_{1}^{2}+\Pi_{2}^{2}\right)-\Pi_{0}\right]|\psi\rangle=0.$$
(2.18)



 $\mathbf{22}$

Ante una transformación espacio temporal de la forma

$$e^{-i\delta x^n p_n},\tag{2.19}$$

los operadores de velocidad (2.2) se transforman de la siguiente manera

$$e^{-i\delta x^{n}p_{n}}\Pi_{\mu}e^{i\delta x^{n}p_{n}}=\Pi_{\mu}+A_{\nu\mu}\delta x^{\mu},$$
(2.20)

Por lo cual la ecuación de Schrödinger no permanece invariante, sin embargo, el efecto de las traslaciones y evoluciones puede ser entendido como una transformación de norma. Entonces, agregando una transformación de norma a (2.19) que compense el corrimiento en la Ec. (2.20), obtenemos

$$e^{-i\delta x^{\kappa}(p_{\kappa}+A_{\nu\kappa}x^{\nu})}\Pi_{\mu}e^{i\delta x^{\kappa}(p_{\kappa}+A_{\nu\kappa}x^{\nu})}=\Pi_{\mu}.$$
(2.21)

dando lugar al generador $\mathcal{O}_{\kappa} = p_{\kappa} + A_{\nu\kappa} x^{\nu} = p_{\kappa} + \tilde{A}_{\kappa}$ de las traslaciones EM $T_{\mu} = \exp(i\delta x^{\mu}\mathcal{O}_{\mu})$. Explícitamente, las componentes del potencial \tilde{A}_{μ} son

$$\bar{A}_{0} = \left(\beta_{1} + \frac{1}{2}\right) E_{x}x + \left(\beta_{2} + \frac{1}{2}\right) E_{y}y,$$

$$\bar{A}_{1} = -\left(\beta_{1} - \frac{1}{2}\right) E_{x}t + \left(\beta_{0} + \frac{1}{2}\right) By,$$

$$\bar{A}_{2} = -\left(\beta_{2} - \frac{1}{2}\right) E_{y}t + \left(\beta_{0} - \frac{1}{2}\right) Bx.$$
(2.22)

Comparando los potenciales A_{μ} con \bar{A}_{μ} vemos que el segundo puede considerarse como un potencial para el cual los campos magnéticos y eléctricos se invierten: $B \rightarrow -B$ y $E \rightarrow -E$.

En presencia de un potencial periódico

$$V(x,y) = V(x+a,y) = V(x,y+a), \qquad (2.23)$$

como el de la Ec. (2.9), la invariancia ante traslaciones infinitesimales se pierde. Una traslación arbitraria transforma al potencial de la siguiente manera

$$T_{1}V(x, y) T_{1}^{\dagger} = V(x + \delta x, y) \neq V(x, y),$$

$$T_{2}V(x, y) T_{2}^{\dagger} = V(x, y + \delta y) \neq V(x, y),$$
(2.24)

por lo que los generadores de traslaciones EM dejan de ser simetrías del hamiltoniano a menos que restrinjamos las transformaciones a traslaciones en múltiplos del parámetro de red.

Definimos las traslaciones eléctrico-magnéticas finitas [34] como

$$T_{\mu} = e^{-ic^{\mu}\mathcal{O}_{\mu}}, \qquad (2.25)$$

donde c^1 y c^2 deben ser múltiplos enteros del parámetro de red a y c_0 no ha sido establecido. En la definición (2.25) no se adopta la convención de la suma.

A T_0 también lo denominamos operador de evolución eléctrica ya que además de producir un desplazamiento temporal, introduce una fase $c_0 \tilde{A}_0$ que depende del campo eléctrico. De manera similar, llamamos traslaciones magnéticas a T_1 y T_2 ya que cuando el campo eléctrico es nulo estas se reducen a la combinación de una traslación espacial y un cambio de norma asociado al campo magnético. El concepto de traslación magnética fue inicialmente discutido por Zak [22]; una extensión para incluir el efecto del campo eléctrico fue presentado por Ashby y Miller [34]. Sin embargo, en este último trabajo los generadores de simetrías mezclan los efectos de las traslaciones espaciales con las temporales. Para nuestros propósitos es conveniente, en cambio, separar por un lado el operador de evolución eléctrica T_0 y por otro el de las traslaciones T_1 y T_2 . Esto probará ser essencial para poder resolver la ecuación de Schrödinger (2.1).

De las expresiones anteriores es posible calcular los siguientes conmutadores

$$\begin{aligned} [\Pi_{\mu}, \Pi_{\nu}] &= i \left(A_{\nu\mu} - A_{\mu\nu} \right), \\ [\mathcal{O}_{\mu}, \mathcal{O}_{\nu}] &= i \left(A_{\mu\nu} - A_{\nu\mu} \right), \\ [\mathcal{O}_{\mu}, \Pi_{\nu}] &= 0, \end{aligned}$$
 (2.26)

donde el tensor antisimétrico

$$A_{\mu\nu} - A_{\nu\mu} = \begin{pmatrix} 0 & E_x & E_y \\ -E_x & 0 & 1 \\ -E_y & -1 & 0 \end{pmatrix}$$
(2.27)

contiene sólo a los campos, es decir, es independiente de la norma. Si restablecemos las unidades en estos conmutadores obtenemos

$$[\Pi_i, \Pi_j] = -i\frac{\hbar e}{m^2}B\epsilon_{ij}, \qquad [\Pi_0, \Pi_i] = -i\frac{\hbar e}{m}E_i,$$

$$[\mathcal{O}_i, \mathcal{O}_j] = i\hbar eB\epsilon_{ij}, \qquad [\mathcal{O}_0, \mathcal{O}_i] = i\hbar eE_i,$$

$$(2.28)$$

donde ϵ_{ij} es el tensor antisimétrico bidimensional tal que $\epsilon_{11} = \epsilon_{22} = 0$ y $\epsilon_{12} = -\epsilon_{21} = 1$.

Los conmutadores del segundo renglón de la Ec. (2.26) son parte de un álgebra de Lie más general del grupo Euclidiano bidimensional eléctrico-magnético [35, 36].

Posteriormente utilizaremos la transformación $(x_{\mu}, p_{\mu}) \rightarrow (\Pi_{\mu}, \mathcal{O}_{\mu})$, sin embargo, los conmutadores (2.28) sugieren que no es canónica, por lo tanto resulta conveniente definir un nuevo conjunto de operadores dados por

$$Q_{0} = t, P_{0} = \mathcal{O}_{0} - \frac{1}{2}E^{2}, Q_{1} = \Pi_{2} + E_{x}, P_{1} = \Pi_{1} - E_{y}, (2.29) Q_{2} = \mathcal{O}_{1} - E_{y} - E_{x}t, P_{2} = \mathcal{O}_{2} + E_{x} - E_{y}t,$$

que satisfacen la regla de conmutación

$$[Q_{\mu}, P_{\nu}] = -ig_{\mu\nu} \tag{2.30}$$



donde $g_{\mu\nu}$ es la métrica

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$
 (2.31)

De la relación anterior se infiere que la transformación $(x_{\mu}, p_{\mu}) \rightarrow (Q_{\mu}, P_{\mu})$ es canónica y por lo tanto debe existir un operador unitario que conecte a ambos conjuntos de variables. En la norma simétrica, $\beta_0 = -\beta_1 = -\beta_2 = 1/2$, esta transformación unitaria está dada por [37]

$$\mathcal{U} = \mathcal{U}_P \mathcal{U}_Q = e^{-iP_1 P_2} e^{iE_x Q_2 - iE_y Q_1}.$$
(2.32)

La transformación unitaria \mathcal{U} en una norma general puede obtenerse agregando a (2.32) una trasformación de norma apropiada. La relación de las variables espaciales (x, y) con los nuevos operadores no depende de la norma ya que tenemos

$$x = Q_1 - P_2,$$
 $y = Q_2 - P_1,$ (2.33)

sin embargo para los momentos tenemos

$$p_{x} = \left(\frac{1}{2} - \beta_{0}\right)Q_{2} + \left(\frac{1}{2} + \beta_{0}\right)P_{1} + \left(\frac{1}{2} + \beta_{1}\right)E_{x}Q_{0} + E_{y},$$

$$p_{y} = \left(\frac{1}{2} - \beta_{0}\right)Q_{1} + \left(\frac{1}{2} + \beta_{0}\right)P_{2} + \left(\frac{1}{2} + \beta_{2}\right)E_{y}Q_{0} - E_{x}.$$
(2.34)

Aun así, la ecuación de Schrödinger (2.1) expresada en las nuevas variables no presenta dependencia explícita de la norma de acuerdo con

$$\left[\frac{1}{2}\left(P_{1}^{2}+Q_{1}^{2}\right)+V\left(Q_{1}-P_{2},Q_{2}-P_{1}\right)-EP_{2}-P_{0}\right]|\psi\rangle=0$$
(2.35)

Es posible definir operadores tipo oscilador armónico a partir del término de energía cinética de la ecuación de Schrödinger como

$$A = \frac{1}{\sqrt{2}} (P_1 - iQ_1), \qquad A^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}} (P_1 + iQ_1), \qquad (2.36)$$

lo que permite escribir al operador de Schrödinger en la siguiente forma

$$\left(A^{\dagger}A + \frac{1}{2} + V - EP_2 - P_0\right)|\psi\rangle = 0.$$
 (2.37)

El término de oscilador armónico da lugar a los niveles de Landau.

El operador P_0 contiene el término $i\partial/\partial t$, por lo cual el hamiltoniano se puede identificar por

$$H = A^{\dagger}A + \frac{1}{2} + V - EP_2.$$
 (2.38)



2.4. Rotaciones Magnéticas

En ausencia de potencial periódico, una rotación alrededor del eje del campo magnético deja a las ecuaciones clásicas de movimiento inalteradas, sin embargo, la ecuación de Schrödinger se ve modificada debido a que el potencial vectorial depende de la posición. De manera similar al de las traslaciones magnéticas, dicho cambio se puede compensar por una transformación de norma dando lugar al generador de rotaciones magnéticas. Consideraremos en esta sección el caso sin campo eléctrico, su inclusión será discutida en la sección 2.6.

Consideremos ahora una rotación simple infinitesimal y un corrimiento en la norma de la forma

$$x \to x - y\delta\alpha, \qquad y \to y + x\delta\alpha, \qquad \Lambda \to \Lambda + \delta\Lambda, \qquad (2.39)$$

donde $\delta \alpha$ es un ángulo de rotación infinitesimal. La función lagrangiana permanece invariante ante esta transformación. Sustituyendo la transformación (2.39) en (2.13) obtenemos la variación de la función lagrangiana

$$\delta L = \frac{d}{dt} \left[(x p_y - y p_x) \,\delta \alpha + \beta_0 \left(x^2 - y^2 \right) \,\delta \alpha \right]. \tag{2.40}$$

La función $xp_y - yp_x + \beta_0 (x^2 - y^2)$ es una cantidad conservada que tiene la misma forma que el generador de rotaciones magnéticas que podemos encontrar empleando argumentos cuánticos. Primero consideremos una rotación magnética finita que consiste de una rotación y una transformación de norma de la forma

$$e^{-i(xp_y-yp_z+\Lambda)\alpha} \tag{2.41}$$

Definimos la siguiente función auxiliar

$$f(\alpha) = e^{-i(xp_y - yp_z + \Lambda)\alpha} \Pi_1 e^{i(xp_y - yp_z + \Lambda)\alpha} = \Pi_1 \cos \alpha + \Pi_2 \sin \alpha, \qquad (2.42)$$

que representa el efecto esperado para la rotación del operador de velocidad Π_1 . La función anterior debe cumplir las siguientes condiciones

$$f'(0) = i [\Pi_1, xp_y - yp_x + \Lambda] = \Pi_2,$$

$$f''(0) = - [[\Pi_1, xp_y - yp_x + \Lambda], xp_y - yp_x + \Lambda] = -\Pi_1, \qquad (2.43)$$

lo que implica que

$$\begin{aligned} [\Pi_1, xp_y - yp_x + \Lambda] &= -i\Pi_2 + 2i\beta_0 x + [\Pi_1, \Lambda] = -i\Pi_2, \\ [\Pi_2, xp_y - yp_x + \Lambda] &= i\Pi_1 - 2i\beta_0 y + [\Pi_2, \Lambda] = i\Pi_1, \end{aligned}$$
(2.44)

que a su vez quiere decir que

$$[\Pi_1, \Lambda] = -2i\beta_0 x, \qquad [\Pi_2, \Lambda] = 2i\beta_0 y. \qquad (2.45)$$

Entonces, el cambio de norma debe estar dado por la siguiente expresión

$$\Lambda = \beta_0 \left(x^2 - y^2 \right). \tag{2.46}$$


Finalmente, el generador de rotaciones magnéticas \mathcal{J} se escribe como la combinación de la rotación $xp_y - yp_x$ y la transformación de norma Λ obteniéndose

$$\mathcal{J} = xp_y - yp_x + \beta_0 \left(x^2 - y^2 \right) \tag{2.47}$$

El tercer término en el lado derecho de la Ec. (2.47) depende únicamente de los parámetros de la norma elegidos en la Ec. (2.7). Para la norma simétrica, en la que $\beta_0 = 0$, este término es cero y la rotación magnética se reduce al momento angular en la dirección del campo magnético.

El generador de las rotaciones magnéticas puede escribirse en forma independiente de la norma en términos de los operadores II y de los generadores de las traslaciones EM o de los operadores de escalera (2.36) como

$$\mathcal{J} = \frac{1}{2} \left(\Pi_1^2 + \Pi_2^2 \right) - \frac{1}{2} \left(\mathcal{O}_1^2 + \mathcal{O}_2^2 \right) = A^{\dagger} A - B^{\dagger} B$$
(2.48)

donde hemos definido el operador de escalera

$$B = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(P_2 - iQ_2 \right) \tag{2.49}$$

para los generadores de las traslaciones EM. De esta forma simplificada del generador de rotaciones se pueden calcular las siguientes reglas de conmutación

De la forma (2.48) para el generador de rotaciones, también podemos reescribir el hamiltoniano en términos de las constantes de movimiento como

$$H = \frac{1}{2} \left(\mathcal{O}_1^2 + \mathcal{O}_2^2 \right) + \mathcal{J}.$$
 (2.51)

Cuando agregamos el potencial periódico, se pierde la invariancia ante rotaciones infinitesimales. Entonces, se podría pensar que el concepto de rotaciones magnéticas no es de utilidad en el estudio del problema con campo eléctrico que nos concierne. Sin embargo, en la sección 4.6, veremos que las rotaciones magnéticas permiten relacionar entre si los espectros y las funciones de onda correspondientes a diferentes orientaciones del campo eléctrico.

2.5. Dilataciones

En presencia de un potencial periódico, \mathcal{J} deja de ser una simetría del sistema. Sin embargo, es interesante estudiar el caso de rotaciones que llamaremos rotaciones conmensurables. Decimos que una rotación en un ángulo θ que cumple la condición

$$\theta = \arctan\left(\frac{m_2}{m_1}\right) \tag{2.52}$$

es conmensurable si m_1 y m_2 son números enteros. En general estas rotaciones no son simetrías del cristal y, por lo tanto, tampoco son simetrías de la función



Simetrías del Problema Eléctrico-Magnético de Bloch



Figura 2.1: Rotación conmensurable. En este caso $m_1 = m_2 = 1$ y el ángulo conmensurable es $\theta = 45^{\circ}$. Sobre la red cristalina original con parámetro de red a se puede identificar una nueva celda unitaria con parámetro igual a $b = \sqrt{2a}$.

de onda. Pensemos en una red cuadrada en dos dimensiones. Originalmente tiene simetría ante rotaciones de múltiplos de 90°. Si rotamos esta red en 45° y la superponemos a la original, los puntos de red de ambas no coincidirán. Sin embargo, si contraemos la segunda red en un factor $1/\sqrt{2}$, la simetría es restaurada y los puntos de red de una y otra coinciden regularmente como puede verse en la figura 2.1. En el caso dado por la condición (2.52) se recupera la simetría dilatando la red original por un factor $\sqrt{m_1^2 + m_2^2}$. Al final obtenemos un problema que se parece mucho al original ya que ambas redes poseen la misma simetría ante traslaciones aunque los potenciales periódicos no coinciden. En el ejemplo de la figura 2.1 vemos que la celda original es cuadrada y la final es cuadrada centrada en las caras.

Esta misma idea se sugiere en la sección 3.2 para introducir el efecto de la dirección del campo eléctrico en la función de onda.

Las dilataciones pueden expresarse explícitamente en términos de los operadores (2.29) como

$$\mathcal{D}\left(\lambda\right) = e^{i\lambda Q_2 P_2},\tag{2.53}$$

que no incluye a los operadores que actúan sobre los niveles de Landau a fin de no modificar sus estados.

Ahora estudiamos el efecto de las dilataciones sobre los operadores Q_2 , P_2 y sus eigenestados. Definimos la transformación de similitud

$$f(\lambda) = \mathcal{D}(\lambda) Q_2 \mathcal{D}^{\dagger}(\lambda) \tag{2.54}$$

y la derivada con respecto al parámetro λ

$$f'(\lambda) = i\mathcal{D}(\lambda) \left[Q_2, Q_2 P_2\right] \mathcal{D}^{-1}(\lambda) = -\mathcal{D}(\lambda) Q_2 \mathcal{D}^{-1}(\lambda) = -f(\lambda) \qquad (2.55)$$



28

que junto con la condición $f(0) = Q_2$ implica que

$$\mathcal{D}(\lambda) Q_2 \mathcal{D}^{-1}(\lambda) = e^{-\lambda} Q_2. \tag{2.56}$$

Análogamente se puede ver que la dilatación de P_2 es

$$\mathcal{D}(\lambda) P_2 \mathcal{D}^{-1}(\lambda) = e^{\lambda} P_2. \tag{2.57}$$

Los eigenvalores de estos operadores también se reescalan bajo la acción de la dilatación \mathcal{D} . Los eigenestados del operador P_2 están dados por

$$P_2 \left| k_2 \right\rangle = k_2 \left| k_2 \right\rangle \tag{2.58}$$

y, bajo una dilatación, puede verse que sus eigenestados son reescalados

$$P_{2}\mathcal{D}(\lambda)|k_{2}\rangle = \mathcal{D}(\lambda)\mathcal{D}^{-1}(\lambda)P_{2}\mathcal{D}(\lambda)|k_{2}\rangle = e^{\lambda}k_{2}|k_{2}\rangle.$$
(2.59)

El ket $\mathcal{D}(\lambda) | k_2 \rangle$ es también un eigenestado de P_2 pero con eigenvalor $e^{\lambda} k_2$ es decir

$$\mathcal{D}(\lambda) |k_2\rangle = |e^{\lambda} k_2\rangle. \tag{2.60}$$

El problema MB es invariante bajo la transformación dilatación-rotación de la forma

$$\mathcal{D}(\lambda)\mathcal{R}(\theta) \tag{2.61}$$

siempre y cuando las rotaciones sean conmensurables y la dilatación corresponda al ángulo de rotación en la forma

$$\lambda = \frac{1}{2} \ln (m_1^2 + m_2^2), \qquad \theta = \arctan (m_2/m_1)$$
 (2.62)

Veremos más adelante que estas transformaciones juegan un papel importante en la simplificación de la ecuación de Harper para aquellos casos en que el campo eléctrico está orientado en una dirección arbitraria pero conmensurable o cuando el potencial periódico tiene varios términos de Fourier.

2.6. Grupo Magnético de Simetrías

Considérese el espacio de Hilbert de las funciones de onda de una partícula libre moviéndose en el plano descrito por el hamiltoniano

$$H = \frac{1}{2}\boldsymbol{p}^2. \tag{2.63}$$

Los generadores de traslaciones y rotaciones están dados por el operador p de momento lineal y el operador L de momento angular respectivamente.

Adicionalmente se puede definir el generador de los boosts por medio de la relación

$$\boldsymbol{b} = \boldsymbol{x} - \boldsymbol{t} \boldsymbol{p}. \tag{2.64}$$



En este caso el grupo de Galileo en el plano corresponde al grupo de simetría E(2), donde los correspondientes generadores p, b, L y H satisfacen la siguientes relaciones de un álgebra de Lie [38]

$$\begin{aligned} [L,p_i] &= i\epsilon_{ij}p_j, & [L,b_i] &= i\epsilon_{ij}b_j, \\ && i,j = 1,2, \\ [b_i,H] &= ip_i, & [p_i,b_j] &= i\delta_{ij}, \end{aligned}$$

y todos los demás conmutadores se anulan.

En presencia de un campo magnético B, los operadores de simetría discutidos en las secciones anteriores se pueden ampliar definiendo el generador de los boosts como

$$K_i = x_i - t\mathcal{O}_i. \tag{2.66}$$

Este operador sirve, por ejemplo, para agregar el efecto del campo eléctrico $E = (E_x, E_y)$ al operador de momento angular \mathcal{J} en (2.48)

$$\mathcal{J} \to e^{i\nu_E \cdot K} \mathcal{J} e^{-i\nu_E \cdot K}. \tag{2.67}$$

Eligiendo a $v_E = E \times B$, como la velocidad de deriva, es posible obtener la siguiente expresión para el operador de rotaciones eléctrico-magnéticas

$$\mathcal{J} = X\mathcal{O}_2 - Y\mathcal{O}_1 + \frac{1}{2} \left(X^2 + Y^2 \right)$$
 (2.68)

donde

$$X = x - E_y t, \qquad \qquad Y = y + E_x t \qquad (2.69)$$

y \mathcal{O}_1 y \mathcal{O}_2 son los generadores de las traslaciones eléctrico-magnéticas (2.17).

El grupo de simetrías de este problema se conoce como el grupo magnético de simetría ME(2) si sólo incluye el campo magnético y MEE(2) si se agrega el campo eléctrico (39).

Escribimos sólo el álgebra de Lie extendida correspondiente al caso magnético

$$\begin{split} [\mathcal{J}, \mathcal{O}_i] &= i\epsilon_{ij}\mathcal{O}_j, & [\mathcal{J}, K_i] &= i\epsilon_{ij}K_j, \\ & & i, j = 1, 2 \\ [K_i, \mathcal{O}_j] &= i\delta_{ij} - it\epsilon_{ij}, & [K_i, K_j] &= i\epsilon_{ij}t^2 \end{split}$$

El efecto del campo eléctrico se puede incluir aplicando un boost de la manera descrita en la Ec. (2.67). Considerando el hamiltoniano (2.18) sin potencial periódico, se tiene que

$$[\mathcal{J}, H] = 0, \qquad [\mathcal{O}_i, H] = 0, \qquad [K_i, H] = i\Pi_i. \qquad (2.71)$$

Hemos entonces discutido la generalización del grupo de Galileo para un electrón en campos magnético y eléctrico uniformes, obteniendo el grupo magnético ME(2) cuando se incluye el campo magnético y MEE(2) cuando se agrega el



campo eléctrico. Los conmutadores (2.70) conforman las relaciones fundamentales de esta álgebra extendida de Lie.

En la siguiente sección veremos que, a partir de las traslaciones magnéticas y las evoluciones eléctricas, es posible construir un conjunto completo de simetrías del Hamiltoniano del problema eléctrico-magnético de Bloch. Con estas simetrías obtendremos una base de funciones de onda que son de gran utilidad en el cálculo del espectro de energías y en la determinación de la conductividad de Hall.

Veremos también que por medio de la aplicación succeiva de una rotación magnética y una dilatación, es posible estudiar el caso general en el que el campo eléctrico está alineado a a lo largo de una dirección conmensurable con el cristal.

Simetrías del Problema Eléctrico-Magnético de Bloch

32



33

Capítulo 3

Funciones de Bloch Floquet

3.1. Introducción

En el Capítulo anterior estudiamos el grupo de simetrías del problema de Bloch eléctrico-magnético. En particular mostramos que las traslaciones eléctricomagnéticas (TEM) son simetrías del problema si se restringen a múltiplos del parámetro de red. A diferencia del caso libre, las traslaciones eléctrico-magnéticas no conmutan entre sí, lo cual limita la posibilidad de utilizarlos como operadores que se diagonalizan simultáneamente. Sin embargo, mostraremos que, imponiendo una serie de condiciones de conmensurabilidad, se pueden obtener operadores de simetría que conmutan entre sí. En este Capítulo construiremos un conjunto completo de operadores que conmutan entre sí (CCO) a partir del grupo de las traslaciones magnéticas y las evoluciones eléctricas y con el obtendremos la base completa de sus eigenestados simultáneos. Estudiaremos las propiedades más importantes de estas funciones a las que denominaremos funciones de Bloch eléctrico-magnéticas.

3.2. Condiciones de Bloch

En el capítulo 2 estudiamos las simetrías para el problema de un electrón de Bloch en campos magnético y eléctrico uniformes. Mostramos que en presencia de un potencial periódico sólo las traslaciones en múltiplos de los vectores de red son simetrías del operador de Schrödinger dado por

$$S = A^{\dagger}A + \frac{1}{2} + V - EP_2 - P_0.$$
 (3.1)

Para formar una base completa de kets se requiere que los operadores de simetría conmuten entre sí [40]. Sin embargo las traslaciones eléctrico-magnéticas no conmutan entre sí ya que en

$$T_{\mu}T_{\nu} = e^{c^{\mu}c^{\nu}[\mathcal{O}_{\nu},\mathcal{O}_{\mu}]}T_{\nu}T_{\mu}$$
(3.2)





Figura 3.1: Dirección conmensurable del campo eléctrico. El campo eléctrico Ey el vector unitario e_1 se encuentran en una dirección commensurable de la red cristalina. En este caso $m_1 = 2$ y $m_2 = 1$ y el cociente de estos dos números es igual al de las componentes del campo eléctrico E_1 y E_2 . El vector unitario e_2 es perpendicular a E y se encuentra en el plano de la red cristalina. Sobre la red cristalina con parámetro de red a se puede identificar una nueva red con parámetro igual a b. Para el valor $\sigma = q/p = 3/p$, la red extendida alinea tres celdas a lo largo de la dirección longitudinal.

el conmutador $[\mathcal{O}_{\mu}, \mathcal{O}_{\nu}]$ es en general diferente de cero como puede verse de la Ec. (2.26). Para construir un conjunto completo de operadores a partir de las TEM seguimos un procedimiento de tres pasos:

1. Primero consideramos un marco de referencia alineado con el campo eléctrico formando un ángulo θ , con alguno de los ejes cristalinos. La base ortonormal para este sistema de referencia está dada por $e_1 = (\cos \theta, \sin \theta)$, $e_2 = (-\sin \theta, \cos \theta)$ y $e_3 = e_1 \times e_2$. El campo eléctrico es paralelo a e_1 y el campo magnético es paralelo a e_3 como puede verse en la figura 3.1. Supongamos una orientación particular del campo eléctrico para la cual se cumple la siguiente condición

$$\tan \theta = \frac{E_2}{E_1} = \frac{m_2}{m_1}$$
(3.3)

donde $m_1 y m_2$ son enteros y primos relativos. En el lenguaje introducido en el capítulo anterior, decimos que el campo eléctrico se orienta en una dirección conmensurable. Esta condición asegura que se preserva una periodicidad espacial a lo largo de las direcciones transversal y y longitudinal x. Así, definimos una red rotada que es generada por los vectores $b_1 = be_1$ y $b_2 = be_2$ donde $b = a\sqrt{m_1^2 + m_2^2}$.



34

Las componentes espaciales del generador \mathcal{O}_j son proyectadas a lo largo de las longitudes transversal y longitudinal

$$\mathcal{O}_1 \to \mathcal{O}_1 \cos \theta + \mathcal{O}_2 \sin \theta$$

$$\mathcal{O}_2 \to -\mathcal{O}_1 \sin \theta + \mathcal{O}_2 \cos \theta \qquad (3.4)$$

Las relaciones de conmutación para los generadores de las traslaciones magnéticas en el nuevo marco de referencias quedan dadas por

$$[\mathcal{O}_0, \mathcal{O}_1] = i\sqrt{E_x^2 + E_y^2} = iE, \quad [\mathcal{O}_0, \mathcal{O}_2] = 0, \quad [\mathcal{O}_1, \mathcal{O}_2] = iB. \quad (3.5)$$

La transformación canónica (2.29) puede reescribirse en el nuevo marco de referencia obteniéndose reglas de conmutación muy similares a las originales.

2. Para la red rotada suponemos que el número de cuantos de flujo por unidad de celda se puede expresar como un número racional p/q, es decir

$$\sigma = \frac{\phi_0}{\phi} = \frac{q}{p},\tag{3.6}$$

donde, si se restablecen las unidades, $\phi = Bb^2$ es el flujo magnético y $\phi_0 = h/e$ el cuanto de flujo magnético como puede verse en el apéndice A. Mientras utilicemos unidades en las que $B = \hbar = e = 1$, la condición (3.6) toma la forma

$$\sigma = \frac{q}{p} = \frac{2\pi}{b^2}.$$
 (3.7)

Podemos entonces definir una red extendida que consiste de un rectángulo formado por q celdas adyacentes de lado b alineadas en la dirección longitudinal. Los vectores de la red extendida se eligen como qb_1 y b_2 . La condición (3.6) garantiza que las traslaciones magnéticas longitudinal $T_1 (qb) = \exp (iqbO_1)$ y la transversal $T_2 (b) = \exp (ibO_2)$ commutan entre sí para valores fraccionarios de σ .

3. Tomando en cuenta las condiciones (3.5) y (3.6) tenemos que $T_0(\tau)$ y $T_1(qb)$ conmutan con $T_2(b)$, sin embargo no conmutan entre si, ya que

$$T_0(\tau) T_1(qb) = e^{-iqb\tau E} T_1(qb) T_0(\tau).$$
(3.8)

No obstante, los operadores $T_0(\tau)$ y $T_1(qb)$ conmutarán si se restringe τ a múltiplos del período τ_0 , es decir

$$\tau = n\tau_0, \qquad n \in \mathbb{Z}, \qquad \tau_0 = \frac{2\pi}{qbE} = \frac{1}{p} \left(\frac{b}{v_E}\right)$$
(3.9)

donde v_E es la velocidad de deriva y b/v_E es el tiempo que le toma a un electrón recorrer la distancia entre dos puntos de la red viajando a dicha



velocidad. Notamos que la Ec. (3.9) se puede interpretar diciendo que el cociente entre la separación de la escalera de Stark (*bE*) y el ancho de la zona de Brillouin para la cuasienergía $(2\pi v_E/b)$ es igual al número racional $1/\sigma = p/q$.

Si las condiciones (3.3), (3.6) y (3.9) se cumplen simultáneamente, tenemos que el operador de evolución

$$\mathcal{T}_t \equiv T_0\left(\tau_0\right) = e^{-i\tau_0\mathcal{O}_0} \tag{3.10}$$

y los operadores de las traslaciones magnéticas

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_L &\equiv T_1 \left(qb \right) = e^{iqbO_1}, \\ \mathcal{T}_T &\equiv T_2 \left(b \right) = e^{ibO_2} \end{aligned} \tag{3.11}$$

forman un conjunto de operadores de simetría que conmutan entre si. Utilizando la transformación canónica (2.29) y omitiendo las fases asociadas al campo eléctrico, se pueden expresar como

$$\mathcal{T}_t = e^{-ir_0 P_0},$$

$$\mathcal{T}_L = e^{iqb(Q_2 + EQ_0)},$$

$$\mathcal{T}_T = e^{ibP_2}.$$

(3.12)

En la ecuación anterior el subíndice t indica que el operador \mathcal{T}_t produce evoluciones temporales en la función de onda. Similarmente, los subíndices L y T indican que los operadores \mathcal{T}_L y \mathcal{T}_T producen traslaciones magnéticas en la direcciones longitudinal y transversal al campo eléctrico.

3.3. Conjunto de Traslaciones Eléctrico-Magnéticas

Si dos operadores hermitianos conmutan entre sí, entonces existen suficientes eigenestados simultáneos tales que forman una base completa [40]. La aseveración inversa también es válida; si existe una base completa de eigenestados simultáneos de dos operadores entonces éstos conmutan. El teorema puede ampliarse a un número arbitrario de operadores que denominaremos conjunto completo de operadores que conmutan entre sí (CCO). Estos teoremas pueden extenderse para el caso de los operadores unitarios y enunciarse en forma alternativa de la siguiente manera. La base de eigenestados simultáneos de un conjunto de operadores hermitianos o unitarios que conmutan es completa. Así podemos definir a un conjunto completo de operadores como aquel en el cual los operadores conmutan entre sí y para los cuales sólo hay un eigenvector simultáneo pertenceiente a un grupo dado de eigenvalores.

Ahora queremos aplicar estas ideas en la construcción de una base de eigenestados simultáneos para el conjunto de operadores (3.12) cuyos eigenvectores



y eigenvalores quedan definidos de acuerdo con las siguientes ecuaciones

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{t}\left[\mathcal{E},k_{1},k_{2}\right] &= e^{-i\tau_{0}\mathcal{E}}\left[\mathcal{E},k_{1},k_{2}\right],\\ \mathcal{T}_{L}\left[\mathcal{E},k_{1},k_{2}\right] &= e^{ik_{1}qb}\left[\mathcal{E},k_{1},k_{2}\right],\\ \mathcal{T}_{T}\left[\mathcal{E},k_{1},k_{2}\right] &= e^{ik_{2}b}\left[\mathcal{E},k_{1},k_{2}\right). \end{aligned}$$

$$(3.13)$$

Observamos que los estados están caracterizados por los cuasimomentos k_1 longitudinal y k_2 transversal, respecto a la dirección del campo eléctrico. Estos cuasimomentos deben encontrarse en los intervalos $k_1 \in [0, 2\pi/qb]$ y $k_2 \in [0, 2\pi/b]$, lo cual define la zona magnética de Brillouin (ZMB). De manera similar la cuasienergía \mathcal{E} se determina salvo un múltiplo de $2\pi/\tau_0 = qbE$. Se puede definir entonces un esquema de zonas de Brillouin para la energía tal que $\mathcal{E} \in [0, 2\pi/\tau_0]$.

Un punto de partida para construir la base son los eigenvectores definidos por

$$A^{\dagger}A | \mu, \mathcal{E}, k_2 \rangle = \mu | \mu, \mathcal{E}, k_2 \rangle,$$

$$P_0 | \mu, \mathcal{E}, k_2 \rangle = \mathcal{E} | \mu, \mathcal{E}, k_2 \rangle,$$

$$P_2 | \mu, \mathcal{E}, k_2 \rangle = k_2 | \mu, \mathcal{E}, k_2 \rangle,$$

(3.14)

donde, de acuerdo a (2.36), el índice μ se refiere a los niveles de Landau.

Notamos que estos estados son también eigenvectores de \mathcal{T}_t y \mathcal{T}_T como puede verificarse fácilmente

$$\mathcal{T}_{t} |\mu, \mathcal{E}, k_{2}\rangle = e^{i\tau_{0}\mathcal{E}} |\mu, \mathcal{E}, k_{2}\rangle, \qquad \mathcal{T}_{T} |\mu, \mathcal{E}, k_{2}\rangle = e^{ibk_{2}} |\mu, \mathcal{E}, k_{2}\rangle.$$
(3.15)

Se puede demostrar que la traslación longitudinal produce corrimientos en los números cuánticos de la energía y el pseudomomento transversal de acuerdo a

$$\mathcal{T}_L |\mu, \mathcal{E}, k_2\rangle = |\mu, \mathcal{E} - qbE, k_2 + qb\rangle = |\mu, \mathcal{E} - 2\pi/\tau_0, k_2 + 2\pi p/b\rangle, \quad (3.16)$$

dando lugar a diferentes eigenvectores que poseen el mismo eigenvalor de \mathcal{T}_i y \mathcal{T}_T . Esto sugiere que la función de onda sea escrita como una superposición de todos estos eigenvectores

$$\sum_{l=-\infty}^{\infty} \left[\mathcal{T}_L e^{-iqbk_1} \right]^l |\mu, \mathcal{E}, k_2 \rangle, \qquad (3.17)$$

donde el factor exp $(-iqbk_1)$ fue agregado para dar el resultado correcto en el eigenvalor del operador \mathcal{T}_L . Se puede verificar fácilmente que (3.17) es una eigenfunción de $\mathcal{T}_t, \mathcal{T}_L$ y \mathcal{T}_T con los eigenvalores dados en (3.13). Sin embargo, si en la Ec. (3.17) hacemos la sustitución $k_2 \rightarrow k_2 + 2\pi/b$ obtenemos un nuevo eigenestado pero con los mismos eigenvalores de $\mathcal{T}_t, \mathcal{T}_L$ y \mathcal{T}_T ; lo que indica que este conjunto de operadores no es completo. Para completarlo agregamos el operador de traslación de la energía dado por

$$\mathcal{T}_E = e^{i\frac{2\pi}{\tau_0}t} \tag{3.18}$$



y utilizando la transformación canónica (2.29) se puede expresar como

$$\mathcal{T}_E = e^{iqbEQ_0}.\tag{3.19}$$

Esta transformación produce un corrimiento qbE en el eigenvalor de la energía, que corresponde a la diferencia de potencial que existe entre dos puntos de la red a lo largo del campo eléctrico: $\mathcal{T}_E | \mu, \mathcal{E}, k_2 \rangle = | \mu, \mathcal{E} - qbE, k_2 \rangle$. El operador de traslación de energía conmuta con los tres operadores de simetría dados en la Ec. (3.12). Es por lo tanto posible construir un eigenestado $|\vartheta, \mathcal{E}, k_1, k_2 \rangle$ que sea eigenfunción de los cuatro operadores $\mathcal{T}_E, \mathcal{T}_L, \mathcal{T}_L y \mathcal{T}_T$. En particular se debe cumplir

$$\mathcal{T}_{E} \left| \vartheta, \mathcal{E}, k_{1}, k_{2} \right\rangle = e^{iqbE\vartheta} \left| \vartheta, \mathcal{E}, k_{1}, k_{2} \right\rangle, \qquad (3.20)$$

donde ϑ define un cuasitiempo, módulo τ_0 .

Construimos la función de onda que cumple la condición (3.20) de manera que sea una superposición de estados de la forma (3.17) que tienen el mismo eigenvalor ante el operador T_T

$$|\vartheta, \mathcal{E}, k_1, k_2\rangle = \sum_{l} \left[\mathcal{T}_L e^{-iqbk_1} \right]^l \sum_{\mu, m} c_m^{\mu} \left[e^{iqbQ_2} e^{i\sigma b(E\vartheta - k_1)} \right]^m |\mu, \mathcal{E}, k_2\rangle \quad (3.21)$$

donde c_{μ}^{μ} es un coeficiente que debe cumplir la condición de periodicidad

$$c_m^{\mu} = c_{m+p}^{\mu}, \tag{3.22}$$

de tal manera que se cumpla la segunda condición en la Ec. (3.13). Las otras dos condiciones en (3.13) y la dada por (3.20) se satisfacen automáticamente. Como ya hemos mencionado, el índice μ se refiere a los niveles de Landau. Puede verificarse que (3.21) es un eigenvector de \mathcal{T}_E , \mathcal{T}_L , $\mathcal{Y}\mathcal{T}_T$ y que cada estado de la forma (3.21) da un conjunto de eigenvalores diferentes, por lo tanto este conjunto de operadores es completo. La base formada por los eigenvectores (3.21) es entonces completa y ortonormal.

Hasta este punto hemos logrado construir una base para el conjunto de los cuatro operadores de traslación que conmutan entre sí. Sin embargo, el operador \mathcal{T}_E no conmuta con S [Ec. (3.1)]. El estado (3.21) no es, entonces, eigenvector de S y la solución de la ecuación de Schrödinger debe construirse como una superposición de todos los estados caracterizados por ϑ

$$|\mathcal{E}, k_1, k_2\rangle = \int_0^{\tau_0} d\vartheta \ C(\vartheta) |\vartheta, \mathcal{E}, k_1, k_2\rangle$$
$$= \sum_l \left[\mathcal{T}_L e^{-iqbk_1} \right]^l \sum_{\mu, m} b_m^{\mu} e^{i\sigma b(Q_2 - k_1)m} |\mu, \mathcal{E}, k_2\rangle \quad (3.23)$$

donde, el nuevo coeficiente de la función de onda se define como

$$b_m^{\mu} = \int_0^{\tau_0} d\vartheta \ C\left(\vartheta\right) c_m^{\mu} e^{iqb E\vartheta m} \tag{3.24}$$



Finalmente, escribimos la función de onda (3.23) en forma más compacta como

$$|\mathcal{E}, \mathbf{k}\rangle = \mathcal{W}(k_1) |\mathcal{E}, k_2\rangle,$$
 (3.25)

donde $|\mathcal{E}, \mathbf{k}\rangle = |\mathcal{E}, k_1, k_2\rangle$, el operador que precede a la función de onda anterior está dado por

$$\mathcal{W}(k_1) = \sum_{l} \left[\mathcal{T}_L e^{-iqbk_1} \right]^l = \sum_{l} e^{iqbl(EQ_0 + Q_2 - k_1)}.$$
 (3.26)

y el ket $|\mathcal{E}, k_2\rangle$ se define como

$$|\mathcal{E}, k_2\rangle = \sum_{\mu, m} e^{i\sigma bm(Q_2 - k_1)} b_m^{\mu} |\mu, \mathcal{E}, k_2\rangle.$$
(3.27)

Es importante resaltar que al hacer la sustitución $\exp(-i\sigma bmk_1) b_m^m \rightarrow b_m^m$ en (3.27), el problema de eigenvalores resultante es independiente de k_1 , por lo tanto, el vector (3.27) también es independiente de k_1 . Puede comprobarse fácilmente que $\mathcal{W}(k_1)$, al ser una superposición de traslaciones magnéticas a lo largo del campo eléctrico, conmuta con el operador S. De esto se infiere que la función de onda $|\mathcal{E}, k_2\rangle$ es también una solución de la ecuación de Schrödinger y da lugar a una base completa y a un conjunto completo de operadores formado por P_0 , exp $(iqbQ_2)$ y \mathcal{T}_T . A pesar de que $|\mathcal{E}, k_2\rangle$ tiene una estructura mucho más simple que $|\mathcal{E}, k\rangle$, la última resulta más conveniente en la mayoría de los cálculos; una de sus ventajas es que está caracterizada por las dos componentes del pseudomomento.

La función de onda para el problema de Bloch en ausencia de campos puede obtenerse en forma similar. En el apéndice B se muestra el procedimiento general para obtener las funciones de onda y los eigenvalores de la energía para un electrón en una cadena periódica unidimensional.

Otra propiedad importante de los estados (3.25) es que permiten obtener una representación de la ecuación de Schrödinger en la que el operador de energía P_0 es sustituido por una derivada direccional a lo largo del campo eléctrico respecto al pesudomomento. De la definición (3.25) puede verse que

$$P_0 | \mathcal{E}, k_1, k_2 \rangle = [P_0, \mathcal{W}(k_1)] | \mathcal{E}, k_2 \rangle + \mathcal{W}(k_1) P_0 | \mathcal{E}, k_2 \rangle, \qquad (3.28)$$

el ket $|\mathcal{E}, k2\rangle$ es un eigenvector de la energía y de la Ec. (3.26) obtenemos el conmutador

$$[P_0, \mathcal{W}(k_1)] = \sum_{i} \left[P_0, e^{iqbl(EQ_0 + Q_2 - k_1)} \right] = -E \sum_{i} qble^{iqbl(EQ_0 + Q_2 - k_1)}$$
$$= -iE \frac{\partial}{\partial k_1} \mathcal{W}(k_1) = -iE \cdot \nabla_k \mathcal{W}(k_1). \quad (3.29)$$

De estos últimos resultados podemos escribir la Ec. (3.28) en la forma

$$P_0 |\mathcal{E}, k_1, k_2\rangle = (\mathcal{E} - i \mathbf{E} \cdot \nabla_k) |\mathcal{E}, k_1, k_2\rangle$$
(3.30)



y la ecuación de Schrödinger como

$$H|\mathcal{E}, k_1, k_2\rangle = (\mathcal{E} - i\boldsymbol{E} \cdot \nabla_{\boldsymbol{k}}) |\mathcal{E}, k_1, k_2\rangle.$$
(3.31)

En los siguientes capítulos veremos que (3.31) resulta ser sumamente útil para estudiar las soluciones del problema y la conductividad de Hall.

3.4. Estados de Bloch Floquet

Comenzamos por calcular la función de onda en la representación de coordenadas espaciales como

$$\psi\left(\mathcal{E},\boldsymbol{k};t,\boldsymbol{x}\right) = \left\langle t,\boldsymbol{x}\left|\mathcal{E},\boldsymbol{k}\right\rangle\right\rangle,\tag{3.32}$$

donde $|t, x\rangle$ es un eigenestado del operador de posición $x y | \mathcal{E}, k\rangle$ es la función de onda (3.25). Sustituyendo la forma explícita de la función de onda en la expresión anterior obtenemos

$$\psi\left(\mathcal{E},\boldsymbol{k};t,\boldsymbol{x}\right) = \sum_{\mu,m} b_{m}^{\mu} e^{-i\sigma bmk_{1}} \left\langle t,\boldsymbol{x} \left| \mathcal{W}\left(k_{1}\right) e^{i\sigma bmQ_{2}} \right| \mu, \mathcal{E}, k_{2} \right\rangle.$$
(3.33)

Utilizando la definición de $\mathcal{W}(k_1)$ Ec. (3.26) tenemos que

$$\langle t, \boldsymbol{x} | \mathcal{W}(k_1) e^{i\sigma bmQ_2} | \boldsymbol{\mu}, \mathcal{E}, \boldsymbol{k}_2 \rangle = \sum_{l} e^{iqbl(Et-k_1)} \langle t, \boldsymbol{x} | e^{i\sigma bQ_2(m+pl)} | \boldsymbol{\mu}, \mathcal{E}, \boldsymbol{k}_2 \rangle \quad (3.34)$$

El valor esperado en la ecuación anterior no puede calcularse trivialmente ya que el vector $|\mu, \mathcal{E}, k_2\rangle$ es un eigenket de los operadores $A^{\dagger}A$, P_0 y P_2 como puede verse en las Ecs. (3.14). Introducimos el eigenvector de los operadores Q_0 , Q_1 y Q_2 dado por

$$\begin{array}{l} Q_{0} |q_{0}, q_{1}, q_{2}\rangle_{Q} = q_{0} |q_{0}, q_{1}, q_{2}\rangle_{Q} ,\\ Q_{1} |q_{0}, q_{1}, q_{2}\rangle_{Q} = q_{1} |q_{0}, q_{1}, q_{2}\rangle_{Q} ,\\ Q_{2} |q_{0}, q_{1}, q_{2}\rangle_{Q} = q_{2} |q_{0}, q_{1}, q_{2}\rangle_{Q} , \end{array}$$

$$(3.35)$$

El ket de las variables espacio temporales puede escribirse como

$$|t, x\rangle = \mathcal{U} |t, x, y\rangle_{O}, \qquad (3.36)$$

donde \mathcal{U} es la trasformación (2.32). El subíndice Q indica que el ket de la derecha es eigenvector de los operadores $Q_0, Q_1 y Q_2$ con eigenvalores t, x y y respectivamente. El braket del término del lado derecho de (3.34) puede simplificarse utilizando esta transformación obteniéndose

$$\left\langle t, x \left| e^{i\sigma bQ_2(m+pl)} \right| \mu, \mathcal{E}, k_2 \right\rangle = Q \left\langle t, x, y \left| \mathcal{U}^{\dagger} e^{i\sigma bQ_2(m+pl)} \right| \mu, \mathcal{E}, k_2 \right\rangle.$$
(3.37)



Insertando dos bases completas de eigenestados de P_1 y P_2 en la ecuación anterior y sustituyendo la forma explícita del operador \mathcal{U} obtenemos

$$Q \langle t, x, y | \mathcal{U}^{\dagger} | \mu, \mathcal{E}, k_{2} + 2\pi (m+pl) / b \rangle = \frac{e^{-i\mathcal{E}t}}{2\pi} \int dP_{1} e^{ixP_{1}} \langle P_{1} | \mu \rangle$$
$$\times \int dP_{2} e^{iyP_{2}} e^{iP_{1}P_{2}} \langle P_{2} | k_{2} + 2\pi (m+pl) / b \rangle, \quad (3.38)$$

donde hemos utilizado la propiedad de traslación

$$e^{i\sigma bQ_2(m+pl)} |k_2\rangle = |k_2 + 2\pi (m+pl) / b\rangle.$$
(3.39)

Si llevamos a cabo la integral sobre P_2 tomando en cuenta que

$$\langle P_2 | k_2 + 2\pi (m + pl) / b \rangle = \delta (P_2 - k_2 - 2\pi (m + pl) / b),$$
 (3.40)

obtenemos que la Ec. (3.38) toma la forma

$$\left\langle t, x \left| e^{i\sigma bQ_2(m+pl)} \right| \mu, \mathcal{E}, k_2 \right\rangle = \frac{1}{2\pi} e^{-i\mathcal{E}t + iy[k_2 + 2\pi(m+pl)/b]} \\ \times \int dP_1 \phi_\mu \left(P_1 \right) e^{iP_1[x+k_2 + 2\pi(m+pl)/b]}, \quad (3.41)$$

donde $\phi_{\mu}(P_1)$ es la función de onda de oscilador armónico en la representación del momento P_1 dada por

$$\phi_{\mu}(P_{1}) = \langle P_{1} | \mu \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi^{1/2} 2^{\mu} \mu!}} e^{-P_{1}^{2}/2} H_{\mu}(P_{1})$$
(3.42)

y $H_{\mu}(P_1)$ es el polinomio de Hermite.

Llevando a cabo la integral en (3.41) obtenemos finalmente que la función de onda en la representación de coordenadas espaciales [41] está dada por

$$\psi\left(\mathcal{E},k;t,x\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{iy(k_2 - E) - i\mathcal{E}t} \sum_{\mu lm} i^{\mu} b^{\mu}_m e^{iqbElt} \times e^{i\sigma b(y-k_1)(m+pl)} \phi_{\mu}\left(x+k_2+2\pi \frac{m+pl}{b}\right). \quad (3.43)$$

Es importante recordar que la transformación (2.32) está escrita en la norma particular en la que $\beta_0 = -\beta_1 = -\beta_2 = 1/2$. Por lo tanto, la función de onda anterior también está expresada en esta norma. La función de onda puede escribirse en una norma general agregándole la fase correcta.

Las relaciones (3.13) implican que si una traslación espacio-temporal simple (no eléctrica-magnética) actúa sobre la función de onda, esta última satisfará las condiciones generales de Bloch

$$\begin{aligned} \psi\left(\mathcal{E},\boldsymbol{k};t+\tau_{0},\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right) &= e^{-i\tau_{0}\left(\mathcal{E}-\tilde{A}_{0}\right)}\psi\left(\mathcal{E},\boldsymbol{k};t,\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right),\\ \psi\left(\mathcal{E},\boldsymbol{k};t,\boldsymbol{x}+qb,\boldsymbol{y}\right) &= e^{iqb\left(\boldsymbol{k}_{1}-\tilde{A}_{1}\right)}\psi\left(\mathcal{E},\boldsymbol{k};t,\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right),\\ \psi\left(\mathcal{E},\boldsymbol{k};t,\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}+b\right) &= e^{ib\left(\boldsymbol{k}_{2}-\tilde{A}_{2}\right)}\psi\left(\mathcal{E},\boldsymbol{k};t,\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right)\end{aligned}$$
(3.44)



42

donde \tilde{A}_{μ} es el potencial dual definido en la Ec. (2.17). Podemos verificar que la función de onda (3.43) cumple en efecto con

$$\begin{aligned} \psi\left(\mathcal{E},\boldsymbol{k};t+\tau_{0},x,y\right) &= e^{-i\tau_{0}c}\psi\left(\mathcal{E},\boldsymbol{k};t,x,y\right),\\ \psi\left(\mathcal{E},\boldsymbol{k};t,x+qb,y\right) &= e^{iqb\left(\boldsymbol{k}_{1}-\mathcal{E}t-y\right)}\psi\left(\mathcal{E},\boldsymbol{k};t,x,y\right),\\ \psi\left(\mathcal{E},\boldsymbol{k};t,x,y+b\right) &= e^{ibk_{2}}\psi\left(\mathcal{E},\boldsymbol{k};t,x,y\right), \end{aligned}$$
(3.45)

que coincide con el resultado en (3.44), ya que en la norma particular elegida se tienen que: $\tilde{A}_0 = \tilde{A}_2 = 0$ y $\bar{A}_1 = Et + y$.

La primera ecuación en (3.45) puede entenderse en términos de la teoría de Floquet [42]. Los estados eléctrico-magnéticos de Bloch se obtienen como soluciones de la ceuación de Schrödinger que explícitamente incluye los efectos de dichos campos. De acuerdo con la Ec. (3.9), el efecto de E y B en el potencial periódico induce una periodicidad temporal con período $\tau_0 = b/pv_E$. Por lo tanto, de acuerdo con el teorema de Floquet, la función de onda se puede escribir como

$$\psi\left(\mathcal{E}, \boldsymbol{k}; t, \boldsymbol{x}\right) = e^{-it\mathcal{E}}\varphi\left(\boldsymbol{k}; t, \boldsymbol{x}\right) \tag{3.46}$$

donde, para la norma elegida, $\varphi(\mathbf{k}; t, \mathbf{x})$ es periódica en el tiempo con período τ_0 . Esta propiedad puede verificarse fácilmente en la Ec. (3.43).

En la representación de variables espacio temporales, la propiedad (3.30) se obtiene multiplicando por la izquierda por el bra $\langle t, x | y$ reemplazando P_0 por $i\partial/\partial Q_0 = i\partial/\partial t$ obteniéndose

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi\left(\mathcal{E},\boldsymbol{k};t,\boldsymbol{x}\right) = \left(\mathcal{E}-i\boldsymbol{E}\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}}\right)\psi\left(\mathcal{E},\boldsymbol{k};t,\boldsymbol{x}\right). \tag{3.47}$$

Utilizando la definición (3.46) obtenemos que

$$i\frac{\partial}{\partial t}\varphi\left(\boldsymbol{k};t,\boldsymbol{x}\right) = -i\boldsymbol{E}\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}}\varphi\left(\boldsymbol{k};t,\boldsymbol{x}\right),\qquad(3.48)$$

es decir que para la función de modulación, la derivada temporal puede ser reemplazada por el negativo de la derivada longitudinal respecto a k.

Las condiciones restantes en (3.44) y (3.45) se relacionan con el teorema de Bloch, lo que sugiere que la función de onda sea escrita como

$$\varphi(\mathbf{k}; t, \mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{z}} u(\mathbf{k}; t, \mathbf{x}). \tag{3.49}$$

En resumen la combinación de los teoremas de Bloch y Floquet permiten escribir la función de onda completa como

$$\psi\left(\mathcal{E},\boldsymbol{k};t,\boldsymbol{x}\right) = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x} - i\mathcal{E}t}u\left(\boldsymbol{k};t,\boldsymbol{x}\right),\tag{3.50}$$

que denotaremos como la función de onda de Bloch-Floquet. La función de modulación u(k; t, x) cumple con las siguiente condiciones generalizadas de Bloch

$$u(k; t + \tau_0, x, y) = e^{i\tau_0 A_0} u(k; t, x, y),$$

$$u(k; t, x + qb, y) = e^{-iqb\bar{A}_1} u(k; t, x, y),$$

$$u(k; t, x, y + b) = e^{-ib\bar{A}_2} u(k; t, x, y),$$

(3.51)



que difieren de las condiciones tradicionales de Bloch-Floquet, ya que en general la función de modulación no es periódica ni en el tiempo ni en las coordenadas espaciales, sino que adquiere una fase relacionada con el potencial vectorial dual \bar{A}_{μ} . Sin embargo, si en lugar de aplicar una traslación simple, se aplican las transformaciones eléctrico-magnéticas se recupera la periodicidad de la función de modulación.

Para obtener la normalización correcta la función de modulación debe cumplir la siguiente condición

$$\frac{(2\pi)^2}{qb^2} \int_{\text{CUM}} d^2 x \ u^* (k; t, x) \ u(k; t, x) = 1$$
(3.52)

con CUM definida como una celda unitaria magnética en los intervalos $x \in [0, qb]$ y $y \in [0, b]$. Las funciones de modulación cumplen la ecuación efectiva de Schrödinger dada por

$$S(k) u(k; t, x) = \left[\frac{1}{2} (\Pi + k)^{2} + V - \Pi_{0}\right] u(k; t, x) = 0, \qquad (3.53)$$

donde $\Pi = (\Pi_1, \Pi_2)$.





TESIS CON FALLA DE ORIGEN

Capítulo 4

Ecuación Generalizada de Harper

4.1. Introducción

Harper estudió el problema de un electrón en una red periódica bidimensional por medio de la aproximación de amarre fuerte y la aproximación de Peierls [20]. En la aproximación de amarre fuerte la energía está dada por

$$\mathcal{E}_0(k_1, k_2) = 2U_0(\cos k_1 a + \lambda \cos k_2 a)$$
(4.1)

donde a es el parámetro de red, k es el vector de onda del electrón, U_0 es el parámetro de salto de un sitio de la red a otro contiguo a lo largo del eje x y $U_0\lambda$ es el parámetro de salto a lo largo del eje y. El efecto del campo magnético se introduce por medio de la sustitución de Peierls que, como se explicó en el capítulo 1, consiste en remplazar k por el operador p + A, donde p es el operador de momento y A es el potencial vectorial. En la norma de Landau, para un campo magnético perpendicular al plano x - y, el potencial vectorial toma la forma A = (0, Bx, 0). Para estas condiciones se obtiene la siguiente ecuación de Schrödinger

$$\mathcal{E}\varphi\left(x,y\right) = \mathcal{E}_{0}\left(p_{x},p_{y}+x\right)\varphi\left(x,y\right)$$
$$= 2U_{0}\left[\cos ap_{x}+\lambda\cos\left(ap_{y}+ax\right)\right]\varphi\left(x,y\right). \quad (4.2)$$

Dado que $\exp(-iap_x)$ y $\exp(-iap_y)$ son los operadores de traslación a lo largo de x y y en unidades de a, la ecuación de Schrödinger toma la forma

$$\mathcal{E}\varphi(x,y) = 2U_0\left[\varphi(x+a,y) + \varphi(x-a,y) + \lambda e^{iax}\varphi(x,y+a) + \lambda e^{-iax}\varphi(x,y-a)\right]. \quad (4.3)$$

Esto convierte a la ecuación continua en una discreta que acopla a la función de onda con las amplitudes de los cuatro sitios cercanos. En la dirección y



Ecuación Generalizada de Harper

suponemos que la función de onda tiene la forma de una onda plana, entonces

$$\varphi(x,y) = e^{i\kappa \frac{y}{a}}\psi\left(\frac{x}{a}\right) \tag{4.4}$$

y con el parámetro adimensional m = x/a y el flujo magnético, que con unidades toma la forma $\phi = a^2 B/\phi_0$, obtenemos finalmente la ecuación de Harper para $\psi_m \equiv \psi(m)$

$$\psi_{m-1} + 2\lambda \cos\left(2\pi\phi m + \kappa\right)\psi_m + \psi_{m+1} = \varepsilon\psi_m \tag{4.5}$$

En esta ecuación la energía $\varepsilon = \mathcal{E}/U_0$ se mide en unidades de U_0 y depende solamente de los parámetros ϕ y κ . El parámetro κ está asociado a la componente del momento a lo largo de y.

La Ec. (4.5) también describe a un electrón que se mueve a lo largo de una cadena lineal en un potencial $\cos (2\pi\phi m + \kappa)$. La cantidad ϕ especifica el cociente entre el período del potencial y el período correspondiente al acoplamiento a primeros vecinos. Aquí puede notarse la diferencia del efecto de los valores racionales e irracionales de ϕ . Si el flujo magnético es un número racional, $\phi = p/q$ con p y q enteros y primos relativos, entonces el potencial es commensurado con la red con período p. Veremos más adelante que en este caso el espectro de la ecuación de Harper se encuentra formado por q bandas.

En la vecindad de un número racional cualquiera existen otros números racionales que poseen un denominador arbitrariamente grande al igual que números irracionales cuyos denominadores tienden a infinito. Se espera entonces que el espectro del problema magnético de Bloch tenga una compleja estructura en la que se alternan conjuntos de bandas, para valores racionales del flujo magnético, y niveles discretos para valores irracionales del flujo. Cuando el flujo magnético es un número irracional se distinguen tres casos de acuerdo con el valor que toma el parámetro λ [43]. Si $\lambda < 1$ el espectro tiene estructura de bandas, para $\lambda > 1$ los niveles de energía se organizan como un número infinito de puntos y $\lambda = 1$ representa el caso crítico en el que el espectro es singular continuo. De tal modo que en principio, la diferencia entre números racionales e irracionales se hace evidente en un fenómeno físico.

En las siguientes secciones presentamos la deducción de la ecuación generalizada de Harper en el régimen de campo magnético intenso e incluyendo el efecto del campo eléctrico. También estudiamos algunas de las propiedades del espectro de energía que resulta de la solución de este problema.

4.2. Ecuación de Harper Generalizada

En la sección anterior estudiamos al sistema formado por un electrón bidimensional en un campo magnético y un potencial periódico en la aproximación de amarre fuerte. Esta aproximación es válida sólo en el límite de campo magnético débil debido a la sustitución de Peierls.

Ahora queremos estudiar el mismo sistema pero en el régimen de campos magnéticos arbitrarios. Para campos magnéticos intensos los niveles de Landau

TECIC CONT
I LOID CON
PATTA DD ODIO
I FALLA DE ORIGEN I

se rompen en sub-bandas. Si el campo magnético es lo suficientemente intenso la separación entre los niveles de Landau $\hbar\omega_c$ es lo suficientemente grande para que el acoplamiento entre las sub-bandas de dos niveles contiguos sea despreciable, en cuyo caso el efecto sobre cualquiera de los niveles de Landau se puede considerar por separado. Es interesante observar que en este límite es posible encontrar una ecuación similar a (4.5) en la cual el flujo magnético ϕ es sustituido por su inverso que denotaremos por σ . Por otro lado si el acoplamiento entre niveles de Landau es débil pero no despreciable será suficiente tomar en cuenta sólo algunos niveles de Landau en los cálculos de la energía y otras cantidades relevantes.

En el capítulo anterior encontramos la forma general de la función de onda que posee las simetrías del sistema que estamos estudiando. Sin embargo, el coeficiente de la función de onda b_m^{μ} no ha sido determinado dado que no hemos establecido las particularidades del sistema como la forma del potencial periódico bidimensional. Utilizamos la forma más general del potencial periódico dada por la descomposición de Fourier

$$V(x,y) = \sum_{r,s} v_{rs} \exp\left(i\frac{2\pi rx}{a} + i\frac{2\pi sy}{a}\right).$$
(4.6)

Para calcular el coeficiente b_m^{μ} introducimos la función de onda (3.25) en la ecuación de eigenvalores para la energía (2.37). Cabe recordar que en el coeficiente b_m^{μ} , el índice μ se refiere a los niveles de Landau, mientras que m se origina en las condiciones de periodicidad del problema. De este procedimiento se obtiene la siguiente ecuación secular

$$\sum_{\mu} \left[\sum_{r,s} B_m^{\nu\mu}(r,s) \, b_{m-sm_1+rm_2}^{\mu} - (\mathcal{E} + Ek_2 + \sigma b Em) \, \delta^{\mu\nu} b_m^{\mu} \right] = 0, \qquad (4.7)$$

donde $B_m^{\nu\mu}(r,s)$ se define como

$$B_{m}^{\nu\mu}(r,s) = \begin{cases} \left(v_{00} + \mu + \frac{1}{2}\right)\delta^{\mu\nu}, & r, s = 0, \\ v_{rs}D^{\nu\mu}\left(H_{rs}\right)e^{iK_{rs}}e^{iM_{rs}\left[\sigma b\left(rm_{2} - sm_{1} + m\right) + k_{2}\right]} & r, s \neq 0, \end{cases}$$
(4.8)

y las constantes H_{rs} , K_{rs} y M_{rs} están dadas por

$$H_{rs} = \frac{\sqrt{2\pi}}{b} (m_2 - im_1) (ir + s),$$

$$K_{rs} = \frac{2\pi^2}{b^2} (rm_2 - sm_1) (rm_1 + sm_2),$$

$$M_{rs} = -\frac{2\pi}{b} (rm_1 + sm_2).$$
(4.9)

La matriz $D^{\nu\mu}$ corresponde a los elementos $\langle \nu | D | \mu \rangle$ del operador D que genera estados coherentes de Landau definido como

$$D = \exp\left(H_{rs}A^{\dagger} - H_{rs}^{\bullet}A\right). \tag{4.10}$$



En el apéndice C.1 se encuentra el cálculo explícito de estos elementos de matriz. La Ec. (4.7) se puede escribir en la forma más compacta

$$\sum_{k=-N}^{t=N} A_m^t (k_1, k_2) \, b_{m+t} = (\mathcal{E} + Ek_2 + \sigma b Em) \, b_m \tag{4.11}$$

si definimos a b_m y $A_m^t(k_1, k_2)$ como

$$b_{m} = (b_{m}^{0}, b_{m}^{1}, ..., b_{m}^{L})$$

$$A_{m}^{t} (k_{1}, k_{2}) = e^{-i\sigma bk_{1}t} \sum_{r, s} B_{m} (r, s) \,\delta_{t, rm_{2}-sm_{1}}$$
(4.12)

donde L es el nivel de Landau más alto considerado en los cálculos y $N = máx(r,s)(m_1 + m_2)$ corresponde al mayor de los armónicos tomado en cuenta en la descomposición de Fourier del potencial periódico.

La Ec. (4.11) puede ser reorganizada en la forma de una relación de recurrencia tridiagonal como

$$Q_m^- c_{m-1} + Q_m c_m + Q_m^+ c_{m+1} = \left[\left(\mathcal{E} + Ek_2 + \sigma b Em \right) I_N + \sigma b ED_N \right] c_m, \quad (4.13)$$

donde I_N es la matriz unidad de dimensión N, D_N es la matriz diagonal de dimensión N

$$D_{N} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & N-1 \end{pmatrix},$$
(4.14)

las matrices Q_m^- , Q_m y Q_m^+ son funciones k_1 y k_2 y están dadas por [44]

$$Q_{m}^{-}(k_{1},k_{2}) = \begin{pmatrix} A_{Nm}^{-N} & A_{Nm}^{-N+1} & \cdots & A_{Nm}^{-1} \\ 0 & A_{Nm+1}^{-N} & \cdots & A_{Nm+1}^{-N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & A_{N(m+1)-1}^{-N} \end{pmatrix}$$

$$Q_{m}(k_{1},k_{2}) = \begin{pmatrix} A_{Nm}^{0} & A_{Nm}^{1} & \cdots & A_{Nm+1}^{N-1} \\ A_{Nm+1}^{-1} & A_{Nm+1}^{0} & \cdots & A_{Nm+1}^{N-2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N(m+1)-1}^{1-N} & A_{N(m+1)-1}^{2-N} & \cdots & A_{N(m+1)-1}^{0} \end{pmatrix}$$

$$Q_{m}^{+}(k_{1},k_{2}) = \begin{pmatrix} A_{Nm}^{0} & 0 & \cdots & 0 \\ A_{Nm+1}^{N-1} & A_{Nm+1}^{N-2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N(m+1)-1}^{1-N} & A_{N(m+1)-1}^{N-2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N(m+1)-1}^{1} & A_{N(m+1)-1}^{2-N} & \cdots & A_{N(m+1)-1}^{N} \end{pmatrix}$$

$$(4.15)$$

TESIS COL

y el vector c_m se expresa de la forma

 $c_m = (b_{Nm-1}, b_{Nm}, b_{Nm+1}, \dots b_{N(m+1)-1})$ (4.16)

Los elementos de la matriz diagonal son $[D_N]_{ab} = a\delta_{ab}$, los de las matrices Q_m^- , $Q_m \ge Q_m^+$ están dados por

$$\begin{aligned} \left[Q_m^-(k_1,k_2)\right]_{ab} &= A_{Nm+a-1}^{b-a-N}\left(k_1,k_2\right), \\ \left[Q_m(k_1,k_2)\right]_{ab} &= A_{Nm+a-1}^{b-a}\left(k_1,k_2\right), \\ \left[Q_m^+(k_1,k_2)\right]_{ab} &= A_{Nm+a-1}^{b-a+N}\left(k_1,k_2\right), \end{aligned}$$
(4.17)

donde [$]_{ab}$ indica el elemento a, b de la matriz, los índices $a, b = 0, 1, \ldots, N-1$ y hemos hecho $A_n^l = 0$ para |l| > N. Los elementos del vector c_m pueden expresarse como $[c_m]_a = b_{Nm+a-1}$.

La expresión (4.13) representa la ecuación de Harper generalizada que permite, utilizando las técnicas descritas en las secciones 4.5-4.8, estudiar el espectro del problema eléctrico-magnético de Bloch bajo las condiciones más generales posibles. Es, sin embargo, conveniente restringirnos al caso del potencial periódico de la forma (2.9), es decir, consideraremos una red periódica cuadrada. Adicionalmente suponemos al campo eléctrico alineado con uno de los ejes cristalinos por lo que N = 1. El caso para una orientación arbitraria de E se obtiene por medio de las rotaciones magnéticas, como puede verse en la sección 4.6. Tomando en cuenta estas simplificaciones, tenemos que las Q's son matrices en el espacio de los niveles de Landau dadas por

$$Q_m^+ = (Q_m^-)^{\dagger} = \frac{\lambda \pi K}{2(1+\lambda) a^2} e^{i\sigma bk_1} D\left(\sqrt{\pi\sigma}\right),$$
$$Q_m = \frac{\pi K}{2(1+\lambda) a^2} e^{i(2\pi\sigma m + \sigma bk_2)} D\left(\sqrt{\pi\sigma}\right) + \text{c.c.}, \tag{4.18}$$

donde, hemos introducido el parámetro adimensional

$$K = \frac{ma^2 U_0 \left(1 + \lambda\right)}{\hbar^2 \pi},\tag{4.19}$$

que da una medida del grado de acoplamiento entre los niveles de Landau. Se puede probar que esta cantidad es la razón entre la energía del potencial de la red y la del campo magnético. El valor más alto que puede tomar el potencial periódico bidimensional (2.9) es $U_0 + \lambda U_0$ y la energía del nivel más bajo de Landau es $\hbar\omega_c/2$. Al comparar estas dos cantidades por medio de su cociente obtenemos

$$\frac{2U_0\left(1+\lambda\right)}{\hbar\omega_c} = K\sigma. \tag{4.20}$$

Esperamos obtener entonces acoplamientos importantes entre los niveles de Landau para potenciales de la red muy intensos o para campos magnéticos muy débiles ($\sigma \rightarrow \infty$). Si por el contrario K es pequeño y el campo magnético es

TESIS CON			
FALLA DE	ORIGEN		

intenso ($\sigma \rightarrow 0$), entonces la energía magnética es muy alta y los electrones tenderán a comportarse como electrones de Landau perturbados por un potencial de red muy débil.

Como mencionamos para el caso del campo eléctrico alineado con uno de los ejes cristalinos se tiene N = 1 y la matriz D_N se cancela con lo que la Ec. (4.13) queda dada por

$$Q_m^- c_{m-1} + Q_m c_m + Q_m^+ c_{m+1} = (\mathcal{E} + Ek_2 + \sigma b Em) c_m.$$
(4.21)

Si adicionalmente suponemos que el acoplamiento entre los niveles de Landau es débil, es decir $\sigma K \ll 1$, se desprecian los elementos de $D^{\nu\mu}$ que están fuera de la diagonal. De tal modo, $D^{\nu\mu}$ puede aproximarse por

$$D^{\nu\mu}\left(\frac{\sqrt{2}\pi}{b}\right) = D^{\nu\mu}\left(i\frac{\sqrt{2}\pi}{b}\right)\delta^{\nu\mu}.$$
(4.22)

Esto permite reducir la ecuación (4.21) a la siguiente forma

$$\lambda e^{i\sigma bk_1} c_{m-1} + 2\cos\left(2\pi\sigma m + \sigma bk_2\right) c_m + \lambda e^{-i\sigma bk_1} c_{m+1} = (\varepsilon + \zeta m) c_m \quad (4.23)$$

donde

$$\varepsilon = 2 \frac{\mathcal{E} + Ek_2 - \mu - 1/2}{U_0 D^{\mu\mu} \left(\sqrt{\pi\sigma}\right)}, \qquad \qquad \zeta = \frac{\sigma \varrho}{D^{\mu\mu} \left(\sqrt{\pi\sigma}\right)}. \tag{4.24}$$

donde $\varrho = 2bE/U_0$ es el cociente entre la energía del campo eléctrico y la del potencial periódico bidimensional que caracteriza la intensidad del campo eléctrico. En ausencia de campo eléctrico la Ec. (4.24) se reduce a la ecuación de Harper. El campo eléctrico entra en la ecuación de Harper a través del término ζm .

En resumen, la Ec. (4.13) representa al caso más general de un electrón en una red periódica bidimensional en presencia de campos magnético y eléctrico. En esta ecuación el campo eléctrico puede encontrarse a lo largo de cualquier dirección conmensurable del potencial periódico bidimensional. El caso de la Ec. (4.21) corresponde a aquel en el que el campo eléctrico está dirigido únicamente a lo largo del eje x del cristal. Finalmente, la Ec. (4.23) representa al caso más simple en el que el campo eléctrico está dirigido a lo largo del eje x y el potencial de la red es lo suficientemente débil como para no producir acoplamiento entre los niveles de Landau.

4.3. Diagonalización por Bloques de la Ecuación Generalizada de Harper

Regresando al caso general representado por la Ec. (4.13) tenemos que de la Ec. (4.7), las definiciones (4.12) y recordando que $\sigma = q/p$ se puede inferir que A_m^t es periódica en *m* con período *p*; por lo que las matrices Q_m^- , Q_m y Q_m^+ , que



4.3 Diagonalización por Bloques de la Ecuación Generalizada de Harper

están definidas en términos de A_m^t , tienen la misma periodicidad. El conjunto de ecuaciones formado por (4.13) puede entonces agruparse en bloques Q_{-1} , Q_0 y Q_1 en forma tridiagonal

$$\begin{aligned} \mathbb{Q}_{-1}\mathbb{C}_{j-1} + \mathbb{Q}_0\mathbb{C}_j + \mathbb{Q}_1\mathbb{C}_{j+1} \\ &= \left[(\mathcal{E} + Ek_2 + \sigma bEj) \mathbb{I}_{Np} + \sigma bE\mathbb{D}_{Np} \right]\mathbb{C}_j, \quad (4.25) \end{aligned}$$

donde j es un número entero, \mathbb{I}_{Np} es la matriz unidad de dimensión Np, \mathbb{D}_{Np} es la matriz diagonal

$$\mathbb{D}_{N_{P}} = \begin{pmatrix} D_{N} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & D_{N} + NI_{N} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & D_{N} + (p-1)NI_{N} \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & Np-1 \end{pmatrix}, \quad (4.26)$$

las matrices Q_{-1} , Q_0 y Q_1 son funciones de los pseudomomentos y sus elementos incluyen a las matrices Q_m^- , Q_m y Q_m^+

$$\begin{aligned}
\mathbb{Q}_{-1} (k_1, k_2) &= \begin{pmatrix} 0 & \dots & Q_0^- \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}, \\
\mathbb{Q}_0 (k_1, k_2) &= \begin{pmatrix} Q_0 & Q_0^+ & 0 & 0 & \dots & 0 \\ Q_1^- & Q_1 & Q_1^+ & 0 & \dots & 0 \\ 0 & Q_2^- & Q_2 & Q_2^+ & \dots & 0 \\ 0 & 0 & Q_3^- & Q_3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & Q_{p-1} \end{pmatrix}, \quad (4.27) \\
\mathbb{Q}_1 (k_1, k_2) &= \begin{pmatrix} 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ Q_{p-1}^+ & \dots & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

y el vector \mathbb{C}_k se define como

$$C_j = (c_j, c_{j+1}, c_{j+2}, \ldots, c_{j+p-1}).$$
 (4.28)

Los elementos de las matrices anteriores pueden escribirse como

$$\begin{aligned} & [\mathbb{Q}_{-1} \ (k_1, k_2)]_{mn} = Q_m^- \delta_{m,0} \delta_{n,p-1}, \\ & [\mathbb{Q}_0 \ (k_1, k_2)]_{mn} = Q_m^- \ (k_1, k_2) \ \delta_{m,n+1} + Q_m \delta_{m,n} + Q_m^+ \delta_{m,n-1}, \\ & [\mathbb{Q}_1 \ (k_1, k_2)]_{mn} = Q_m^+ \delta_{m,p-1} \delta_{n,0}, \end{aligned}$$

$$(4.29)$$

TESIS CON FALLA DE ORIGEN

51

donde $m, n = 0, 1, \ldots Np - 1$ y los del vector \mathbb{C}_m son

$$\left[\mathbb{C}_{j}\right]_{m} = c_{k+j}.\tag{4.30}$$

Estas definiciones permiten reescribir el conjunto de Ecs. (4.25) en la siguiente forma matricial

$$\sum_{j} \mathbb{H}_{ij} (k_1, k_2) \mathbb{C}_j = \left[(\mathcal{E} + Ek_2 + qbENi) \mathbb{I}_{Np} + \sigma bE\mathbb{D}_{Np} \right] \mathbb{C}_i$$
(4.31)

donde

$$\mathbb{H}_{ij}(k_1,k_2) = \mathbb{Q}_{-1}(k_1,k_2)\,\delta_{i,j+1} + \mathbb{Q}_0(k_1,k_2)\,\delta_{i,j} + \mathbb{Q}_1(k_1,k_2)\,\delta_{i,j-1}.$$
 (4.32)

Es importante observar que las nuevas matrices \mathbb{Q}_{-1} , \mathbb{Q}_0 y \mathbb{Q}_1 se definen incluyendo como entradas a las matrices Q_m^- , Q_m y Q_m^+ las cuales a su vez están definidas en (4.15) a partir de $A_m^t(k_1, k_2)$. Esta última, a su vez es una matriz en el espacio de los niveles de Landau. Por lo tanto, la matriz $\mathbb{H}(k_1, k_2)$ es de dimensión infinita pero está construida a partir de los bloques \mathbb{Q}_{-1} , \mathbb{Q}_0 y \mathbb{Q}_1 que son de dimensión NpL.

La Ec. (4.31) puede ser reducida a bloques por medio de la transformación unitaria $\mathbb{U}_j(\phi)$ dada por

$$\mathbb{U}_{j}\left(\phi\right) = \sqrt{\frac{qbN}{2\pi}} e^{i\sigma b\phi \mathbf{D}_{N_{p}}} e^{iqb\phi Nj}, \qquad (4.33)$$

que cumple las siguientes propiedades

$$\sum_{j} \mathbb{U}_{j}^{\dagger}(\phi) \mathbb{U}_{j}(\varphi) = \delta(\phi - \varphi), \qquad \int_{0}^{\frac{2\pi}{44}} d\phi \mathbb{U}_{i}^{\dagger}(\phi) \mathbb{U}_{j}(\phi) = \delta_{i,j} \qquad (4.34)$$

Ante esta transformación, el vector \mathbb{C}_i se convierte en

$$d(\phi) = \sum_{i} U_{i}(\phi) C_{i}, \qquad (4.35)$$

donde *d* es un vector de dimensión NpL. Puede verse de la ecuación anterior que $U_i(\phi)$ reduce la matriz \mathbb{H}_{ij} a bloques de $NpL \times NpL$. En el apéndice C.2 se demuestra que en efecto la transformación (4.33) reduce la relación (4.31) a bloques obteniéndose

$$H(k_{1} + \phi, k_{2}) \,\delta(\phi - \varphi) = \sum_{ij} \mathbf{U}_{i}(\phi) \,\mathbf{H}_{ij}(k_{1}, k_{2}) \,\mathbf{U}_{j}^{\dagger}(\varphi)$$
$$= \delta(\phi - \varphi) \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{Q}_{\mathbf{k}}(k_{1} + \phi, k_{2}) = (4.36)$$





4.3 Diagonalización por Bloques de la Ecuación Generalizada de Harper



Figura 4.1: Mariposa de Hofstadter. Los puntos negros indican los eigenvalores de la energía como función de σ donde σ es el inverso del flujo magnético por unidad de celda por unidad de fluxón magnético ϕ_0 . Esta figura muestra el caso en que $\lambda = 1$ y se considera $\sigma K \ll 1$.

De la ecuación anterior y las definiciones (4.27) para Q_{-1} , Q_0 y Q_1 podemos ver que la matriz $H(k_1 + \phi, k_2)$ toma la forma general

$$H(k_{1}+\phi,k_{2}) = \begin{pmatrix} Q_{0} & Q_{0}^{+} & 0 & 0 & \dots & Q_{0}^{-} \\ Q_{1}^{-} & Q_{1} & Q_{1}^{+} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & Q_{2}^{-} & Q_{2} & Q_{2}^{+} & \dots & 0 \\ 0 & 0 & Q_{3}^{-} & Q_{3} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ Q_{p-1}^{+} & 0 & 0 & 0 & \dots & Q_{p-1} \end{pmatrix}$$
(4.37)

donde $Q_m^- \equiv Q_m^-(k_1 + \phi, k_2)$, $Q_m \equiv Q_m(k_1 + \phi, k_2)$ y $Q_m^+ \equiv Q_m^+(k_1 + \phi, k_2)$. Al realizar la transformación (4.33) obtenemos que la Ec. (4.31) se transfor-

ma en

$$H(k_{1} + \phi, k_{2}) d(k_{1} + \phi, k_{2}) = \left(\mathcal{E} + Ek_{2} - iE\frac{\partial}{\partial\phi}\right) d(k_{1} + \phi, k_{2}). \quad (4.38)$$

De las propiedades (4.34) es fácil verificar que la normalización de estos vectores está dada por

$$\int_{0}^{\frac{2\pi}{4}} d\phi \ d^{*} \left(k_{1} + \phi, k_{2}\right) d\left(k_{1} + \phi, k_{2}\right) = 1.$$
(4.39)





Observando la forma en que ϕ aparece en las ecuaciones anteriores, puede verse que éste está relacionado al cuasimomento k_1 que apunta en la dirección del campo eléctrico, entonces si redefinimos $k_1 + \phi \rightarrow k_1$ en la Ec. (4.38) obtenemos

$$H(k_1,k_2) d(k_1,k_2) = \left(\mathcal{E} + Ek_2 - iE\frac{\partial}{\partial k_1}\right) d(k_1,k_2).$$

$$(4.40)$$

La expresión anterior es similar a la ecuación de Schrödinger (3.31) introducida en la sección 3.4. Sin embargo ahora contamos con una representación matricial explícita para el hamiltoniano con la que se pueden analizar numéricamente las propiedades del sistema; a pesar de que la Ec. (3.31) es más general, (4.40), en ausencia de campo eléctrico, se reduce a un problema de eigenvalores para una matriz finita. En la siguiente sección, por medio de esta ecuación, estudiaremos el espectro de energías en ausencia de campo eléctrico.

4.4. Espectro en Ausencia de Campo Eléctrico

Cuando el campo eléctrico es nulo, la derivada direccional $E\partial/\partial k_1$ en la Ec. (4.40) desaparece y quedamos con el problema de eigenvalores dado por

$$H(k_1, k_2) b(k_1, k_2) = \mathcal{E}^0(k_1, k_2) b(k_1, k_2).$$
(4.41)

En la ecuación previa $\mathcal{E}^0(k_1, k_2)$ y $b(k_1, k_2)$ son los eigenvalores y los eigenvectores de la energía cuando el campo eléctrico es nulo y $H(k_1, k_2)$ es una matriz de $pL \times pL$ donde L es el nivel de Landau más alto considerado en el cálculo y p es el denominador del inverso del flujo magnético $\sigma = q/p$.

El espectro puede encontrarse entonces diagonalizando la matriz finita $H(k_1, k_2)$ para valores dados del flujo magnético, el acoplamiento entre los niveles de Landau K y los pseudomomentos k_1 y k_2 , obteniéndose así un conjunto de pLeigenvalores y eigenvectores. Cada uno de estos niveles dará lugar a una banda al variar los valores de los pseudomomentos.

Primero veamos el caso más simple. Cuando el acoplamiento entre los niveles de Landau es despreciable y por lo tanto se puede hacer la aproximación (4.22), la matriz $H(k_1, k_2)$ se puede obtener directamente de la ecuación de Harper (4.23). En este caso $H(k_1, k_2)$ queda dada por

$$H(k_1, k_2)$$

$$= \begin{pmatrix} V_{0} & \lambda e^{-i\sigma bk_{1}} & 0 & \dots & 0 & \lambda e^{i\sigma bk_{1}} \\ \lambda e^{i\sigma bk_{1}} & V_{1} & \lambda e^{-i\sigma bk_{1}} & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda e^{-i\sigma bk_{1}} & 0 & 0 & \dots & \lambda e^{i\sigma bk_{1}} & V_{n-1} \end{pmatrix}$$
(4.42)

donde $V_m = 2 \cos (2\pi\sigma m + \sigma bk_2)$. Al diagonalizar $H(k_1, k_2)$ se obtienen los eigenvalores de la energía reescalada ε definida en la Ec. (4.24). Los eigenvalores de la energía obtenidos como función del inverso del flujo magnético corresponden al espectro de energías de la mariposa de Hofstadter, como puede verse en la





Figura 4.2: Estructura de bandas en la mariposa de Hofstadter. (a) $\sigma = 1/2$, (b) $\sigma = 1/3$.

figura 4.1. Este espectro se obtuvo calculando la matriz $H(k_1, k_2)$ como función del inverso del flujo magnético σ y variando los pseudomomentos k_1 y k_2 dentro de la zona magnética de Brillouin. Puede verse que el espectro posee dos ejes de simetría en $\sigma = 1/2$ y en $\varepsilon = 0$. Réplicas de la figura de la mariposa, formada por las cuatro alas en forma de equis, se repiten reiteradamente al interior de la misma escaladas por un factor que en general depende tanto de la energía como del flujo magnético. Se dice entonces que la mariposa de Hofstadter tiene una estructura multifractal [27].

Una característica importante del espectro de la mariposa es que está compuesto por bandas. La matriz $H(k_1, k_2)$ para este ejemplo es de dimensión ppor lo que esperamos encontrar, para valores dados del pseudomomento, un número total de p estados por cada nivel de Landau. A medida que variamos los pseudomomentos, cada una de las p energías cambia de valor obteniéndose así la estructura de bandas. Esperamos que para un valor $\sigma = q/p$ del inverso del flujo magnético se obtengan un total de p bandas por cada nivel de Landau. Por ejemplo, en $\sigma = 1/2$ tenemos dos bandas: una en el intervalo $\varepsilon \in [-2\sqrt{2}, 0]$ y la otra en $\varepsilon \in [0, 2\sqrt{2}]$. Dado que se tocan en $\varepsilon = 0$, en la figura 4.1 aparentan ser una sola. Lo mismo ocurre con otros valores de σ para los que p es par, como en $\sigma = 1/4$ donde existen cuatro bandas en total pero se observan sólo tres ya que dos de ellas se tocan en $\varepsilon = 0$. En general podemos decir que si el denominador de σ es par, entonces el número de bandas observadas en el espectro de la mariposa es p-1. Si, por el contrario, el denominador de σ es impar entonces observaremos p bandas. Esto se ilustra en la figura 4.2 donde pueden verse los





Figura 4.3: Espectro como función de σ para diferentes valores del acoplamiento entre los niveles de Landau. (a) K = 1, (b) K = 2.5, (c) K = 5 y (d) K = 10.

eigenvalores de la energía como función del pseudomomento k_2 . Se incluyen los estados correspondientes a todos los valores posibles del pseudomomento k_1 . En esta figura puede observarse que para $\sigma = 1/2$ se obtienen dos bandas que se tocan en $\varepsilon = 0$ y para $\sigma = 1/3$ se obtienen tres bandas completamente separadas entre sí.

En la figura 4.3 pueden verse el espectro de energías \mathcal{E} calculado de la diagonalización de $H(k_1, k_2)$ para diferentes acoplamientos entre los niveles de Landau. A medida que el acoplamiento entre los niveles de Landau se hace más intenso éstos comienzan a separarse en bandas que incluso pueden llegar a mezclarse con las de niveles de Landau contiguos. En todos los casos, para $\sigma = 0$ ($B \to \infty$) los eigenestados de la energía se encuentran localizados en los niveles de Landau $\mathcal{E} = n + 1/2$. Como lo sugiere la Ec. (4.20), a medida que σ se hace más grande ($B \to 0$) la energía magnética se reduce frente al efecto del potencial periódico observándose el rompimiento de los niveles de Landau en bandas. Para obtener convergencia en los cálculos es necesario incluir algunos niveles extras a los mostrados en las figuras. Por ejemplo los cálculos que dieron lugar a la figura 4.3 se realizaron incluyendo siete niveles de Landau; se



56



Figura 4.4: Espectro de la mariposa de Hofstadter para K = 1. Al incluir acoplamiento entre los niveles de Landau, el espectro de la mariposa se ve deformado.

comprobó que el agregar nuevos niveles no modificaba los resultados mostrados. Es interesante observar de la figura 4.3 que existen valores de σ para los que el espectro de bandas sufre un colapso reduciéndose prácticamente a un espectro discreto. Dichos puntos están dados por la condición $\sigma = \gamma_{\mu}/\pi$, donde γ_{μ} es un cero de los polinomios de Laguerre $L_{\mu}(\pi\sigma)$. De la Ec. (4.24) vemos que el caso en el que el acoplamiento entre los niveles de Landau se puede despreciar, tendríamos que la anchura de la banda se colapsaría a cero. Como veremos en el siguiente capítulo, para dichos puntos esperamos que los estados se localicen completamente.

Dado que el espectro del problema de Bloch magnético tiene estructura de bandas podemos agregar un índice α denotando el número que etiqueta a la banda en los eigenestados de la energía.

Es interesante estudiar los cambios que sufre el espectro de la mariposa cuando el acoplamiento entre los niveles de Landau es intenso. Utilizando la Ec. (4.24) puede calcularse ε para el espectro de la figura 4.3. En la figura 4.4 se observa el espectro de energías ε como función del inverso del flujo magnético para K = 1. Puede notarse que el espectro de la mariposa se ve deformado debido al alto acoplamiento entre los niveles de Landau. El efecto es muy notorio en la separación de las bandas para $\sigma = 1/2$, que para $K \ll 1$ se encuentran unidas en $\varepsilon = 0$.

Los experimentos originales miden el efecto Hall cuántico asociado a un nivel de Landau, lo cual requiere que la separación entre niveles contiguos sea mucho mayor que el ensanchamiento producido en ellos por el potencial de la red periódica. De acuerdo a la Ec. (4.20) la condición anterior implica que



 $K\sigma \ll 1$. Por otro lado, si se quiere medir la conductividad asociada a una de las sub-bandas de la mariposa de Hofstadter, se necesita que las brechas entre dichas sub-bandas sean apreciables. De acuerdo a los resultados mostrados en las figura 4.1 y figura 4.3, la última condición requiere que σ sea del orden de la unidad. Par los semiconductores usuales, que poseen pequeños parámetros de red, $\sigma = h/(eBb^2)$ resulta ser enorme aun para los campos magnéticos más intensos que se pueden lograr en el laboratorio. La única posibilidad de observar la estructura interna de la mariposa radica entonces en estudiar super-redes artificiales que tienen parámetros de red hasta 100 veces más grandes.

Como mencionamos en la Introducción, von Klitzing, Dorda y Pepper [1] emplearon un MOSFET de Si/SiO_2 en la medición del efecto Hall cuántico. El Si tiene un parámetro de red de $b \approx 0.54$ nm y sus electrones una masa efectiva de $m = 0.067m_e$ donde m_e es la masa en reposo del electrón. Para los campos magnéticos empleados en estos experimentos (B de 3 a 10T) obtenemos que el inverso del flujo magnético σ se encuentra en el intervalo $\sigma \in [1400, 4700]$. mientras que $K\sigma \in [1.3, 0.4]$. Por lo tanto en este experimento se cumple la condición de niveles de Landau no mezclados. En los experimentos de Störmer. Tsui y Gossard [8] se utilizaron heterojunturas de GaAs/AlGaAs. El GaAs y el AlGaAs poseen parámetros de red cercanos a 0.57nm y sus electrones tiene una masa efectiva de $m = 0.067m_e$. Para los campos magnéticos utilizados en estos experimentos (B de 3 a 25T), σ se encuentra en el intervalo [500, 4200], mientras que $K\sigma \in [0.05, 0.4]$. Por lo tanto, en este experimento se mejora la condición que asegura el desacoplamiento entre niveles de Landau. Notamos que en ambos experimentos los altos valores de σ impiden observar la estructura interna de los niveles de Landau.

Sin embargo, los sistemas que poseen grandes parámetros de red, como las redes de antipuntos cuánticos [13, 15], son apropiados para el estudio experimental de la estructura interna de la mariposa. Por ejemplo, en el experimento realizado recientemente por Albrecht, von Klitzing y sus colaboradores [15], se utilizó una red cuadrada de antipuntos cuánticos en una heteroestructura lateral de GaAs/AlGaAs. El parámetro de la red artificial es b = 120nm, mientras que la amplitud del potencial periódico bidimensional es del orden de $U_0 = 0.6 \text{meV}$, y nuevamente la masa efectiva de los electrones para el GaAs y el AlGaAs es $m = 0.067m_{e}$. Para este experimento se emplearon campos magnéticos entre 0.4T y 0.8T, lo cual da valores de σ en el intervalo [1/3, 2/3]. Cabe señalar que en este caso $K\sigma$ toma valores en el rango [1.5,3]. Observando la figura 4.3, vemos que en una primera aproximación podemos despreciar el acoplamiento entre niveles de Landau. Sin embargo un estudio más detallado muestra que en este régimen dicho acoplamiento debe ser tomado en cuenta. En cualquier caso el haber obtenido valores de σ del orden de la unidad ha permitido por primera ocasión explorar, aunque sea de manera limitada, el interior del espectro de la mariposa. Dicho espectro (figura 4.1) es simétrico con respecto a $\sigma = 1/2$; sin embargo tal y como se observó en el experimento y se discutirá en el próximo capítulo las conductividades de las sub-bandas para los valores $\sigma = 1/3$ y $\sigma = 2/3$ siguen una secuencia diferente.



4.5. Matriz de Transferencia

En ausencia de campo eléctrico los estados de la energía pueden encontrarse resolviendo el problema de eigenvalores tal y como se estudió en la sección anterior. Aquí mostramos que también es posible encontrar los eigenvalores de la energía utilizando el método de la matriz de transferencia. Además de su valor intrínseco, el método permite deducir algunas propiedades generales del espectro.

Considerando el caso en el que podemos despreciar el acoplamiento entre niveles de Landau y en ausencia de campo eléctrico la ecuación de Harper (4.23) toma la forma

$$\lambda c_{m-1} e^{i\sigma bk_1} + 2\cos\left(2\pi\sigma m + \sigma bk_2\right)c_m + \lambda c_{m+1} e^{-i\sigma bk_1} = \varepsilon c_m. \tag{4.43}$$

Reagrupando los coeficientes del vector de onda de la siguiente manera

$$d_m = e^{-i\sigma bk_1 m} \begin{pmatrix} c_m \\ c_{m-1} e^{i\sigma bk_1} \end{pmatrix}, \qquad (4.44)$$

vemos que d_m cumple la siguiente relación de transferencia

$$d_{m+1} = M_m d_m, (4.45)$$

donde

$$M_m(\varepsilon,\sigma,k_2) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\lambda} \left[\varepsilon - 2\cos\left(2\pi\sigma m + \sigma bk_2\right)\right] & -1\\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$
(4.46)

es la matriz de transferencia que conecta a d_m con d_{m+1} . Dicha matriz puede conectar a dos coeficientes cualesquiera si es multiplicada sucesivamente

$$d_{m+n} = M_{m+n-1}M_{m+n-2}\dots M_{m+1}M_m d_m$$
(4.47)

La matriz de transferencia y el vector d_m tienen las siguientes propiedades de periodicidad

$$M_{m+p} = M_m, \qquad d_{m+p} = e^{-iqbk_1} d_m.$$
 (4.48)

Si iteramos la Ec. (4.45) y utilizamos (4.48) obtenemos la ecuación de eigenvalores

$$\mathbb{T}d_n = e^{-iqbk_1}d_n \tag{4.49}$$

donde

$$\mathbb{T}(\varepsilon, \sigma, k_2) = M_{n+p-1}(\varepsilon, \sigma, k_2) M_{n+p-2}(\varepsilon, \sigma, k_2) \dots \dots M_{n+1}(\varepsilon, \sigma, k_2) M_n(\varepsilon, \sigma, k_2).$$
(4.50)

La Ec. (4.49) sugiere que los eigenvalores y el determinante de la matriz **T** tienen módulo unitario [27, 45]. Esta condición es equivalente a requerir que el valor absoluto de la traza de la matriz sea menor o igual a 2

$$|\operatorname{Tr}\mathbb{T}, (\varepsilon, \sigma, k_2)| \le 2.$$
 (4.51)



La traza de la matriz de transferencia T es un polinomio de la energía de grado p. Por lo tanto, el espectro se separará en p bandas [46] tal como discutimos anteriormente.

the second se

Se puede mostrar que la única manera en la que interviene el valor de k_2 en la traza de T es en forma aditiva. Esto quiere decir que los espectros encontrados por medio de la condición (4.51) para dos valores distintos de k_2 se pueden relacionar, observando que las correspondientes trazas de T se encuentran desplazadas [27, 47] como se puede ver en la siguiente expresión

$$|\operatorname{Tr}\mathbb{T}(\varepsilon,\sigma,k_2)| = |\operatorname{Tr}\mathbb{T}(\varepsilon,\sigma,0)| + 2g(k_2)$$
(4.52)

donde g es una función compleja y periódica de amplitud 1 [47]. De la forma simétrica en la que aparecen k_1 y k_2 esperamos que exista una relación similar para k_1 y que el conjunto de estados generados al variar el pseudomomento dentro de la zona magnética de Brillouin se obtenga de la condición

$$|\operatorname{Tr}\mathbb{T}(\varepsilon,\sigma,0)| \le 4.$$
 (4.53)

Por medio de este criterio podemos encontrar los eigenvalores de la energía del electrón magnético de Bloch correspondientes a todos los valores de los pseudomomentos. El espectro obtenido es nuevamente el de la mariposa de Hofstadter de la figura 4.1.

4.6. Rotaciones Magnéticas

Consideramos ahora los efectos producidos por la inclusión del campo eléctrico. Para ello demostramos primero que el espectro para una orientación arbitraria de E se puede relacionar con el espectro obtenido cuando la dirección del campo coincide con los ejes de la red. En esta sección restringimos el estudio a casos en que el acoplamiento entre niveles de Landau es despreciable.

La función de onda presenta simetría ante rotaciones de la red cristalina si se agrega una dilatación de los vectores de red (sección 2.5).

Como ya hemos mencionado, para una red cuadrada, un ángulo de rotación que cumple la condición

$$\theta = \arctan\left(\frac{m_2}{m_1}\right) \tag{4.54}$$

es conmensurable si m_1 y m_2 son números enteros. En general estas rotaciones no son simetrías del cristal y por lo tanto tampoco son simetrías de la función de onda. Sin embargo, si llevamos a cabo una rotación por un ángulo conmensurable y dilatamos la red por un factor $\sqrt{m_1^2 + m_2^2}$, la simetría traslacional en múltiplos de vectores de red es restaurada y los puntos de red de una y otra coinciden regularmente como puede verse en la figura 4.5.

Si los ejes coordenados coinciden con los vectores de red la función de onda (3.27), que también es una solución de la ecuación de Schrödinger (sección 3.3), toma la forma

$$|\mathcal{E}, k_2\rangle = \sum_{\mu, m} b^{\mu}_{m} e^{-i\sigma_0 a k_1 m} \left| \mu, \mathcal{E}, k_2 + \frac{2\pi}{a} m \right\rangle, \tag{4.55}$$





Figura 4.5: Rotación conmensurable por un ángulo $\theta = \arctan(m_2/m_1)$.

donde σ_0 es el inverso del flujo magnético en una celda unitaria de la red original con parámetro de red *a*.

Bajo la rotación de los ejes coordenados en una dirección conmensurable, la función de onda toma la forma

$$|\mathcal{E}, K_2\rangle = \sum_{\mu, m} c_m^{\mu} e^{-i\sigma b K_1 m} \left| \mu, \mathcal{E}, K_2 + \frac{2\pi}{b} m \right\rangle$$
(4.56)

donde σ es el inverso del flujo magnético en una celda unitaria con parámetro de red $b = a\sqrt{m_1^2 + m_2^2}$, es decir $\sigma = \sigma_0/(m_1^2 + m_2^2)$. El término de la derecha de la ecuación anterior contiene implícitamente una dilatación ya que el parámetro de red ha sido modificado.

Estas dos funciones de onda deben estar relacionadas a través de una rotación magnética

$$|\mathcal{E}, K_2\rangle = \mathcal{R}(\theta) |\mathcal{E}, k_2\rangle, \qquad (4.57)$$

donde $\mathcal{R}(\theta)$ es el operador de rotaciones magnéticas dado en la Ec. (2.41). Los pseudomomentos se relacionan de la siguiente manera

$$K_1 = k_1 \cos \theta - k_2 \sin \theta, \qquad K_2 = k_1 \sin \theta + k_2 \cos \theta. \tag{4.58}$$

De estas consideraciones esperamos una relación entre los coeficientes b_m^{μ} y c_m^{μ} de la forma

$$c_m^{\nu} = \sum_m J_{mn} b_n^{\nu}.$$
 (4.59)

Para determinar J_{mn} multiplicamos a (4.55) por un bra de la base { $|\nu, K_2 + 2\pi m/b$ }

TESIS CON	
FALLA DE ORIGEN	

obteniéndose

$$J_{mn} = e^{i(\sigma b K_1 m - \sigma_0 a k_1 n)} \left\langle \nu, K_2 + \frac{2\pi}{b} m \middle| \mathcal{R} \middle| \nu, k_2 + \frac{2\pi}{a} n \right\rangle$$
$$= e^{i(\sigma b K_1 m - \sigma_0 a k_1 n - \theta \nu)} \left\langle K_2 + \frac{2\pi}{b} m \middle| \mathcal{R} \middle| k_2 + \frac{2\pi}{a} n \right\rangle. \quad (4.60)$$

La matriz J_{mn} depende de los pseudomomentos a través de una fase como puede verse de los siguientes cálculos

$$e^{i(\sigma bK_1m-\sigma_0ak_1n)} \left\langle K_2 + \frac{2\pi}{b}m \middle| \mathcal{R} \middle| k_2 + \frac{2\pi}{a}n \right\rangle$$

= $\left\langle \frac{2\pi}{b}m \middle| e^{iK_1P_2}e^{-iK_2Q_2}\mathcal{R}e^{ik_2Q_2}e^{-ik_1P_2} \middle| \frac{2\pi}{a}n \right\rangle$
= $e^{i\chi(k_1,k_2)} \left\langle \frac{2\pi}{b}m \middle| e^{-iQ_2(K_2-k_1\sin\theta-k_2\cos\theta)}e^{iP_2(K_1-k_1\cos\theta+k_2\sin\theta)}\mathcal{R} \middle| \frac{2\pi}{a}n \right\rangle$
= $e^{i\chi(k_1,k_2)} \left\langle \frac{2\pi}{b}m \middle| \mathcal{R} \middle| \frac{2\pi}{a}n \right\rangle$, (4.61)

donde la fase χ , que no interviene en los cálculos subsiguientes, está dada por

$$\chi(k_1, k_2) = k_1 k_2 \sin^2 \theta + \sin 2\theta \left(k_2^2 - k_1^2\right). \tag{4.62}$$

Para calcular la forma explícita de la transformación J_{mn} es conveniente introducir la base de tipo oscilador armónico $\{|\mu\rangle\}$ de los operadores de ascenso y descenso definidos en la sección 2.4

$$B = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(P_2 - iQ_2 \right), \qquad B^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(P_2 + iQ_2 \right) \qquad (4.63)$$

formada por los eigenestados del operador de número

$$B^{\dagger}B\left|\mu\right\rangle = \mu\left|\mu\right\rangle. \tag{4.64}$$

Insertando una base completa de estos estados en el elemento de matriz de la rotación de la Ec. (4.61) se obtiene

$$\left\langle \frac{2\pi}{b}m \middle| \mathcal{R} \middle| \frac{2\pi}{a}n \right\rangle = \sum_{\mu} e^{i\theta\mu} \phi_{\mu} \left(\frac{2\pi}{b}m\right) \phi_{\mu} \left(\frac{2\pi}{a}n\right)$$
(4.65)

donde ϕ_{μ} es la función de onda del oscilador armónico. La suma de productos de funciones de oscilador armónico puede expresarse como

$$\sum_{\mu} z^{\mu} \phi_{\mu}(x) \phi_{\mu}(y) = \frac{1}{\pi \sqrt{1-z^2}} \exp\left[\frac{4xyz - (z^2 + 1)(x^2 + y^2)}{2(1-z^2)}\right]$$
(4.66)

62
donde z es un número complejo cuyo módulo es menor que uno (ver apéndice C.3). La rotación queda entonces dada por

$$J_{mn} = \frac{e^{i\chi}}{\pi\sqrt{1 - e^{i2\theta}}} \exp\left[2\pi^2 \frac{4e^{i\theta} \frac{nm}{ab} - (e^{i2\theta} + 1)\left(\frac{m^2}{a^2} + \frac{n^2}{b^2}\right)}{1 - e^{i2\theta}}\right].$$
 (4.67)

Si el ángulo de rotación es conmensurable, es decir cumple la condición (4.54), la expresión anterior toma la forma simplificada

$$J_{mn} = \frac{e^{i\chi - i\theta\nu}}{\pi} e^{i\frac{\pi\sigma m_2m^2}{m_1}} e^{-i\frac{\pi\sigma_0}{m_1m_2}(nm_1 - m)^2}.$$
 (4.68)

Es interesante notar que (4.59) con J_{mn} dado en (4.60) representa una generalización de la transformada discreta de Fourier. En particular para $m_1 = 0$, $m_2 = 1$, la Ec. (4.59) se reduce a la transformación discreta de Fourier. Es posible mostrar que la aplicación de la transformación (4.59) a la Ec. (4.23) da lugar a la forma más general de la ecuación de Harper

$$e^{-i\pi\sigma m_{1}m_{2}}\lambda\left[e^{i2\pi\sigma m_{2}m}e^{i\sigma b(K_{1}m_{1}+K_{2}m_{2})}c_{m-m1} + e^{-i2\pi\sigma m_{2}m}e^{-i\sigma b(K_{1}m_{1}+K_{2}m_{2})}c_{m+m1}\right] + e^{i\pi\sigma m_{1}m_{2}}\left[e^{i2\pi\sigma m_{1}m}e^{-i\sigma b(K_{1}m_{2}-K_{2}m_{1})}c_{m+m2} + e^{-i2\pi\sigma m_{1}m}e^{i\sigma b(K_{1}m_{2}-K_{2}m_{1})}c_{m-m2}\right] = (\varepsilon + \zeta m) c_{m}.$$
 (4.69)

La Ec. (4.69) es justamente la que se obtiene de (4.21) para una orientación arbitraria de E cuando se desprecia el acoplamiento entre los niveles de Landau. Es decir se verifica que la rotación magnética (4.59) relaciona las soluciones para una orientación arbitraria de E con aquella en la que el campo eléctrico coincide con uno de los ejes de la red.

Lo más importante de estos resultados es que permiten relacionar los eigenvalores de la energía del problema en el que el campo eléctrico es paralelo a uno de los ejes cristalinos con otro en el que la orientación es arbitraria. Esperamos que en general la energía sea una función del flujo magnético la intensidad del campo eléctrico y su ángulo de orientación θ , es decir $\varepsilon \equiv \varepsilon (\sigma, \zeta, \theta)$. Si el campo eléctrico se encuentra dirigido a lo largo de uno de los ejes cristalinos, el espectro del electrón está regido por la Ec. (4.23) y lo denotamos como $\varepsilon \equiv \varepsilon (\sigma_0, \zeta, 0)$. Si, por el contrario, el campo eléctrico forma un ángulo conmensurable con alguno de los ejes cristalinos, el espectro estará dado por la ecuación (4.69) (apéndice D) [48]. En este capítulo mostramos que es posible obtener una ecuación de la otra a partir de una rotación magnética. Dado que esta transformación es unitaria, los espectros se relacionan de acuerdo a

$$\varepsilon(\sigma_0,\zeta,0) = \varepsilon\left(\sigma_0\sqrt{m_1^2+m_2^2},\zeta,\theta\right). \tag{4.70}$$



La relación anterior permite conocer el espectro del electrón en presencia de un campo eléctrico orientado en forma arbitraria a partir de las energías para el mismo sistema pero con el campo eléctrico alineado a lo largo de uno de los ejes cristalinos. Esto reduce notablemente el tiempo de cálculo ya que el tamaño de las matrices obtenidas de (4.23) es $N = \max(m1, m2)$ veces menor que el de (4.69).

4.7. Función de Green y Densidad de Estados

La representación matricial de la sección 4.3 y la relación de transferencia hallada en la sección anterior permiten calcular el espectro del electrón en ausencia de campo eléctrico. Si utilizamos la representación (4.13) ó (4.23) tenemos que el término del campo eléctrico rompe la periodicidad del problema lo que se refleja en la correspondiente falta de periodicidad de la matriz de transferencia. En la representación de la sección 4.3, en la que se aplica la trasformación (4.33), se obtiene un hamiltoniano finito de dimensión $NpL \times NpL$ pero la ecuación de movimiento deja de ser local en el pseudomomento k_1 debido a la derivada direccional $E\partial/\partial k_1$. Dicha representación es esencial para explicar la cuantización de la conductividad de Hall como veremos más adelante. Sin embargo para el cálculo explícito del espectro en presencia de campo eléctrico es conveniente considerar la Ec. (4.13) que representa una relación de recurrencia infinita.

El problema de nuestro interés se puede analizar por medio de la función de Green del sistema. Como veremos, se puede extraer información del espectro de la función de Green por medio de la detección de sus polos o calculando la densidad de estados.

Primero discutimos algunos aspectos generales de la función de Green [49]. Utilizamos por ejemplo la Ec. (4.13), la reorganizamos de manera que tome la forma de una ecuación de eigenvalores

$$(H - \mathcal{E}I)c = 0, \tag{4.71}$$

donde I es la matriz unidad de dimensión infinita, c es el vector

$$c = (\ldots c_{-1}, c_0, c_1, \ldots),$$
 (4.72)

H es la matriz dada por

TESIS CON

$$H = \begin{pmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \dots & Q_{-1}^{+} & \bar{Q}_{-1} & Q_{-1}^{-} & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & Q_{0}^{+} & \bar{Q}_{0} & Q_{0}^{-} & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & Q_{1}^{+} & \bar{Q}_{1} & Q_{1}^{-} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$
(4.73)

$$y Q_m = Q_m - Ek_2 - \sigma b E (D_N + NmI_N).$$

En general, la función de Green G(z) se define como la solución a la ecuación

$$\sum_{k} (z\delta_{n,k} - H_{n,k}) G_{k,m}(z) = \delta_{n,m}, \qquad (4.74)$$

donde $z = \mathcal{E} + i\epsilon$ es un número complejo. Esta ecuación puede ser considerada la representación en la base (3.14) de la ecuación de operadores

$$(z-H)G = 1.$$
 (4.75)

Si $\{|c_n\rangle\}$ es una base completa de eigenvectores ortonormales de H y $\{\mathcal{E}_n\}$ sus eigenvalores correspondientes, entonces el operador de Green puede escribirse como $\lceil 49 \rceil$

$$G(z) = \frac{1}{z - H} = \sum_{k} \frac{|c_k\rangle \langle c_k|}{z - \mathcal{E}_k}.$$
(4.76)

Si z coincide con alguno de los eigenvalores discretos de H, G(z) tiene polos en los eigenvalores de H. Esta propiedad de la función de Green permite en algunos casos detectar los polos y establecer donde se encuentran los eigenvalores de H. Para aquellos casos en los que los niveles de energía no son degenerados y el espectro es poco denso los polos son simples y por lo tanto, la función de Green en la vecindad de un polo correspondiente al eigenvalor \mathcal{E}_k toma la forma

$$G(z) \approx \frac{A}{z - \mathcal{E}_k},$$
 (4.77)

donde A es una constante.

Como puede verse en la figura 4.6, el signo de la función de Green es diferente a ambos lados de un polo, $G_1 = G(\mathcal{E}_1)$ tiene el signo contrario de $G_2 = G(\mathcal{E}_2)$ por lo que el eigenvalor de la energía debe encontrarse entre estos dos puntos, o sea $\mathcal{E}_1 < \mathcal{E}_k < \mathcal{E}_2$. Utilizando la Ec. (4.77) podemos calcular con mayor precisión el eigenvalor de la energía como

$$\mathcal{E}_{k} \approx \frac{\mathcal{E}_{2} - \mathcal{E}_{1} \left(G_{1} / G_{2} \right)}{1 - \left(G_{1} / G_{2} \right)}.$$
 (4.78)

Este método resulta muy práctico en el cálculo de los espectros que están compuestos de eigenvalores discretos que corresponden a polos simples de la función de Green. Sin embargo, el espectro continuo de H aparece como una línea singular o una rama de corte de G. Entonces, si \mathcal{E} pertenece a una porción continua del espectro, la función de Green existe y no posee polos simples que pueden ser detectados por medio del procedimiento anterior, que es el caso de muchos de los espectros que resultan de las diversas versiones de la ecuación de Harper.

Para determinar este tipo de espectros resulta conveniente calcular la densidad de estados.

Empezamos por considerar la existencia de porciones continuas del espectro, entonces la función de Green (4.76) toma la forma

$$G(z) = \sum_{k} \frac{|c_{k}\rangle \langle c_{k}|}{z - \mathcal{E}_{k}} + \int dk \frac{|c_{k}\rangle \langle c_{k}|}{z - \mathcal{E}_{k}}$$
(4.79)





Figura 4.6: Función de Green como función de la energía en la proximidad de un polo simple. La función de Green G presenta un cambio de signo al cruzar el polo.

Si $\mathcal{E} = \mathcal{E}_k$ donde \mathcal{E}_k pertenece a una porción continua del espectro, G no está bien definida ya que el integrando de la ecuación anterior tiene un polo. De cualquier forma G puede ser definida a través de los límites en la vecindad de la parte continua del espectro. Los limites laterales de G ($\mathcal{E} \pm i\epsilon$) existen pero no coinciden a medida que $\epsilon \to 0$. Definimos, entonces, la discontinuidad de la función de G reen

$$\bar{G}\left(\mathcal{E}\right) = G^{+}\left(\mathcal{E}\right) - G^{-}\left(\mathcal{E}\right) \tag{4.80}$$

donde

$$G^{+}(\mathcal{E}) = \lim_{\epsilon \to 0} G\left(\mathcal{E} + i\epsilon\right), \qquad G^{-}(\mathcal{E}) = \lim_{\epsilon \to 0} G\left(\mathcal{E} - i\epsilon\right).$$
(4.81)

son las funciones de Green retardadas y avanzadas respectivamente.

Usando la Ec. (4.79) y la identidad

$$\lim_{y \to 0} \frac{1}{x \pm iy} = P \frac{1}{x} \mp i\pi \delta(x), \qquad (4.82)$$

donde P representa la parte principal de la integral, podemos expresar la traza





Figura 4.7: Espectro ε como función del inverso del flujo magnético σ en presencia del campo eléctrico. La intensidad del campo eléctrico está caracterizada por $\varrho = 2bE/U_0 = 0$. 02. En este espectro se encuentran incluidos todos los niveles correspondientes a la zona magnética de Brillouin $k_1 \in [0, 2\pi/qb]$ y $k_2 \in [0, 2\pi/b]$. El espectro de la Mariposa de Hofstadter puede apreciarse para $\sigma \in [0, 1]$. En el intervalo $\sigma \in [1, 2]$ puede observarse todavía una réplica distorsionada del espectro de la mariposa. Para valores más grandes de σ el espectro de la mariposa es sustituido por un conjunto de niveles discretos separados en intervalos regulares.

de la función de Green como

$$N(\mathcal{E}) = \frac{i}{\pi} \operatorname{Tr} \bar{G}(\mathcal{E}) = \mp \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left[\operatorname{Tr} G^{\pm}(\mathcal{E}) \right] = \frac{i}{\pi} \sum_{k} \left\langle c_{k} \left| \bar{G} \right| c_{k} \right\rangle + \frac{i}{\pi} \int dk \, \left\langle c_{k} \left| \bar{G} \right| c_{k} \right\rangle$$
$$= \frac{i}{\pi} \sum_{k} \frac{1}{\mathcal{E} \pm i\epsilon - \mathcal{E}_{k}} + \frac{i}{\pi} \int dk \, \frac{1}{\mathcal{E} \pm i\epsilon - \mathcal{E}_{k}}$$
$$= \sum_{k} \delta(\mathcal{E} - \mathcal{E}_{k}) + \int dk \, \delta(\mathcal{E} - \mathcal{E}_{k}) \,. \quad (4.83)$$

Los últimos términos de esta ecuación corresponden a la densidad de estados, $N(\mathcal{E}) d\mathcal{E}$ da el número de estados que existen en el intervalo $[\mathcal{E}, \mathcal{E} + d\mathcal{E}]$.

TESIS CON FALLA DE ORIGEN

4.8. Fracciones Continuas

Como se afirmó previamente, cuando el campo eléctrico está presente, el caso más general de la ecuación de Harper asume la forma de una relación de recurrencia tridiagonal (4.13) infinita. El método de fracciones continuas es apropiado para resolver este tipo de relaciones de recurrencia [44]. En particular, puede utilizarse para hallar la función de Green que contiene la información sobre los eigenvalores y las eigenfunciones. El formalismo presentado en la sección 4.7 puede aplicarse directamente en el cálculo del espectro de la ecuación de Harper ya sea detectando los polos de la función de Green o por medio de la determinación de la densidad de niveles.

La función de Green de la Ec. (4.13) cumple con la condición (4.74) [44]

$$Q_n^+ G_{n+1,m} + Q_n G_{n,m} + Q_n^- G_{n-1,m} = -\delta_{n,m}, \qquad (4.84)$$

donde hemos definido

$$\hat{Q}_n = Q_n - \mathcal{E} - Ek_2 - \sigma b E \left(D_N + Nm I_N \right). \tag{4.85}$$

Si suponemos que $G_{M+1,n} = G_{-M-1,n} = 0$, donde M representa el punto en el que se trunca la relación de recurrencia, entonces la ecuación de Harper para la función de Green da lugar al siguiente sistema simultáneo de ecuaciones

Para resolver el conjunto de ecuaciones anterior introducimos dos matrices S_n^{\pm} de ascenso y descenso que conectan un elemento cualquiera de la función de Green $G_{n,m}$ con el siguiente $G_{n\pm 1,m}$

$$G_{n+1,m} = S_n^+ G_{n,m}, \qquad G_{n-1,m} = S_n^- G_{n,m}$$
(4.87)

y procedemos en forma recursiva. Comenzando por la primera y última ecuaciones de (4.86) escribimos

$$S_{M-1}^{+} = G_{M,m} \frac{1}{G_{M-1,m}} = -\frac{1}{\hat{Q}_{M}} Q_{M}^{-},$$

$$S_{1-M}^{-} = G_{-M,m} \frac{1}{G_{1-M,m}} = -\frac{1}{\hat{Q}_{M}} Q_{M}^{+}.$$
(4.88)





Las ecuaciones homogéneas restantes producen las siguientes relaciones de recurrencia para las matrices de ascenso y descenso

$$S_{n-1}^{+} = -Q_n^{-} \frac{1}{\hat{Q}_n + Q_n^{+} S_n^{+}}, \qquad S_{n+1}^{-} = -Q_n^{+} \frac{1}{\hat{Q}_n + Q_n^{-} S_n^{-}}.$$
 (4.89)

Las definiciones anteriores permiten calcular iterativamente las matrices de ascenso y descenso S_m^{\pm} correspondientes a la ecuación inhomogénea de (4.86). De este modo, la matriz de ascenso toma la forma

$$S_{M-2}^{+} = -Q_{M-1}^{-} \frac{1}{\hat{Q}_{M-1} - Q_{M-1}^{+} \frac{1}{\hat{Q}_{M}} Q_{M}^{-}},$$

$$S_{M-3}^{+} = -Q_{M-2}^{-} \frac{1}{\hat{Q}_{M-2} - Q_{M-2}^{+} Q_{M-1}^{-} \frac{1}{\hat{Q}_{M-1} - Q_{M-1}^{+} \frac{1}{\hat{Q}_{M}} Q_{M}^{-}},$$

$$\vdots$$

$$(4.90)$$

$$S_{m}^{+} = -Q_{m+1}^{-} \frac{1}{\hat{Q}_{m+1} - Q_{m+1}^{+} Q_{m+2}^{-} \frac{1}{\hat{Q}_{m+2} - \dots \frac{1}{\hat{Q}_{M}} Q_{M}^{-}}}$$

Análogamente, la matriz de descenso está dada por

$$S_{m}^{-} = -Q_{m-1}^{+} \frac{1}{\hat{Q}_{m-1} - Q_{m-1}^{-} Q_{m-2}^{+} \frac{1}{\hat{Q}_{m-2} - \dots \frac{1}{\hat{Q}_{-M}}}}.$$
 (4.91)

La ecuación inhomogénea en (4.86) toma entonces la forma [50]

$$\left(Q_m^- S_m^- + \hat{Q}_m + Q_m^+ S_m^+\right) G_{m,m} = -I_N, \qquad (4.92)$$

con lo que los términos de la función de Green que se encuentran sobre la diagonal quedan dados por

$$G_{m,m}(\mathcal{E}) = -\frac{1}{Q_m^- S_m^- + \hat{Q}_m + Q_m^+ S_m^+}$$
(4.93)

y aquellos que se encuentran fuera de ella pueden conocerse empleando iterativamente las Ecs. (4.87).

Para obtener la función de Green hemos truncado las Ec. (4.84) para |m| < M. La solución exacta del problema corresponde al caso en el que se toma el



Figura 4.8: Estructura de bandas en presencia de campo eléctrico como función de σ y ρ . Se muestra la densidad de estados para diferentes valores del campo eléctrico $\varrho = 2bE/U_0$ y del inverso del flujo del campo magnético σ como función de la energía ε y del pseudomomento k_2 . Se incluyen todos los estados del pseudomomento $k_1 \in [0, 2\pi/qb]$.

límite $M \to \infty$. Sin embargo, el método de fracciones continuas selecciona sólo aquella solución para $G_{n,m}$ que decrece rápidamente o que crece lentamente para n creciente. Esto garantiza la convergencia de la solución para valores suficientemente grandes de M. En los resultados que presentamos más adelante se seleccionó M = 100 con lo que se obtiene convergencia aproximadamente con siete cifras significativas. En el apéndice B se muestra el empleo del método en el cálculo del espectro para un electrón de Bloch en ausencia de campos.

Así, es posible calcular la función de Green para la ecuación de Harper en presencia de campo eléctrico por medio de la expresión (4.93) y las relaciones de recurrencia (4.90) y (4.91). Finalmente, por medio de los métodos descritos en la sección anterior, detectamos los eigenestados de energía en los polos de la función de Green y calculamos la densidad de niveles. Cabe mencionar que el método fue inicialmente probado reproduciendo los resultados descritos en las secciones anteriores para los casos en los que el campo eléctrico se anula.

El espectro obtenido al resolver la Ec. (4.23) puede observarse en la figura 4.7. En éste, los eigenvalores de la energía fueron encontrados detectando los cambios de signo en la función de Green calculada por medio de fracciones continuas. En este espectro se encuentran incluidos todos los niveles correspondientes a la zona magnética de Brillouin $k_1 \in [0, 2\pi/qb]$ y $k_2 \in [0, 2\pi/b]$. En la región de campo magnético intenso, $\sigma \in [0, 1]$, puede observarse el espectro de la mariposa de





Figura 4.9: Densidad de estados en presencia de campo eléctrico para $\sigma = 5/2$. (a) $\rho = 0.004$ y (b) $\rho = 0.02$.

Hofstadter. A medida que el campo magnético pierde intensidad y el efecto del campo eléctrico comienza a ser más importante, el espectro de la mariposa es sustituido por un conjunto de niveles discretos separados en intervalos regulares. Para el intervalo $\sigma \in [1, 2]$ puede observarse todavía una réplica distorsionada del espectro de la mariposa. Esto refleja el comportamiento de los dos extremos de la Ec. (4.23). Por un lado, cuando el campo magnético es muy intenso, $\sigma \to 0$ y $\varrho \to 0$, la Ec. (4.23) se reduce a la ecuación de Harper, por lo que en este régimen es natural observar el espectro de la Mariposa de Hofstadter. Por otro, cuando el campo magnético es débil $\sigma \to \infty$ y el coeficiente $\varrho \to \infty$ la relación de recurrencia (4.23) toma la forma

$$\left(\mathcal{E} + Ek_2 + \sigma b Em\right)c_m = 0 \tag{4.94}$$

De donde obtenemos, para valores fijos de k_2 , un espectro formado de niveles que se encuentran igualmente espaciados en múltiplos de $\sigma bE = 2\pi E/b$, es decir una escalera de Stark. Al variar el pseudomomento k_2 entre O y $2\pi/b$ se obtiene un espectro continuo. En este límite es importante notar que los eigenvalores de la energía son independientes del pseudomomento en k_1 . Además esperamos encontrar brechas energéticas entre cada una de estas bandas debido a la presencia del potencial bidimensional periódico.

Las figuras 4.8 y 4.9 son gráficas de densidad de la densidad de estados como función del pseudomomento k_2 y la energía ε . En éstas se incluyen los estados para todos los valores del pseudomomento k_1 . La densidad de estados fue calculada a partir de la discontinuidad de la función de Green obtenida por el método de fracciones continuas. Las regiones más oscuras indican altas densidades de estados y las blancas la ausencia de niveles de energía. En estas figuras puede observarse también que a medida que el campo magnético decrece ($\sigma \to \infty$) o el campo eléctrico se incrementa, las bandas de energía son reemplazadas por bandas más estrechas. De tal modo, se confirma el comportamiento del espectro en



los límites de campo eléctrico débil y campo eléctrico intenso. Los tres cuadros en la parte inferior de la figura 4.8 corresponden al límite de campo eléctrico cero por lo que se observan las dos bandas de la mariposa de Hofstadter en $\sigma = 1/2, 3/2, 5/2$. En los cuadros superiores de la misma figura observamos que a medida que se incrementa la intensidad del campo eléctrico (parámetro ϱ) el espectro toma la forma de un conjunto de bandas estrechas que no dependen del pseudomomento k_1 . Al variar el valor de k_2 el espectro se hace prácticamente continuo salvo por las pequeñas brechas que se forman entre las bandas. Estas se deben, como ya mencionamos, a la presencia del potencial periódico.

Es interesante observar que el efecto del campo eléctrico produce en algunos casos un cruzamiento exacto entre bandas, mientras que en otras da lugar a la repulsión entre niveles. Las figuras 4.8 y 4.9 muestran claramente este efecto, en general al aumentar la intensidad del campo eléctrico las bandas que originalmente se cruzan, tienden a repelerse. De acuerdo al teorema de Neumann-Wigner [51] el cruzamiento exacto entre niveles tendrá lugar entre estados que corresponden a diferentes grupos de simetría.

Tomando en cuenta la definición del parámetro que mide la intensidad del campo eléctrico ($\rho = 2bE/U_0$) y considerando una amplitud del potencial de la red dado por $U_0 = 0.6meV$, tenemos que los valores utilizados en los ejemplos anteriores $\rho = 0.004$ y $\rho = 0.02$ corresponden a E = 20V/cm y E = 100V/cm respectivamente, para el caso de un semiconductor típico con parámetro de red b = 0.5 nm; Klitzing, Dorda y Pepper [1] reportan E = 60V/cm en el umbral de la desaparición del efecto Hall cuántico. En el caso de una red artificial con parámetro de red b = 120nm los valores $\rho = 0.02$ y $\rho = 0.02$ corresponden a E = 0.1V/cm y E = 0.5V/cm respectivamente.

De los resultados anteriores se puede concluir que aún en presencia de campo eléctrico el espectro del problema de Bloch eléctrico-magnético posee estructura de bandas. A campos eléctricos débiles las bandas se agrupan formando el espectro de la mariposa de Hofstadter mientras que, cuando el campo eléctrico es intenso, se obtiene un espectro de bandas cuyos centros se encuentran igualmente espaciados a intervalos σbE . Por lo tanto es conveniente agregar índices que etiquetan a las bandas de energía y los correspondientes eigenvectores de la Ec. (4.40), es decir

$$H(k_1,k_2) d_{\alpha}(k_1,k_2) = \left(\mathcal{E}_{\alpha} + Ek_2 - iE\frac{\partial}{\partial k_1}\right) d_{\alpha}(k_1,k_2).$$
(4.95)

La condición de normalización (4.39) se escribe como

$$\int_{0}^{\frac{2\pi}{6^{*}}} d\phi \, d_{\alpha}^{*} \left(k_{1} + \phi, k_{2}\right) d_{\alpha'} \left(k_{1} + \phi, k_{2}\right) = \delta_{\alpha, \alpha'}. \tag{4.96}$$

En el próximo capítulo veremos que las bandas se pueden etiquetar por un invariante topológico, σ_{α}^{H} que resulta ser un número entero que permite calcular la contribución de cada banda a la conductividad de Hall.



4.9 Estructura de Bandas del Problema Eléctrico-Magnético de Bloch

4.9. Estructura de Bandas del Problema Eléctrico-Magnético de Bloch

En esta sección discutimos algunas de las propiedades de las bandas del problema eléctrico-magnético de Bloch.

Las funciones de onda (3.25) deben ser periódicas, excepto por una fase, en los extremos de la zona de Brillouin magnética. En particular $|\mathcal{E}, k_1, k_2 + 2\pi/b| = e^{if_2} |\mathcal{E}, k_1, k_2\rangle$. Si realizamos el cambio $k_2 \rightarrow k_2 + 2\pi/b$ en la función de onda (3.25) se obtiene

$$|k_{1}, k_{2} + 2\pi/b\rangle = \mathcal{W}(k_{1}) \sum_{\mu,m} e^{-i\sigma bk_{1}m} b_{m}^{\mu}(k_{1}, k_{2} + 2\pi/b) |\mu, \mathcal{E}, k_{2} + 2\pi (m+1)/b\rangle = e^{i\sigma bk_{1}} \mathcal{W}(k_{1}) \sum_{\mu,m} e^{-i\sigma bk_{1}m} b_{m-1}^{\mu}(k_{1}, k_{2}) |\mu, \mathcal{E}, k_{2} + 2\pi m/b\rangle.$$
(4.97)

Para que la función de onda en los extremos de la zona de Brillouin magnética difiera solamente en una fase, el coeficiente de la función de onda debe cumplir con

$$b_n^{\mu}(k_1, k_2 + 2\pi/b) = \sum_m C_{nm}^{(2)} b_m^{\mu}(k_1, k_2)$$
(4.98)

donde

$$C_{nm}^{(2)} = e^{if_2} \delta_{n,m+1}, \tag{4.99}$$

es decir, la matriz $C_{nm}^{(2)}$ recorre un lugar los elementos del vector de dimensión infinita b_m^{μ} . En la representación matricial introducida en la sección 4.3 esta relación toma la forma

$$d(k_1, k_2 - 2\pi/b) = C_2 d(k_1, k_2)$$
(4.100)

donde

$$C_2 = e^{if_2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$
 (4.101)

La matriz C_2 recorre cíclicamente un lugar los elementos del vector d_{μ}^{μ} en la

TESIS CON-
FALLA DE ORIGEN

forma

$$C_{2d} = e^{if_{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_{0} \\ d_{1} \\ d_{2} \\ d_{3} \\ \vdots \\ d_{p-2} \\ d_{p-1} \end{pmatrix} = e^{if_{2}} \begin{pmatrix} d_{p-1} \\ d_{0} \\ d_{1} \\ d_{2} \\ \vdots \\ d_{p-3} \\ d_{p-2} \\ d_{p-2} \end{pmatrix}$$
(4.102)

Esta matriz también recorre en forma cíclica los elementos de la matriz hamiltoniana. Ante esta transformación, los elementos Q_m^- , Q_m y Q_m^+ del hamiltoniano (4.37) se reorganizan en la forma

$$C_{2}H(k_{1},k_{2})C_{2}^{\dagger} = \begin{pmatrix} Q_{p-1} & Q_{p-1}^{+} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & Q_{p-1}^{-} \\ Q_{0}^{-} & Q_{0} & Q_{0}^{+} & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & Q_{1}^{-} & Q_{1} & Q_{1}^{+} & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ Q_{p-2}^{+} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & Q_{p-2}^{-} & Q_{p-2} \end{pmatrix}.$$
 (4.103)

De la Ec. (4.8) puede inferirse que la dependencia en k_2 del hamiltoniano está determinada por la fase $M_{rs}k_2$ de la Ec. (4.9) que es un múltiplo entero de σbk_2 . De estas ecuaciones también puede verse que los cambios $k_2 \rightarrow k_2 + 2\pi/b$ y $m \rightarrow m + 1$ son equivalentes. En otras palabras, aumentar el pseudomomento k_2 en $2\pi/b$ es equivalente a recorrer cíclicamente los elementos del hamiltoniano como en la Ec. (4.103). Por lo tanto

$$H(k_1, k_2 - 2\pi/b) = C_2 H(k_1, k_2) C_2^{\dagger}.$$
(4.104)

A través de estas mismas ideas es posible encontrar una simetría más general. Si hacemos el cambio $k_2 \rightarrow k_2 + 2\pi/qb$ en (4.9) obtenemos una fase adicional $M_{re}2\pi/qb$, que puede compensarse con un cambio de índice $m \rightarrow m + \Delta m$ tal que $q\Delta m + 1 = jp$, donde j es un número entero, de tal forma que el cambio total de fase $M_{re}k_2$ sea un múltiplo entero de 2π . Así, incrementar el pseudomomento k_2 en $2\pi/qb$ equivale a recorrer los elementos del vector d un número Δm de veces en forma cíclica. En lenguaje matricial se puede decir que

$$d(k_1, k_2 - 2\pi/qb) = C_2^{\Delta m} d(k_1, k_2),$$

$$H(k_1, k_2 - 2\pi/qb) = C_2^{\Delta m} H(k_1, k_2) C_2^{\dagger \Delta m}.$$
(4.105)

En general, la transformación C_2 es unitaria entonces los eigenvalores de $H(k_1, k_2)$ y de $C_2H(k_1, k_2)C_2^{\dagger}$ son iguales. Por lo tanto, en ausencia de campo eléctrico los eigenvalores de la energía son iguales en los extremos k_2 y $k_2 + 2\pi/b$ de la zona de Brillouin, de manera similar a lo que ocurre con los electrones de Bloch en





Figura 4.10: Energía como función de k_2 para $\sigma = q/5$. Se observa que los eigenestados tienen un periodo de $2\pi/qb$ por lo tanto tienen degeneración igual a q. Se incluyen todos los eigenvalores $k_1 \in [0, 2\pi/qb]$.

ausencia de campo magnético. Pero de acuerdo a (4.105), los estados $|k_1, k_2\rangle$ y $|k_1, k_2 + 2\pi/gb\rangle$ tienen la misma energía.

Por lo tanto la energía, en ausencia de campo eléctrico, tiene degeneración igual a q. En la figura 4.10 se muestran los eigenvalores de la energía ε para $\sigma = q/5$ con q = 1, 2, 3, 4 como función del pseudomomento k_2 . Se observa que la energía es periódica y que tiene un período de $2\pi/qb$, la degeneración de cada banda es q.

La transformación $k_1 \rightarrow k_1 + 2\pi/qb$ da resultados similares. En este caso $b_{\mu}^{\mu}(k_1 + 2\pi/qb, k_2) = \sum_m C_{mn}^{(1)} b_{\mu}^{\mu}(k_1, k_2)$ donde $C_{mn}^{(1)} = \exp(-i2\pi m/p)$. En la representación matricial de la sección 4.3

$$d(k_1 - 2\pi/qb, k_2) = C_1 d(k_1, k_2), \qquad (4.106)$$

donde C_1 , que se obtiene a partir de C_2 aplicando una rotación magnética a 90°, está dada por

$$C_{1} = e^{if_{1} - if_{2}} \mathcal{R}C_{2} \mathcal{R}^{\dagger} = e^{if_{1}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{-i2\pi\frac{1}{p}} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i2\pi\frac{2}{p}} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & e^{-i2\pi\frac{p-1}{p}} \end{pmatrix}.$$
 (4.107)

La energía no es el único observable que posee esta periodicidad. Cualquier



elemento de matriz $O_{\alpha\alpha'} = d^{\dagger}_{\alpha}Od_{\alpha'}$ de un operador local es invariante, ya que

$$O_{\alpha\alpha'}(k_1 - 2\pi/qb, k_2) = d^{\dagger}_{\alpha}(k_1 - 2\pi/qb, k_2) Od_{\alpha'}(k_1 - 2\pi/qb, k_2) = d^{\dagger}_{\alpha}(k_1, k_2) C^{\dagger}_{1}C_1 OC^{\dagger}_{1}C_1 d_{\alpha'}(k_1, k_2) = O_{\alpha\alpha'}(k_1, k_2). \quad (4.108)$$

Sin embargo, un operador de la forma $-i\partial/\partial k_1$ se transforma dando lugar a un término que se puede interpretar como un potencial vectorial

$$-d^{\dagger}_{\alpha}(k_{1}-2\pi/qb,k_{2})i\frac{\partial}{\partial k_{1}}d_{\alpha'}(k_{1}-2\pi/qb,k_{2})$$

$$=-d^{\dagger}_{\alpha}(k_{1},k_{2})C^{\dagger}_{1}i\frac{\partial}{\partial k_{1}}C_{1}d_{\alpha'}(k_{1},k_{2})$$

$$=-d^{\dagger}_{\alpha}(k_{1},k_{2})i\frac{\partial}{\partial k_{1}}d_{\alpha'}(k_{1},k_{2})+\frac{\partial f_{1}}{\partial k_{1}}\delta_{\alpha\alpha'}, \quad (4.109)$$

donde f_1 es la fase de la matriz C_1 . Entonces, los elementos de matriz de la diagonal no son periódicos mientras que los no diagonales si lo son. Estos resultados pueden ser repetidos en forma análoga para el pseudomomento k_2 .

La Ec. (4.109) tiene importantes consecuencias en las propiedades de transporte de este sistema y en gran parte es responsable de la cuantización de la conductividad de Hall como veremos en el capítulo 6.

4.10. Aproximación Adiabática

Consideremos la solución de la ecuación general Ec. (4.95) utilizando la aproximación adiabática. Si el campo eléctrico es apagado dicha ecuación se reduce a una ecuación de eigenvalores de dimensión finita

$$H(k_1, k_2) b_{\alpha}(k_1, k_2) = \mathcal{E}^0_{\alpha}(k_1, k_2) b_{\alpha}(k_1, k_2), \qquad (4.110)$$

donde α es el índice de banda. Se puede obtener la solución para la Ec. (4.95) en la aproximación adiabática en la forma

$$d_{\alpha}(k_{1},k_{2}) = \exp\left\{-i\left[\frac{\mathcal{E}_{\alpha}(k_{1},k_{2})}{E} + k_{2}\right]k_{1} + i\frac{1}{E}\int_{0}^{k_{1}}d\phi \,\mathcal{E}_{\alpha}^{0}(\phi,k_{2}) + i\gamma(k_{1},k_{2})\right\}b_{\alpha}(k_{1},k_{2}), \quad (4.111)$$

donde la fase de Berry $\gamma(k_1, k_2)$ se determina de la sustitución de esta expresión en la Ec. (4.95) como se muestra a continuación

$$\gamma(k_1,k_2) = i \int_0^{k_1} d\phi \ b^{\dagger}_{\alpha}(\phi,k_2) \frac{\partial}{\partial \phi} b_{\alpha}(\phi,k_2) . \qquad (4.112)$$

El eigenvalor de la energía se determina aplicando la condición de que la función de onda debe ser la misma cuando k_1 cambia por $2\pi p/qb = b$, como vimos en



la sección anterior. Entonces, el cambio en la fase de la función (4.111) debe ser un múltiplo entero de 2π y consecuentemente el espectro en la aproximación adiabática está dado por

$$\mathcal{E}_{\alpha}(k_{2}) = \sigma b E m - E k_{2} + \frac{1}{b} \int_{0}^{b} d\phi \, \mathcal{E}_{\alpha}^{0}(\phi, k_{2}) + \frac{E}{b} \int_{0}^{b} d\phi \, b_{\alpha}^{\dagger}(\phi, k_{2}) \frac{\partial}{\partial \phi} b_{\alpha}(\phi, k_{2}), \quad m = 0, \pm 1, \dots \quad (4.113)$$

El criterio de validez para la aproximación adiabática se obtiene de requerir a la probabilidad de encontrar al sistema en un eigenestado distinto del original que sea mucho menor que uno [52]. En el límite en el que el acoplamiento entre los niveles de Landau es bajo, la probabilidad de encontrar al sistema en otro eigenestado es el cociente de la razón de cambio de los eigenvectores $b_{\alpha}(k_1, k_2)$ con respecto a k_1 (que es aproximadamente bE) entre la diferencia de energía entre las sub-bandas de los niveles de Landau (que es del orden de la amplitud del potencial periódico)

$$\frac{bE}{U_0} \ll 1, \tag{4.114}$$

donde U_0 es la amplitud del potencial periódico.

Los últimos resultados merecen algunos comentarios. El espectro de energías en presencia de campo eléctrico y magnético contiene una serie de niveles discretos separados por

$$\Delta \mathcal{E} = \sigma b E = \frac{2\pi E}{bB}.$$
(4.115)

Estos niveles son similares a los de Wannier, que están igualmente espaciados con separación bE. En el caso presente, la estructura de bandas del problema magnético de Bloch es reemplazada por un conjunto de niveles discretos. La existencia de estos niveles puede explicarse por medio del siguiente argumento. En presencia de campos magnético y eléctrico B y E, el electrón viaja entre dos puntos de la red en un tiempo $\tau = bB/E$. Mientras el electrón no haga efecto túnel a otra banda, el movimiento parecerá periódico en la red recíproca con una frecuencia $\omega = 2\pi/\tau$ que corresponde a una serie de niveles de energía cuya separación es $\Delta \mathcal{E} = \hbar\omega$. Esto reproduce el resultado de (4.115).

Esta escalera de Stark se combina con el espectro de Hofstadter representado por el tercer término de la Ec. (4.113). La tercera contribución, proveniente de la fase de Berry, fue analizada originalmente por Thouless [19] en el contexto del efecto Hall cuántico. Thouless encontró que surge una estructura similar al aplicar la fórmula de Kubo para el caso del efecto Hall cuántico. Aquí estudiamos su efecto en el espectro del electrón. Definimos el potencial vectorial en el espacio de los pseudomomentos como

$$\mathcal{A}_{\alpha}(\mathbf{k}) = i b_{\alpha}^{\dagger}(k_1, k_2) \nabla_{\mathbf{k}} b_{\alpha}(k_1, k_2), \qquad (4.116)$$

entonces, la energía puede reescribirse como

$$\mathcal{E}_{\alpha}\left(k_{2}\right)=\sigma bEm-Ek_{2}+\frac{1}{b}\int_{0}^{b}dk_{1}\ \mathcal{E}_{\alpha}^{0}\left(\boldsymbol{k}\right)+\frac{1}{b}\int_{0}^{b}dk_{1}\ \boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\alpha}\left(\boldsymbol{k}\right).$$
 (4.117)



Regresaremos a este resultado más adelante cuando consideremos la corriente de Hall.

a produktion and a state of the

 $\bullet_1 \in \mathbb{R}$

DE ORIGEN

79

Capítulo 5

Paquetes de Ondas y Fenómenos de Dispersión

5.1. Introducción

Recientemente se han conseguido notables logros en la fabricación de redes artificiales de antipuntos cuánticos en heterojunturas de semiconductores (sección 1.4)[15, 30]. Estos sistemas son de gran interés en el estudio experimental de la mecánica cuántica de sistemas clásicamente caóticos (caos cuántico). Las redes de antipuntos cuánticos en heterojunturas son además buenas aproximaciones experimentales del problema de Bloch magnético. Este es clásicamente caótico y cuasiperiódico cuando el flujo magnético por unidad de celda en unidades de ϕ_0 es irracional [53]. Esto da lugar a una serie de interesantes fenómenos de localización electrónica inducida por las características fractales del espectro y por el cruzamiento frustrado de bandas. Estudiaremos algunos de estos fenómenos por medio de la evolución de un paquete de ondas.

Los rasgos generales del espectro permiten inferir el tipo de movimiento que experimenta el paquete de ondas. Cuando el espectro adopta una estructura de bandas la función de onda del electrón tiende a ser extendida, mientras que si el espectro consiste de un conjunto de niveles discretos los electrones se localizan.

Para estudiar la evolución de un paquete de ondas presentamos primero el procedimiento general para obtener la densidad de probabilidad y los valores esperados de la dispersión del paquete como funciones del tiempo. A través de este método estudiamos la dispersión de un paquete para varios valores de los parámetros más relevantes del problema.

5.2. Evolución de Paquetes de Onda

Una base conveniente para estudiar la evolución de un paquete de ondas en el problema de Bloch eléctrico-magnético es la formada por funciones de tipo





Figura 5.1: Densidad de probabilidad de algunas de las funciones de onda de la base $\psi_{\mu,\nu}(x, y)$ graficadas en el intervalo $x \in [-5, 5]$, $y \in [-5, 5]$. Se muestra la superficie correspondiente a 10 × 10 celdas unitarias.





Figura 5.2: Fenómenos de localización debidos a la irracionalidad de σ . Se muestra la evolución de la función de onda $\Psi(t, x, y)$ del paquete sobre un potencial bidimensional periódico. El estado inicial es $\psi_{1,0}(x, y)$. Se muestra un cuadro de 40×40 celdas unitarias. Los parámetros en cada caso están dados por K = 5, $\lambda = 1, E = 0$, (a) $\sigma = 1/2$ y (b) $\sigma = (\sqrt{5} - 1)/2$. Para σ racional el paquete de ondas se difunde con mayor rapidez que para σ dada por la razón dorada.

oscilador armónico definidas por

$$A^{\dagger}A |\mu,\nu\rangle = \mu |\mu,\nu\rangle, \qquad B^{\dagger}B |\mu,\nu\rangle = \nu |\mu,\nu\rangle, \qquad (5.1)$$

donde

$$A = \frac{1}{\sqrt{2}} (P_1 - iQ_1), \qquad B = \frac{1}{\sqrt{2}} (P_2 - iQ_2). \qquad (5.2)$$

Los operadores de ascenso A^{\dagger} y descenso A fueron originalmente introducidos en la Ec. (2.36). Análogamente B^{\dagger} y B son los operadores de ascenso y descenso definidos en (2.49). Estos operadores están asociados al momento angular de acuerdo con la definición (2.48) en la que el generador de rotaciones se escribe como $\mathcal{J} = A^{\dagger}A - B^{\dagger}B$. Es fácil verificar que los vectores $|\mu, \nu\rangle$ son eigenestados del momento angular con eigenvalores dados por

$$\mathcal{J} |\mu, \nu\rangle = (\mu - \nu) |\mu, \nu\rangle.$$
(5.3)

Esta base tiene la particularidad de estar compuesta de funciones de onda que se encuentran localizadas en el origen por lo que resulta útil para estudiar la evolución de paquetes inicialmente localizados. La forma explícita de estos estados en la representación de coordenadas espaciales puede obtenerse por medio de la transformación unitaria

$$\mathcal{U} = e^{-iP_1 P_2} e^{iQ_1 Q_2} \tag{5.4}$$





Figura 5.3: Localización para $\sigma = \gamma_{\mu}$. Se muestra la evolución de la función de onda $\Psi(t, x, y)$ del paquete sobre un potencial bidimensional periódico. El estado inicial es $\psi_{1,0}(x, y)$. Los valores de los parámetros son $\sigma = 1/\pi$, $\lambda = 1$, E = 0y (a) K = 1, (b) K = 5 y (c) K = 10. Se muestra un cuadro de 40 × 40 celdas unitarias. Los cuellos formados por el espectro en las raíces de los polinomios de Laguerre, inducen localización cuando el acoplamiento entre los niveles de Landau es despreciable (K = 1). A medida que el acoplamiento se intensifica, el espectro deja de colapsarse en los cuellos y el electrón se deslocaliza.

que es similar a (2.32). Esta transformación conecta a las representaciones (Q_{μ}, P_{μ}) y (x_{μ}, p_{μ}) en el caso particular en el que los parámetros de la norma toman los valores $\beta_0 = 3/2$ y $\beta_1 = \beta_2 = -1/2$, como puede verificarse de las Ecs. (2.34). La relación entre ambas representaciones está dada por

$$|x,y\rangle = \mathcal{U} |x,y\rangle_{O}, \qquad (5.5)$$

donde $|x, y\rangle$ es un eigenestado del operador de posición y $|x, y\rangle_Q$ es un eigenvector de Q_1 y Q_2 de tal forma que cumple con

$$Q_1 |x, y\rangle_{\mathcal{O}} = x |x, y\rangle_{\mathcal{O}}, \qquad Q_2 |x, y\rangle_{\mathcal{O}} = y |x, y\rangle_{\mathcal{O}}. \tag{5.6}$$

En la representación de coordenadas las funciones de onda toman la forma

$$\psi_{\mu,\nu}\left(x,y\right) = \left\langle x,y \left| \mu,\nu \right\rangle =_{Q} \left\langle x,y \right| \mathcal{U}^{\dagger} \left| \mu,\nu \right\rangle.$$
(5.7)

Insertando una base completa en la ecuación anterior obtenemos que la función de onda en el espacio de coordenadas se expresa como

$$\psi_{\mu,\nu}(x,y) = \int dx' dy' Q \langle x,y | \mathcal{U}^{\dagger} | x',y' \rangle_{Q} Q \langle x',y' | \mu,\nu \rangle.$$
 (5.8)





Figura 5.4: Direcciones de mayor y menor modulación del potencial periódico. La dirección de menor modulación del potencial periódico $U_0 [\cos(2\pi x/a) + \lambda \cos(2\pi y/a)]$ está indicada con una flecha. (a) Con $\lambda = 2$ la dirección de menor modulación es a lo largo del eje x, (b) $\lambda = 1$ las dos direcciones tienen la misma modulación y (c) $\lambda = 1/2$ la dirección de menor modulación es de eje y.

El último braket es el producto de las funciones de onda de oscilador armónico en el espacio de Q_1 y Q_2 dadas por

$$_{Q}\langle x, y | \mu, \nu \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi \nu! \mu! 2^{\mu+\nu}}} e^{-(x^{2}+y^{2})} H_{\mu}(x) H_{\nu}(y), \qquad (5.9)$$

donde $H_{\mu}(x)$ es un polinomio de Hermite de orden μ . Sustituyendo (5.9) en (5.8) y llevando a cabo la integral obtenemos la forma explícita de las funciones de onda como

$$\psi_{\mu,\nu}(x,y) = \frac{e^{-(x^2+y^2)/4}}{\sqrt{2\pi}} \begin{cases} \varphi_{\mu,\nu}(x,y), & \mu \le \nu, \\ \varphi_{\nu,\mu}(y,x), & \nu \le \mu, \end{cases}$$
(5.10)

donde

$$\varphi_{\mu,\nu}(x,y) = i^{\nu} \sqrt{\frac{2^{\mu} \mu!}{2^{\nu} \nu!}} (x+iy)^{\nu-\mu} L_{\mu}^{\nu-\mu} \left[\frac{(x^2+y^2)}{2} \right], \qquad (5.11)$$

y L^{ν}_{μ} es el polinomio asociado de Laguerre de orden μ y de grado ν . En la figura 5.1 pueden verse las primeras 15 funciones de onda de la base. Debido a la exponencial decreciente en (5.10) las funciones $\psi_{\mu,\nu}(x, y)$ están localizadas alrededor del origen. Además, a medida que los índices μ y ν aumentan también lo hace la dispersión media de la función de onda. Esto puede utilizarse como un criterio burdo de convergencia; en la expansión de la función de onda de un paquete es necesario incluir al menos aquellas funciones de onda cuyo radio medio sea equiparable con la dispersión media del paquete.

Para calcular la dependencia temporal de la función de onda del paquete seguimos el siguiente procedimiento. Suponemos que el paquete de ondas inicial coincide con alguno de los estados $\psi_{\mu,\nu}(x,y)$. Como ejemplo seleccionamos fenómenos que ocurren a energías aproximadamente iguales a la del primer nivel de Landau, para lo que partimos del estado $\psi_{1,0}(x,y)$. La función de onda en cualquier momento puede obtenerse del operador de evolución temporal





Figura 5.5: Espectro como función del acoplamiento entre los niveles de Landau K para $\sigma = 55/89$ y $\lambda = 1.25$. Se muestran los estados correspondientes al conjunto de pseudomomentos $k_1 \in [0, 2\pi/qb]$ y $k_2 = 0$. En la figura de la izquierda se ve la estructura de sub-bandas de los tres primeros niveles de Landau y en la derecha se muestra una amplificación del segundo nivel de Landau. Aproximadamente en K = 7.5 ocurre una transición entre una estructura de bandas (K < 7.5) y un espectro de niveles discretos (K > 7.5).

 $O(t) = \exp(-itH)$ actuando sobre el estado inicial del paquete $|\mu, \nu\rangle$

$$\Psi(t, x, y) = \langle x, y | O(t) | \mu, \nu \rangle, \qquad (5.12)$$

donde H es el hamiltoniano (2.38) dado por

$$H = A^{\dagger}A + \frac{1}{2} + V(Q_1 - P_2, Q_2 - P_1) - EP_2.$$
 (5.13)

Para el potencial V(x, y) utilizamos la forma (2.9) dada por

$$V = U_0 \left[\cos \left(2\pi \frac{Q_1 - P_2}{a} \right) + \lambda \cos \left(2\pi \frac{Q_2 - P_1}{a} \right) \right], \tag{5.14}$$

donde es importante recordar que $x = Q_1 - P_2$ y $y = Q_2 - P_1$. Los elementos de matriz del hamiltoniano en la base de $|\mu,\nu\rangle$ están dados por

$$\mathfrak{H}_{\nu'\nu}^{\mu'\mu} = \langle \mu', \nu' | H | \mu, \nu \rangle \\
= \delta_{\mu',\mu} \left[\left(\mu + \frac{1}{2} \right) \delta_{\nu',\nu} - \sqrt{\nu'} \tilde{E} \delta_{\nu',\nu+1} - \sqrt{\nu} \tilde{E}^* \delta_{\nu'+1,\nu} \right] \\
\frac{\sigma K}{4 \left(\lambda + 1 \right)} \left[D_{\mu',\mu} \left(\sqrt{\pi \sigma} \right) D_{\nu',\nu} \left(-i \sqrt{\pi \sigma} \right) + \lambda D_{\mu',\mu} \left(-i \sqrt{\pi \sigma} \right) D_{\nu',\nu} \left(\sqrt{\pi \sigma} \right) + \mathrm{c.c.} \right], \quad (5.15)$$



Figura 5.6: Localización por cruzamiento frustrado de bandas. Se muestra la evolución de la función de onda $\Psi(t, x, y)$ del paquete sobre un potencial bidimensional periódico. El estado inicial es $\psi_{1,0}(x, y)$. Los valores elegidos para los parámetros son con $\sigma = 55/89$, $\lambda = 1 \cdot 25 y$ (a) K = 5 (b) K = 10. Se muestra un cuadro de 40 × 40 celdas unitarias. Cuando $K < 7 \cdot 5$ el electrón se dispersa en forma balística a lo largo de la dirección de menor modulación. Para $K > 7 \cdot 5$ el electrón se dispersa balísticamente también en la dirección de mayor modulación.

donde $D_{\mu',\mu}(z)$ es el elemento de matriz del generador de estados coherentes del apéndice C.1, K es el parámetro adimensional definido en (4.19), el número complejo \tilde{E} está dado por

$$\tilde{E} = \frac{K}{\sqrt{\pi} \left(\lambda + 1\right)} \left(E_x + iE_y\right) \tag{5.16}$$

y E_x y E_y son las componentes del campo eléctrico. Los primeros tres términos de (5.15) corresponden a las contribuciones de los niveles de Landau y del campo eléctrico. Los últimos cuatro términos provienen del potencial periódico. Los elementos del hamiltoniano escritos así están dados en unidades de $\hbar\omega_c$. La matriz (5.15) es diagonalizada numéricamente obteniéndose los eigenvalores de la energía $\mathcal{E}_{\mu,\nu}$ y los eigenvectores $\mathbb{C}_{\mu,\nu}$ correspondientes al problema de eigenvalores

$$\sum_{\mu=0}^{\mu_{\max}} \sum_{\nu=0}^{\nu_{\max}} \mathbf{H}_{\nu',\nu}^{\mu'} \mathcal{C}_{\mu,\nu} = \mathcal{E}_{\mu',\nu'} \mathcal{C}_{\mu',\nu'}.$$
(5.17)

Para conseguir convergencia en los intervalos de tiempo considerados es suficiente incluir elementos para $\mu_{max} = 4$ y $\nu_{max} = 600$. Se obtiene la matriz unitaria U que diagonaliza al hamiltoniano

$$\mathbf{E} = \mathbf{U} \mathbf{H} \mathbf{U}^{\mathsf{T}}, \tag{5.18}$$

donde E es una matriz diagonal cuyos elementos son los eigenvalores de la energía $\mathcal{E}_{\mu,\nu}$. En esta representación, el operador de evolución temporal puede calcularse





Figura 5.7: Espectro de los dos primeros niveles de Landau como función del pseudomomentos k_2 para $\lambda = 2$, K = 5, (a) $\sigma = 1/2$ y E = 0.04, (b) $\sigma = 5/2$ y E = 0.04, (c) $\sigma = 1/2$ y E = 2. Cuando σ es un número pequeño y el campo eléctrico es menor que 1 el espectro tiene una estructura de bandas. Si σ es grande el espectro se distorsiona dando lugar a un conjunto de niveles discretos que pueden o no cruzarse. En el límite de campo eléctrico intenso se observa la estructura de bandas tipo escalera de Stark para valores fijos de k_2 .

explícitamente como

$$\mathbb{O}(t) = \mathbb{U}^{\dagger} \exp\left(-it\mathbb{E}\right) \mathbb{U}, \tag{5.19}$$

donde el término exp $(-it\mathbf{E})$ es la matriz diagonal cuyos elementos son exp $(-it\mathcal{E}_{\mu,\nu})$. El vector a cualquier tiempo dado puede calcularse como

$$\mathbb{C}(t) = \mathbb{O}(t) \mathbb{C}(0), \qquad (5.20)$$

donde $\mathbb{C}(0)$ es el vector inicial. En los casos considerados, $\mathbb{C}_{\mu,\nu}(0) = \delta_{\mu,1}\delta\nu, 0$ que corresponde a la función de onda $\psi_{1,0}(x, y)$. Una vez calculado el vector $\mathbb{C}(t)$, la evolución temporal de la función de onda se obtiene como

$$\Psi(t, x, y) = \sum_{\mu=0}^{\mu_{\max}} \sum_{\nu=0}^{\nu_{\max}} \mathbb{C}_{\mu\nu}(t) \psi_{\mu,\nu}(x, y).$$
 (5.21)

La representación (5.21) permite también calcular el valor esperado de la dispersión del paquete $\sigma_x(t)$ a lo largo del eje x y $\sigma_y(t)$ a lo largo del eje y como

$$\sigma_x(t) = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}, \qquad \sigma_y(t) = \sqrt{\langle y^2 \rangle - \langle y \rangle^2}, \qquad (5.22)$$



donde

$$x\rangle = \sum_{\mu,\mu'=0}^{\mu_{\max}} \sum_{\nu,\nu'=0}^{\nu_{\max}} \mathbb{C}^{*}_{\mu',\nu'}\left(t\right) \left(\mathbf{X}\right)_{\mu',\mu}^{\nu',\nu} \mathbb{C}_{\mu,\nu}\left(t\right),$$
(5.23)

$$\langle x^2 \rangle = \sum_{\mu,\mu'=0}^{\mu_{\max}} \sum_{\nu,\nu'=0}^{\nu_{\max}} \mathbf{C}^*_{\mu',\nu'}\left(t\right) \left(\mathbf{X}^2\right)_{\mu',\mu}^{\nu',\nu} \mathbf{C}_{\mu,\nu}\left(t\right),$$
(5.24)

$$\langle y \rangle = \sum_{\mu,\mu'=0}^{\mu_{\max}} \sum_{\nu,\nu'=0}^{\nu_{\max}} \mathbb{C}^{\nu}_{\mu',\nu'}(t) (\mathbb{Y})^{\nu',\nu}_{\mu',\mu} \mathbb{C}_{\mu,\nu}(t)$$
(5.25)

$$\langle y^{2} \rangle = \sum_{\mu,\mu'=0}^{\mu_{\max}} \sum_{\nu,\nu'=0}^{\nu_{\max}} \mathbb{C}_{\mu',\nu'}^{*}(t) \left(\mathbb{Y}^{2} \right)_{\mu',\mu}^{\nu',\nu} \mathbb{C}_{\mu,\nu}(t)$$
(5.26)

y los elementos de matriz de X y Y están dados por

$$\mathbf{X}_{\mu',\mu}^{\nu',\nu} = \langle \mu',\nu' \mid x \mid \mu,\nu \rangle = i\sqrt{2\mu}\delta_{\mu'+1,\mu}\delta_{\nu',\nu} - \sqrt{2\nu}\delta_{\mu',\mu}\delta_{\nu'+1,\nu} + \text{c.c.}, \quad (5.27)$$

$$\mathfrak{Y}_{\mu',\mu}^{\nu',\nu} = \langle \mu',\nu' \mid y \mid \mu,\nu \rangle = \sqrt{2\mu} \delta_{\mu'+1,\mu} \delta_{\nu',\nu} + i\sqrt{2\nu} \delta_{\mu',\mu} \delta_{\nu'+1,\nu} + \text{c.c.} \quad (5.28)$$

5.3. Resultados

Consideramos el comportamiento de un paquete inicialmente localizado dado por la función de onda $\psi_{1,0}(x, y)$ bajo diferentes valores de los parámetros relevantes del sistema.

5.3.1. Localización Inducida por el Parámetro σ

El parámetro σ puede inducir estados localizados o deslocalizados del electrón en dos formas distintas. En la primera se distinguen los casos en que el inverso del flujo magnético σ es racional e irracional. Cuando σ es un número racional q/p el espectro se compone de exactamente p bandas separadas por p-1brechas. Para σ irracional, el espectro puede aproximarse truncando en el término n la expansión de σ en fracciones continuas en el aproximante q_n/p_n . Si la aproximación al número irracional es buena p_n debe ser un número grande. En este caso esperamos encontrar un gran número de niveles discretos en lugar de bandas. En la figura 5.2 se comprueba que para σ racional ($\sigma = 1/2$) el paquete se difunde con mayor rapidez que para σ irracional [$\sigma = (\sqrt{5} - 1)/2$, la razón dorada].

Otra forma de inducir localización en la función de onda del electrón es seleccionando $\sigma = \gamma_{\mu}/\pi$, donde γ_{μ} es un cero de los polinomios de Laguerre. Cuando el acoplamiento entre los niveles de Landau es pequeño las sub-bandas en que se divide cada nivel de Landau sufren angostamientos en dichos puntos (sección 4.4). La estructura de bandas del segundo nivel de Landau se colapsa en un solo punto cuando $\gamma_1 = \pi \sigma \ y \ \gamma_1$ es la raíz de $L_1(\pi \sigma)$. El tercer nivel de Landau se colapsa en las dos raíces $\pi \sigma = \gamma_1 \ y \ \pi \sigma = \gamma_2$ del polinomio de Laguerre



 $L_2(\pi\sigma)$ y así sucesivamente. De esta forma, un paquete $\psi_{1,0}$, cuya energía media es aproximadamente la del primer nivel de Landau, permanecerá localizado si $\sigma = \gamma_1/\pi$. Sin embargo, como se observa en la figura 4.3 dichos angostamientos o cuellos en el espectro desaparecen a medida que el acoplamiento entre niveles de Landau K se incrementa. En la figura 5.3 observamos que si el acoplamiento entre los niveles de Landau es despreciable (K = 1), el electrón permanece localizado. Una vez que el acoplamiento se hace más intenso (K = 5 y K = 10), los paquetes tienden a dispersarse con mayor rapidez, en concordancia con lo observado para el espectro.

5.3.2. Localización Inducida por Cruzamiento Frustrado de Bandas

Geisel [43, 54] y sus colaboradores analizaron la dispersión de un paquete en una dimensión caracterizada por la ecuación de Harper (4.5). Demostraron que $\lambda = 1$ representa un caso crítico en el que la función de onda del electrón pasa de estar localizada a estar deslocalizada. En nuestro caso λ representa la anisotropía del potencial periódico bidimensional. Si la modulación del potencial es igual en las direcciones x y y ($\lambda = 1$) el paquete se dispersa isotrópicamente (figura 5.4).

Cuando $\lambda > 1$ la dirección de menor modulación del potencial se encuentra a lo largo del eie x v para $\lambda < 1$ a lo largo del eie y. En las figuras 5.5 y (5.6) presentamos el espectro y la evolución del paquete para $\lambda = 1.25$. Debido a que la modulación del potencial es menor en la dirección x, esperamos que el paquete se disperse preferentemente en dicha dirección. Este comportamiento se observa claramente en la figura 5.6a correspondiente a un acoplamiento entre niveles de Landau dado por K = 5. Sin embargo al incrementar el acoplamiento entre niveles de Landau (K = 10) observamos en la figura 5.6b que el paquete se dispersa en ambas direcciones, a pesar de la anisotropía del potencial. Dicho comportamiento se explica por la transición del espectro en el punto K = 7.5correspondiente a un cruce frustrado de bandas. Para K < 7.5 se observa una estructura de bandas mientras que para K > 7.5 y k_2 fijo se tiene un espectro de niveles cuasidiscretos. En el espectro de la figura 5.5 se incluyen los estados correspondientes al conjunto de todos los pseudomomentos $k_1 \in$ $[0, 2\pi/qb]$ mientras que se mantiene fijo $k_2 = 0$. Si por el contrario se incluyen los estados correspondientes al conjunto de pseudomomentos $k_1 = 0$ y $k_2 \in$ $[0, 2\pi/gb]$ el espectro muestra bandas para K > 7.5 y niveles discretos para K < 1007.5.[53] En estas condiciones esperamos que el paquete se disperse balísticamente a lo largo del eje x para K < 7.5. Sin embargo, para K > 7.5 las bandas del segundo nivel de Landau se transforman en un conjunto de niveles discretos dando lugar a una tendencia a producir estados localizados a lo largo de x. En la figura 5.6 vernos que para K > 7.5 el paquete se desplaza en ambas direcciones ya que existe una contribución a la dispersión del electrón en la dirección x, debida a las sub-bandas contiguas que no presentan discretización.





Figura 5.8: Localización dinámica. Se muestra la evolución de la función de onda $\Psi(t,x,y)$ del paquete sobre un potencial bidimensional periódico. El estado inicial es $\psi_{1,0}(x,y)$ yen todos los casos $\lambda = 2, K = 5$. Se muestra un cuadro de 40×40 celdas unitarias. (a) En la región de campo magnético intenso ($\sigma = 1/2$ y E = 0.04) el paquete se dispersa en la dirección de menor modulación en forma balística. (b) En la región intermedia ($\sigma = 2.5$ y E = 0.04) el paquete comienza a dispersarse en la dirección perpendicular a E. (c) Para el caso de campo eléctrico intenso ($\sigma = 1/2$ y E = 2) el paquete se propaga y dispersa en la dirección de deriva, mientras que presenta localización dinámica en la dirección longitudinal.

5.3.3. Localización Dinámica

En el capítulo anterior encontramos que la superposición de los campos magnético y eléctrico da lugar a un espectro que que se sitúa entre la estructura de bandas del problema de Bloch magnético y el espectro tipo escalera de Stark. El último se obtiene en el límite de campo eléctrico intenso y consiste, para k_2 fijo, de bandas estrechas uniformemente espaciadas separadas por pequeñas brechas. En la figura 5.7 se muestran los espectros de los dos primeros niveles de Landau en los límites de campo magnético intenso (figura 5.7a), intermedio (figura 5.7b) y campo eléctrico intenso (figura 5.7c). Para el límite de campo magnético intenso con $\sigma = 1/2$ se obtiene que cada nivel de Landau se divide en dos bandas. En la situación intermedia ($\sigma = 5/2$ y E = 0.04) cada nivel de Landau en el límite de campo eléctrico intenso ($\sigma = 5/2$ y E = 2) obtenemos niveles que, para k_2 fijo, son prácticamente discretos. Estudiamos la dispersión de un paquete para cada uno de estos casos. En el límite de campo magnético





Figura 5.9: Dispersión media a lo largo de los ejes x y y como función del tiempo para $\lambda = 2$, K = 5. (a) En el régimen de campo magnético intenso ($\sigma = 1/2$ y E = 0. 04) la dispersión a lo largo de la dirección de menor modulación es de tipo balístico y en la dirección perpendicular el paquete se dispersa lentamente. (b) En la región intermedia ($\sigma = 2.5 y E = 0.04$) se intercambian los comportamientos de las dispersiones. (c) Cuando predomina el efecto del campo eléctrico ($\sigma = 1/2 y E = 2$) observamos que el paquete se localiza dinámicamente en la dirección de menor modulación del potencial periódico mientras que se desplaza y dispersa en la dirección de mayor modulación. La dispersión ocurre con menor rapidez que el desplazamiento.

intenso el paquete se dispersa a lo largo de la dirección de menor modulación (figura 5.8a) en forma balística. La figura 5.9a muestra que el comportamiento de la dispersión del paquete a lo largo de x es $\sigma_x(t) \sim t^1$. En este límite el campo eléctrico no es suficientemente intenso por lo que el paquete se dispersa muy lentamente en la dirección de deriva. [55]

En la situación intermedia, ilustrada por la figura 5.8b, el paquete comienza a moverse en la dirección de deriva. Este presenta localización dinámica en x caracterizada por el comportamiento oscilatorio de $\sigma_x(t) \sim t^0$. La localización dinámica se da después de un período transitorio en el que el paquete se dispersa en x. La dispersión en y tiene la forma $\sigma_y(t) \sim t^{16/25}$. Finalmente, para un campo eléctrico intenso (figura 5.8c) el movimiento de deriva se hace evidente. También resulta claro que, a pesar de que la modulación del potencial es menor a lo largo de x, el campo eléctrico produce localización dinámica en dicha dirección. En la dirección de deriva el paquete se desplaza y dispersa en forma balística. Sin embargo, la dispersión ocurre en una escala de tiempo mucho mayor que el desplazamiento debido a la alta modulación del potencial periódico. El efecto de localización de la olargo de la dirección longitudinal es el resultado de la discretización de niveles producida por el campo eléctrico.



Capítulo 6

Conductividad de Hall

6.1. Introducción

En la sección 2.3 estudiamos la ecuación de Schrödinger para un electrón en presencia de campos magnético y eléctrico uniformes. Como una primera aproximación puede calcularse la corriente de Hall cuando el potencial de la red es despreciable. En este caso la Ec. (2.37) da lugar al siguiente problema de eigenvalores de la energía

$$\left(A^{\dagger}A + \frac{1}{2} - EP_2\right)|\mu, k_2\rangle = \mathcal{E}_{\mu}\left(k_2\right)|\mu, k_2\rangle, \qquad (6.1)$$

donde el campo eléctrico E está dirigido a lo largo del eje x. La base $\{|\mu, k_2\rangle\}$ está formada de eigenestados del operador de número de Landau y de P_2

$$A^{\dagger}A |\mu, k_2\rangle = \mu |\mu, k_2\rangle, \qquad P_2 |\mu, k_2\rangle = k_2 |\mu, k_2\rangle. \tag{6.2}$$

Se puede comprobar fácilmente que los eigenestados de la energía son entonces

$$\mathcal{E}_{\mu}(k_2) = \mu + \frac{1}{2} - Ek_2.$$
 (6.3)

El campo eléctrico rompe la simetría original de los niveles de Landau localizados en el plano, permitiendo el movimiento de los electrones a lo largo del eje y. Los estados $|\mu, k_2\rangle$ llevan entonces una corriente en la dirección y. La contribución de un estado ocupado a la corriente a lo largo de este eje es

$$J_2^{\mu} = -\langle \mu, k_2 | \Pi_2 | \mu, k_2 \rangle, \qquad (6.4)$$

donde Π_2 es el operador de velocidad en la dirección y. En la sección 2.3 mostramos que los operadores de velocidad pueden expresarse en términos de la transformación canónica (2.29) de tal forma que $\Pi_2 = Q_1 - E$ y a que su vez Q_1 está asociado a los operadores de escalera de los niveles de Landau

$$Q_1 = \frac{i}{\sqrt{2}} \left(A - A^{\dagger} \right), \tag{6.5}$$



como puede verse de la Ec. (2.36). En la corriente de Hall (6.4), Q_1 actuando sobre los kets produce una combinación lineal de estados $|\mu + 1, k_2\rangle$ y $|\mu - 1, k_2\rangle$ que son ortogonales a $|\mu, k_2\rangle$ y por lo tanto la única contribución que sobrevive es la del campo eléctrico obteniéndose

$$J_2^{\mu} = -E. (6.6)$$

El resultado anterior no depende del estado en el que se encuentra el electrón por lo que se infiere que todos los estados llevan la misma corriente de Hall. La corriente de Hall total es entonces

$$J_2 = \frac{n_0}{\nu_L} \sum_{\mu=0}^{\nu_L-1} J_2^{\mu}, \tag{6.7}$$

donde n_0 es la densidad superficial de portadores de carga, ν_L es el factor de llenado (ver capítulo 1) y el índice μ corre sobre los ν_L niveles de Landau llenos. Agregando unidades (ver apéndice A) a la expresión anterior para la corriente de Hall obtenemos

$$J_2 = -n_0 E \frac{e}{B}.$$
 (6.8)

De la relación de n_0 con el factor de llenado (1.8) obtenemos la cuantización para la conductividad

$$\sigma_H = -\frac{J_2}{E} = \frac{e^2}{h} \nu_L. \tag{6.9}$$

La ecuación anterior muestra que cada nivel lleno de Landau contribuye con un factor e^2/h a la conductividad de Hall. La localización de la energía de Fermi \mathcal{E}_F puede variar debido a la modificación del campo magnético o de la densidad superficial de electrones; sin embargo el resultado anterior muestra que mientras que \mathcal{E}_F se encuentra localizada dentro de una brecha de estos niveles, esperamos que la cuantización de σ_H se mantenga.

Se ha llevado a cabo mucho trabajo experimental y teórico en torno al efecto de las impurezas y el desorden [9] presentes en las muestras reales. El efecto de desorden es producir un conjunto de estados localizados (que integran al brecha de movilidad) en torno a los estados extendidos (en el borde de morbilidad) que son los que contribuyen a la conductividad de Hall. Como puede observarse en la figura 1.8, alrededor de la posición original de cada nivel de Landau se observa una banda de estados extendidos rodeada de una banda de niveles localizados. Mientras \mathcal{E}_F esté dentro de la región de estados localizados, no habrá nuevos estados electrónicos disponibles que contribuyan a la conductividad de Hall, por lo cual se espera que σ_H se mantenga constante. Esto explica la aparición de mesetas en la conductividad de Hall en presencia de desorden e impurezas. Sin embargo, por medio de estos argumentos, no es posible justificar que los valores de la conductividad de Hall sean múltiplos enteros de e^2/h .

La ocurrencia del efecto Hall cuántico entero en muy diversas versiones experimentales sugiere que el fenómeno se debe a un principio fundamental independiente de las características particulares del sistema. Thouless, Kohmoto,



Nightingale y Nijs [19, 56] mostraron, utilizando la teoría de la respuesta lineal de Kubo (apéndice E), [57, 58] que la conductividad de Hall se puede expresar como un invariante topológico que toma valores enteros.

En el presente capítulo utilizamos los resultados obtenidos anteriormente para calcular la conductividad de Hall para el problema eléctrico-magnético de Bloch. Nuestros resultados son válidos para valores arbitrarios del campo eléctrico, reduciéndose al caso de Thouless *et al.* cuando se considera el efecto de E a primer orden. El método permite calcular las correcciones no lineales en E a σ_H .

Cabe recordar que la presencia del potencial periódico rompe los niveles de Landau en un determinado número de sub-bandas. Es razonable esperar que cada sub-banda contribuya con una fracción del valor total de e^2/h que se asigna al nivel completo de Landau. Sin embargo es interesante observar que cada sub-banda α llena contribuye con un valor $\sigma_{\alpha}e^2/h$ a la conductividad de Hall, donde σ_{α} es un número entero. El número σ_{α} es un invariante topológico que puede utilizarse para etiquetar a cada sub-banda. Mostraremos un método que permite calcular numéricamente σ_{α} para cada sub-banda, comprobando que su valor es entero. Los valores de σ_{α} se pueden asignar también a las bandas que se obtienen para acoplamiento fuerte, en cuyo caso la identificación de dichas bandas como pertenecientes a un nivel de Landau determinado se pierde.

6.2. La Corriente de Hall

Para calcular las corrientes longitudinal y de Hall en un sistema de electrones de Bloch independientes consideramos el campo fermiónico [59]

$$\psi(t, \boldsymbol{x}) = \sum_{\alpha} \int d^2 \boldsymbol{k} \, \phi_{\alpha} \left(\boldsymbol{k} \right) \varphi_{\alpha} \left(\boldsymbol{k}; t, \boldsymbol{x} \right),$$

$$\psi^+(t, \boldsymbol{x}) = \sum_{\alpha} \int d^2 \boldsymbol{k} \, \phi^+_{\alpha} \left(\boldsymbol{k} \right) \varphi^*_{\alpha} \left(\boldsymbol{k}; t, \boldsymbol{x} \right), \qquad (6.10)$$

cuya funcional lagrangiana está dada por

$$L[\psi,\psi^{+}] = -\int d^{2}x \,\psi^{+}(t,x) \,S\psi(t,x) \,. \tag{6.11}$$

donde S es el operador de Schrödinger (2.1). La función $\varphi_{\alpha}(\mathbf{k}; t, \mathbf{x})$ representa un estado de Bloch en presencia de campos magnético y eléctrico como los discutidos en la sección 3.4. Los operadores de creación y aniquilación $\phi_{\alpha}^{+}(\mathbf{k})$ $\phi_{\alpha}(\mathbf{k})$ cumplen las relaciones de anticonmutación usuales para fermiones

$$\{\phi_{\alpha}(\boldsymbol{k}), \phi_{\alpha'}(\boldsymbol{k'})\} = \{\phi_{\alpha}^{+}(\boldsymbol{k}), \phi_{\alpha'}^{+}(\boldsymbol{k'})\} = 0, \\ \{\phi_{\alpha}(\boldsymbol{k}), \phi_{\alpha'}^{+}(\boldsymbol{k'})\} = \delta_{\alpha,\alpha'}\delta(\boldsymbol{k'}-\boldsymbol{k}).$$
(6.12)

al igual que el campo $\psi(t, x)$

$$\{\psi(t, x), \psi(t, x')\} = \{\psi^+(t, x), \psi^+(t, x')\} = 0, \{\psi(t, x), \psi^+(t, x')\} = \delta(x' - x).$$
(6.13)



Para campos magnéticos intensos suponemos que todos los electrones se encuentran polarizados en la dirección del campo magnético, por lo que podemos ignorar al espín como grado de libertad activo.

La densidad de corriente está dada por el valor esperado del operador velocidad multiplicado por la carga del electrón

$$\hat{J} = -\frac{1}{S} \int d^2x \ \psi^+(t,x) \ \Pi\psi(t,x)$$
$$= -\frac{1}{S} \sum_{\alpha,\alpha'} \int d^2k' \int d^2k \ \phi^+_\alpha(k') \ \phi_\alpha(k) \ \langle \alpha',k' | \Pi | \alpha,k \rangle , \quad (6.14)$$

donde S es la superficie de la muestra e introducimos la definición

$$\langle \alpha', \mathbf{k}' | \mathbf{\Pi} | \alpha, \mathbf{k} \rangle = \int d^2 x \, \varphi^*_{\alpha'} \left(\mathbf{k}; t, \mathbf{x} \right) \mathbf{\Pi} \varphi_{\alpha} \left(\mathbf{k}; t, \mathbf{x} \right).$$
 (6.15)

IN ALL REPORTS AND A REPORT AND

Para calcular el elemento de matriz del operador de velocidad consideramos primero el elemento de matriz del vector de posición que puede escribirse de la siguiente forma

$$\langle \alpha', \mathbf{k}' | \mathbf{x} | \alpha, \mathbf{k} \rangle = \int d^2 x e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{w}} u_{\alpha'}^* (\mathbf{k}'; t, \mathbf{x}) x u_{\alpha} (\mathbf{k}; t, \mathbf{x})$$

$$= \frac{1}{i} \nabla_{\mathbf{k}} \int d^2 x e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{w}} u_{\alpha'}^* (\mathbf{k}'; t, \mathbf{x}) u_{\alpha} (\mathbf{k}; t, \mathbf{x})$$

$$+ \int d^2 x e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{w}} u_{\alpha'}^* (\mathbf{k}'; t, \mathbf{x}) i \nabla_{\mathbf{k}} u_{\alpha} (\mathbf{k}; t, \mathbf{x}), \quad (6.16)$$

como vimos en el capítulo 3, el teorema de Bloch (3.49) permite escribir

$$\varphi(\mathbf{k}; t, \mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} u(\mathbf{k}; t, \mathbf{x}), \qquad (6.17)$$

con $u(\mathbf{k}; t, \mathbf{x})$ cumpliendo las condiciones de periodicidad (3.51). En el lado derecho de la ecuación anterior, el primer término es $\delta_{\alpha',\alpha} \nabla_{\mathbf{k}} \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k})$, mientras que el segundo puede escribirse como

$$\int d^{2}x \ e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{x}} u_{\alpha'}^{*}(\mathbf{k}';t,x) \ i\nabla_{\mathbf{k}} u_{\alpha}(\mathbf{k};t,x)$$

$$= \sum_{i_{1},i_{2}} e^{i(\mathbf{k}_{1}-\mathbf{k}'_{1})qbi_{1}} e^{i(\mathbf{k}_{2}-\mathbf{k}'_{2})bi_{2}} \int_{CUM} d^{2}x \ u_{\alpha'}^{*}(\mathbf{k}';t,x) \ i\nabla_{\mathbf{k}} u_{\alpha}(\mathbf{k};t,x)$$

$$= \frac{2\pi}{p} \delta(\mathbf{k}'-\mathbf{k}) \int_{CUM} d^{2}x \ u_{\alpha'}^{*}(\mathbf{k};t,x) \ i\nabla_{\mathbf{k}} u_{\alpha}(\mathbf{k};t,x), \quad (6.18)$$

donde hemos remplazado la integral sobre todo el espacio por una suma sobre las posiciones de todas las celdas unitarias magnéticas (CUM); lo anterior produce el término de la delta, más una integral sobre una sola de las celdas



94

)

aprovechando que las funciones de modulación $u_{\alpha}(k; t, x)$ tienen las propiedades de periodicidad (3.51). El valor esperado del vector de posición está dado entonces por

$$\langle \alpha', \mathbf{k}' | \mathbf{x} | \alpha, \mathbf{k} \rangle = -i \nabla_{\mathbf{k}} \delta \left(\mathbf{k}' - \mathbf{k} \right) \delta_{\alpha', \alpha} + \delta \left(\mathbf{k}' - \mathbf{k} \right) \mathcal{A}^{\alpha', \alpha} \left(\mathbf{k} \right)$$
(6.19)

donde hemos definido

$$\mathcal{A}^{\alpha',\alpha}(k) = \frac{2\pi}{p} \int_{\text{CUM}} d^2 x \, u^*_{\alpha'}(k;t,x) \, i \nabla_k u_\alpha(k;t,x) \,. \tag{6.20}$$

El elemento diagonal de (6.20) dado por

$$\mathcal{A}_{\alpha}\left(\boldsymbol{k}\right) = \mathcal{A}^{\alpha,\alpha}\left(\boldsymbol{k}\right), \qquad (6.21)$$

es el potencial vectorial o fase de Berry definido en la zona magnética de Brillouin (ZMB). Como vimos anteriormente dicho potencial aparece como la fase de Berry que resulta de resolver la ecuación efectiva de Schrödinger (3.53). Dicho término fue introducido originalmente por Kohmoto [45] en la discusión de la conductividad de Hall por medio de la teoría de la respuesta lineal. Más adelante veremos que es fundamental en la discusión de la cuantización de la conductividad de Hall.

El operador de velocidad, definido como $\Pi = p + A$, puede ser expresado como $\Pi = i[H, x]$. Así, el elemento de matriz de la velocidad, se puede calcular como

$$\begin{aligned} \langle \alpha', k' | \mathbf{\Pi} | \alpha, k \rangle &= i \langle \alpha', k' | [H, x] | \alpha, k \rangle \\ &= \left[\mathbf{\Pi}_{\alpha} \left(k \right) \delta_{\alpha', \alpha} + \mathbf{\Pi}_{\alpha', \alpha} \left(k \right) \left(1 - \delta_{\alpha', \alpha} \right) \right] \delta \left(k' - k \right), \quad (6.22) \end{aligned}$$

donde

$$\Pi_{\alpha}(\boldsymbol{k}) = \nabla_{\boldsymbol{k}} \mathcal{E}_{\alpha}(\boldsymbol{k}) - \boldsymbol{E} \cdot \nabla_{\boldsymbol{k}} \mathcal{A}_{\alpha}(\boldsymbol{k}), \qquad (6.23)$$

$$\Pi_{\alpha',\alpha}(\boldsymbol{k}) = i \left[\mathcal{E}_{\alpha'}(\boldsymbol{k}) - \mathcal{E}_{\alpha}(\boldsymbol{k}) + i \boldsymbol{E} \cdot \nabla_{\boldsymbol{k}} \right] \mathcal{A}^{\alpha',\alpha}(\boldsymbol{k}) \,. \tag{6.24}$$

En este último resultado hemos utilizado la Ec. (6.19) y la ecuación de Schrödinger en la forma (3.31) que permite sustituir la derivada temporal de la función de onda por la derivada direccional respecto a (k) a lo largo del campo eléctrico.

Sustituyendo (6.22) en la expresión para la corriente (6.14) obtenemos

$$\hat{J} = -\frac{1}{S} \sum_{\alpha} \int d^2 k \ \phi_{\alpha}^+(k) \phi_{\alpha}(k) \left[\nabla_k \mathcal{E}_{\alpha}(k) - E \cdot \nabla_k \mathcal{A}_{\alpha}(k) \right] - \frac{i}{S} \sum_{\alpha, \alpha'} \int d^2 k \ \phi_{\alpha}^+(k) \phi_{\alpha'}(k) \left[\mathcal{E}_{\alpha'}(k) - \mathcal{E}_{\alpha}(k) \right] \mathcal{A}^{\alpha', \alpha}(k) . \quad (6.25)$$

Consideramos que el sistema se encuentra a muy baja temperatura y que los electrones ocupan todos los niveles independientes que se encuentran por debajo



de la energía de Fermi. Luego, el estado del sistema en la aproximación de partícula independiente puede escribirse como

$$|\Psi\rangle = \sqrt{\mathcal{D}} \prod_{\alpha \le \nu_F} \prod_{\mathbf{k}} \phi_{\alpha}^+(\mathbf{k}) |0\rangle, \qquad (6.26)$$

donde $|0\rangle$ es el vacío, \mathcal{D} es un factor de normalización que garantiza que el número de portadores de carga sea en total \mathcal{N} y ν_F es el número de bandas llenas por debajo de la energía de Fermi. Esta condición de normalización implica que el número total de partículas es

$$\mathcal{N} = \int d^2 x \left\langle \Psi \left| \psi^+ \left(t, x \right) \psi \left(t, x \right) \right| \Psi \right\rangle = \sum_{\alpha} \int d^2 k \left\langle \Psi \left| \phi^+_{\alpha} \left(k \right) \phi_{\alpha} \left(k \right) \right| \Psi \right\rangle$$
(6.27)

y que el factor de normalización está dado por

$$\mathcal{D} = \mathcal{N} \frac{1}{\nu_F} \frac{qb^2}{(2\pi)^2} = \mathcal{N} \frac{1}{\nu_F} \frac{p}{2\pi},$$
(6.28)

donde, de acuerdo a (3.7), el número entero p está asociado al inverso del número de cuantos de flujo fundamental por celda unitaria $\sigma = q/p$.

Al calcular el valor esperado de la corriente en los estados representados por (6.26) obtenemos que se reduce a

$$\boldsymbol{J} = \left\langle \boldsymbol{\Psi} \left| \boldsymbol{\hat{J}} \right| \boldsymbol{\Psi} \right\rangle = -\frac{1}{S} \sum_{\alpha} \int d^2 \boldsymbol{k} \left[\nabla_{\boldsymbol{k}} \mathcal{E}_{\alpha} \left(\boldsymbol{k} \right) - \boldsymbol{E} \cdot \nabla_{\boldsymbol{k}} \mathcal{A}_{\alpha} \left(\boldsymbol{k} \right) \right] f_{\alpha} \left(\boldsymbol{k} \right), \quad (6.29)$$

donde $f_{\alpha}(\mathbf{k}) = \langle \Psi | \phi_{\alpha}^{+}(\mathbf{k}) \phi_{\alpha}(\mathbf{k}) | \Psi \rangle$ es el número de ocupación del estado caracterizado por la banda α y el pseudomomento \mathbf{k} . Como ya hemos mencionado, a bajas temperaturas sólo se encuentran llenos aquellos niveles cuyas energías están por debajo de la de Fermi por lo que el número de ocupación es

$$f_{\alpha}(\mathbf{k}) = \begin{cases} \mathcal{D}^{2}, & \mathcal{E}_{\alpha}(\mathbf{k}) \leq \mathcal{E}_{F}, \\ 0, & \mathcal{E}_{\alpha}(\mathbf{k}) > \mathcal{E}_{F} \end{cases}$$
(6.30)

De tal modo que en la aproximación de muy bajas temperaturas la expresión (6.29) para la corriente toma la forma

$$\boldsymbol{J} = -\frac{\mathcal{D}}{S} \sum_{\alpha \leq \nu_F} \int d^2 \boldsymbol{k} \left[\nabla_{\boldsymbol{k}} \mathcal{E}_{\alpha} \left(\boldsymbol{k} \right) - \boldsymbol{E} \cdot \nabla_{\boldsymbol{k}} \boldsymbol{\mathcal{A}}_{\alpha} \left(\boldsymbol{k} \right) \right].$$
(6.31)

Es interesante notar que el término $\nabla_{k} \mathcal{E}_{\alpha}(k)$ representa la contribución usual a la corriente proveniente de la velocidad de grupo; donde $\mathcal{E}_{\alpha}(k)$ es la cuasienergía que incluye de manera completa los efectos de los campos externos. Adicionalmente encontramos una contribución novedosa a la corriente proveniente del gradiente de la fase de Berry a lo largo de la dirección del campo eléctrico.



Como se muestra en el apéndice F, el potencial vectorial $\mathcal{A}(\mathbf{k})$ de Berry puede expresarse en la representación matricial introducida en la sección 4.3 como

$$\mathcal{A}_{\alpha}\left(k_{1},k_{2}\right)=\int_{0}^{\frac{2\pi}{4\tau}}d\phi \,d_{\alpha}^{\dagger}\left(k_{1}+\phi,k_{2}\right)i\nabla_{\mathbf{k}}d_{\alpha}\left(k_{1}+\phi,k_{2}\right),\tag{6.32}$$

donde $d_{\alpha}(k_1, k_2)$ es solución de la ecuación de Schrödinger (4.40)

$$H(k_1, k_2) d_{\alpha}(k_1, k_2) = \left(\mathcal{E}_{\alpha} + Ek_2 - iE\frac{\partial}{\partial k_1}\right) d_{\alpha}(k_1, k_2).$$
(6.33)

 $H(k_1, k_2)$ está representada por la matriz (4.37). De esta última ecuación observamos que el eigenvalor de la energía puede escribirse como

$$\mathcal{E}_{\alpha}(\mathbf{k}) = \Delta_{\alpha}(\mathbf{k}) + \mathbf{E} \cdot \mathbf{A}_{\alpha}(\mathbf{k}_{1}, \mathbf{k}_{2}) - \mathbf{E}\mathbf{k}_{2}, \qquad (6.34)$$

donde

$$\Delta_{\alpha}(\mathbf{k}) = \int_{0}^{\frac{2\pi}{2}} d\phi \, d_{\alpha}^{\dagger}(k_{1} + \phi, k_{2}) \, H(k_{1} + \phi, k_{2}) \, d_{\alpha}(k_{1} + \phi, k_{2}) \,. \tag{6.35}$$

El siguiente paso es introducir la expresión anterior de la energía en la Ec. (6.31) para la corriente. El primer término de la energía, dado por (6.35) tiene la forma de una contracción, y como vimos en la sección 4.9, éstas son periódicas en los bordes de la ZMB. Por lo tanto, el gradiente de éste término integrado sobre la ZMB se cancela

$$\int d^2 k \nabla_{\boldsymbol{k}} \Delta_{\boldsymbol{\alpha}} \left(\boldsymbol{k} \right) = 0, \qquad (6.36)$$

con lo cual, la corriente toma la forma

$$J = -\frac{pn_0}{2\pi\nu_F} \sum_{\alpha \le \nu_F} \int d^2k \left\{ \nabla_{\mathbf{k}} \left[\mathbf{E} \cdot \mathbf{A}_{\alpha} \left(\mathbf{k} \right) - \mathbf{E} \mathbf{k}_2 \right] - \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \mathbf{A}_{\alpha} \left(\mathbf{k} \right) \right\} \\ = n_0 \mathbf{E} \mathbf{e}_2 - \frac{pn_0}{\nu_F} \mathbf{E} \times \sum_{\alpha \le \nu_F} \int \frac{d^2k}{2\pi} \, \mathbf{\Omega}_{\alpha} \left(\mathbf{k} \right), \quad (6.37)$$

donde e_1 , e_2 y e_3 son una base de vectores ortonormales, e_1 es paralelo al campo eléctrico y e_3 es paralelo al campo magnético. El vector $\Omega(k)_{\alpha}$ tiene sólo componente a lo largo de e_3 , la cual se puede escribir como

$$\left[\boldsymbol{\Omega}_{\alpha}\left(\boldsymbol{k}\right)\right]_{3} = \left[\nabla_{\boldsymbol{k}} \times \boldsymbol{\mathcal{A}}_{\alpha}\left(\boldsymbol{k}\right)\right]_{3}, \qquad (6.38)$$

y representa la curvatura o tensor electromagnético asociado al potencial vectorial $\mathcal{A}_{\alpha}(\mathbf{k})$. El potencial vectorial $\mathcal{A}_{\alpha}(\mathbf{k})$ es paralelo al plano en el que se encuentran los pseudomomentos, por lo que la curvatura de Berry $\Omega_{\alpha}(\mathbf{k})$ tiene la misma dirección que el campo magnético. Así, la corriente de la Ec. (6.63) es perpendicular tanto al campo eléctrico como al campo magnético y por lo tanto, es la corriente de Hall.



Una expresión similar a (6.37) fue discutida originalmente por Thouless y Kohmoto. [19] Sin embargo dicho trabajo se basa en la formula de Kubo, obtenida en la teoría de la respuesta lineal, por lo que sólo términos lineales en E aparecen en la misma. Nuestros resultados se reducen a los de Thouless y Kohmoto si despreciamos el efecto del campo eléctrico en (6.33). Sin embargo si resolvemos la Ec. (6.33) utilizando teoría de perturbaciones, podemos evaluar las correcciones no-lineales en E a la conductividad expresada en la Ec. (6.37). En particular, cabe destacar que la Ec. (6.37) muestra que la magnetoresistencia longitudinal se cancela exactamente, independientemente del valor de E.

Si imponemos condiciones de contorno periódicas, estipulando que la función de onda en lados opuestos del sistema tenga el mismo valor, obtendremos un número finito de valores posibles para los pseudomomentos k_1 y k_2 . El número de estados en una sola banda α es entonces igual al número de celdas magnéticas sobre la superficie total del sistema. Por lo tanto, el número de bandas que se encuentran llenas por debajo de la energía de Fermi es

$$\nu_F = \frac{N}{S} q b^2 = 2\pi p n_0. \tag{6.39}$$

Utilizando este resultado, la conductividad de Hall (6.37) se reduce a

$$\sigma_H = \frac{1}{2\pi p} \sum_{\alpha \le \nu_F} (1 - \eta_\alpha) , \qquad (6.40)$$

donde η_{α} es la contribución de la sub-banda α a la conductividad dada por

$$\eta_{\alpha} = \int \frac{d^2 k}{2\pi} \left[\Omega_{\alpha} \left(k \right) \right]_{3}. \tag{6.41}$$

Cuando el acoplamiento entre los niveles de Landau no es muy intenso, cada uno de ellos se rompe en p sub-bandas. En el caso en que tengamos ν_L niveles de Landau llenos, $\nu_F = p\nu_L$. En la sección 6.5 se demostrará que para niveles de Landau llenos se cumple la regla de suma

$$\sum_{\alpha=1}^{p} \eta_{\alpha} = 0, \qquad (6.42)$$

donde $\alpha = 1, \ldots, p$ son las etiquetas de las sub-bandas que pertenecen a un mismo nivel de Landau lleno. De este resultado se sigue que (restaurando unidades) $\sigma_H = \nu_L e^2/h$; resultado que concuerda con la cuantización de la conductividad (6.9) para niveles completos de Landau.

Por otro lado, la Ec. (6.40) muestra que la contribución a la conductividad de cada sub-banda α llena es (restaurando unidades)

$$\sigma_H^{\alpha} = \frac{e^2}{h} \sigma_{\alpha} \tag{6.43}$$

$$\sigma_{\alpha} = \frac{1 - \eta_{\alpha}}{p}.$$
 (6.44)

donde


6.3. Dinámica Semiclásica

Los resultados obtenidos en las Ecs. (6.31) y (6.37) son esenciales para entender la cuantización de la conductividad de Hall, así como la cancelación de la magneto-resistencia. Es interesante observar que se puede llegar a los mismos resultados en el contexto de la teoría semiclásica del transporte. En un análisis más completo el método permite estudiar los efectos de las colisiones electrónicas.

Como primer paso y en ausencia de colisiones, el método semiclásico consiste en el estudio de un paquete de ondas construido a partir de las funciones de Bloch de una sola banda en un potencial periódico bajo la acción de campos electromagnéticos de muy baja intensidad. La baja intensidad de los campos garantiza la ausencia de transiciones entre las bandas. El potencial periódico da lugar a la estructura de bandas del espectro mientras que los campos son considerados como perturbaciones clásicas. Los ingredientes más importantes de esta teoría se encuentran en las ecuaciones

$$\dot{\mathbf{X}} = \nabla_{\mathbf{K}} \mathcal{E}_{\alpha} \left(\mathbf{K} \right), \dot{\mathbf{K}} = -\delta \mathbf{E} - \dot{\mathbf{X}} \times \delta \mathbf{B},$$
 (6.45)

donde $X \neq K$ son la posición central y el momento promedio del paquete respectivamente. La energía $\mathcal{E}_{\alpha}(K)$ contiene la información de la estructura de bandas.

Esta teoría pierde validez cuando los campos electromagnéticos son lo suficientemente intensos para producir transiciones electrónicas entre las diferentes bandas. Es natural entonces preguntarse acerca de la forma en que se modifican las ecuaciones cuando los campos magnético y eléctrico constantes se incluyen en forma exacta a través de las funciones de Bloch eléctrico-magnéticas.

Para ello, consideremos un paquete de ondas formado de la superposición de los estados de Bloch $\varphi_a(k; t, x)$ estudiados en el capítulo 3, pertenecientes a una sola banda. El paquete puede ser representado por la función

$$\psi(t, \boldsymbol{x}) = \int d^2 \boldsymbol{k} \, \phi_\alpha(\boldsymbol{k}) \, \varphi_\alpha(\boldsymbol{k}; t, \boldsymbol{x}) \,, \qquad (6.46)$$

donde, a diferencia de la Ec. (6.10), $\phi_{\alpha}(k)$ no representa un operador de aniquilación, sino la amplitud o función de modulación. La función $\phi_{\alpha}(k)$ está localizada alrededor de la posición central del pseudomomento K, es decir

$$\boldsymbol{K} = \int d^2 \boldsymbol{k} \, \phi_{\alpha}^* \left(\boldsymbol{k} \right) \, \boldsymbol{k} \phi_{\alpha} \left(\boldsymbol{k} \right) \,. \tag{6.47}$$





Figura 6.1: Cruzamiento de bandas y curvatura de Berry. Se muestra $[\Omega_{\nu\alpha}(\mathbf{k})]_3$ para las sub-bandas de los primeros niveles de Landau ($\mathcal{K} = 0.4$, $\sigma = 1/3$). Las curvaturas de Berry correspondientes a $[\Omega_{11}(\mathbf{k})]_3$ y $[\Omega_{12}(\mathbf{k})]_3$ son diferentes a las observadas en la figura 6.3 debido al cruzamiento entre las bandas mostrado en la figura 6.6.

La posición central de este paquete está dada por

$$\boldsymbol{X} = \int d^2 \boldsymbol{x} \, \psi^* \left(t, \boldsymbol{x} \right) \boldsymbol{x} \psi \left(t, \boldsymbol{x} \right). \tag{6.48}$$

Sustituyendo la expresión para el paquete (6.46) y para el elemento de matriz del operador de posición (6.19) en la expresión anterior e integrando por partes se puede reescribir la posición central del paquete como

$$\boldsymbol{X} = \int d^2 \boldsymbol{k} \, \left[\phi^*_{\alpha} \left(\boldsymbol{k} \right) i \nabla_{\boldsymbol{k}} \phi_{\alpha} \left(\boldsymbol{k} \right) + \phi^*_{\alpha} \left(\boldsymbol{k} \right) \boldsymbol{\mathcal{A}}_{\alpha} \left(\boldsymbol{k} \right) \phi_{\alpha} \left(\boldsymbol{k} \right) \right]. \tag{6.49}$$

La ecuación de Schrödinger (2.1) se puede obtener aplicando el principio variacional a la siguiente funcional lagrangiana

$$L[\psi,\psi^*] = -\int d^2x \,\psi^*(t,x) \,S\psi(t,x) \,. \tag{6.50}$$

Sustituyendo la expresión (6.46), la lagrangiana se convierte en una funcional para los campos $\phi_{\alpha}(\mathbf{k})$, es decir,

$$L[\phi,\phi^*] = \int d^2k \,\phi^*_{\alpha}(\mathbf{k}) \left\{ \dot{\phi}_{\alpha}(\mathbf{k}) - \mathcal{E}_{\alpha}(\mathbf{k}) \,\phi_{\alpha}(\mathbf{k}) \right\}. \tag{6.51}$$



100

Las ecuaciones de Euler que se obtienen de esta lagrangiana son

$$\begin{aligned} \phi_{\alpha}\left(\mathbf{k}\right) &= -i\mathcal{E}_{\alpha}\left(\mathbf{k}\right)\phi_{\alpha}\left(\mathbf{k}\right),\\ \dot{\phi}_{\alpha}^{*}\left(\mathbf{k}\right) &= i\phi_{\alpha}^{*}\left(\mathbf{k}\right)\mathcal{E}_{\alpha}\left(\mathbf{k}\right). \end{aligned} \tag{6.52}$$

Las derivadas temporales de la posición (6.49) y del momento (6.47) promedio están dadas por

$$\dot{\mathbf{X}} = \int d^{2}k \left[\dot{\phi}_{\alpha}^{*} \left(k \right) i \nabla_{\mathbf{k}} \phi_{\alpha} \left(k \right) + \phi_{\alpha}^{*} \left(k \right) i \nabla_{\mathbf{k}} \dot{\phi}_{\alpha} \left(k \right) \right] + \int d^{2}k \left[\dot{\phi}_{\alpha}^{*} \left(k \right) \mathbf{A}_{\alpha} \left(k \right) \phi_{\alpha} \left(k \right) + \phi_{\alpha}^{*} \left(k \right) \mathbf{A}_{\alpha} \left(k \right) \dot{\phi}_{\alpha} \left(k \right) \right] + \int d^{2}k \phi_{\alpha}^{*} \left(k \right) \mathbf{A}_{\alpha} \left(k \right) \phi_{\alpha} \left(k \right) ,$$
$$\dot{\mathbf{K}} = \int d^{2}k \dot{\phi}_{\alpha}^{*} \left(k \right) k \phi_{\alpha} \left(k \right) + \int d^{2}k \phi_{\alpha}^{*} \left(k \right) k \dot{\phi}_{\alpha} \left(k \right) .$$
(6.53)

Sustituyendo la forma explícita de las ecuaciones de movimiento (6.52) para $\phi_{\alpha}(k)$ en las ecuaciones anteriores e integrando por partes obtenemos

$$\dot{\boldsymbol{X}} = \int d^2 \boldsymbol{k} \, \left| \phi \left(\boldsymbol{k} \right)_{\alpha} \right|^2 \left[\nabla_{\boldsymbol{k}} \mathcal{E}_{\alpha} \left(\boldsymbol{k} \right) + \dot{\boldsymbol{\mathcal{A}}}_{\alpha} \left(\boldsymbol{k} \right) \right], \qquad \dot{\boldsymbol{K}} = 0.$$
(6.54)

En la sección 3.4 mostramos que la derivada temporal de las funciones de onda de Bloch magnéticas es proporcional a su derivada direccional a lo largo de campo eléctrico, como vemos en las Ecs. (3.30) y (3.48). El potencial vectorial $\mathcal{A}_{\alpha}(k)$ hereda esta propiedad de las funciones de onda de tal modo que en la Ec. (6.54) $\mathcal{A}_{\alpha}(k)$ puede sustituirse por la derivada direccional $-E \cdot \nabla_k \mathcal{A}_{\alpha}(k)$. Para la energía $\mathcal{E}_{\alpha}(k)$ utilizamos la expresión (6.34). Así las ecuaciones de movimiento toman la forma

$$\dot{\boldsymbol{X}} = \int d^2 \boldsymbol{k} \, \left| \phi_{\alpha} \left(\boldsymbol{k} \right) \right|^2 \left\{ \nabla_{\boldsymbol{k}} \left[\Delta_{\alpha} \left(\boldsymbol{k} \right) + \boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{\mathcal{A}}_{\alpha} \left(\boldsymbol{k} \right) \right] - \boldsymbol{E} \cdot \nabla_{\boldsymbol{k}} \boldsymbol{\mathcal{A}}_{\alpha} \left(\boldsymbol{k} \right) \right\} - \boldsymbol{E} \boldsymbol{e}_2, \\ \dot{\boldsymbol{K}} = 0. \tag{6.55}$$

La aproximación semiclásica consiste ahora en sustituir los promedios de funciones sobre k por los valores de dichas funciones evaluadas en el momento central K, con lo cual obtenemos las ecuaciones de movimiento semiclásicas

$$\dot{\mathbf{X}} = \nabla_{\mathbf{K}} \left[\Delta_{\alpha} \left(\mathbf{K} \right) + \mathbf{E} \cdot \mathbf{A}_{\alpha} \left(\mathbf{K} \right) \right] - \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{K}} \mathbf{A}_{\alpha} \left(\mathbf{K} \right) - \mathbf{E} \mathbf{e}_{2}$$

= $\nabla_{\mathbf{K}} \Delta_{\alpha} \left(\mathbf{K} \right) + \mathbf{E} \times \mathbf{\Omega}_{\alpha} \left(\mathbf{K} \right) - \mathbf{E} \mathbf{e}_{2},$ (6.56)
 $\dot{\mathbf{K}} = 0.$

En la ecuación anterior utilizamos la definición (6.38). Chang y Niu [60, 61] estudiaron las ecuaciones semiclásicas cuando el campo magnético se incluye



explícitamente en la dinámica cuántica del electrón, pero el campo eléctrico es considerado como un perturbación δE . En ese caso obtuvieron

$$\dot{\mathbf{X}} = \nabla_{\mathbf{K}} \Delta_{\alpha} \left(\mathbf{K} \right) + \delta \mathbf{E} \times \mathbf{\Omega}_{\alpha} \left(\mathbf{K} \right)$$
$$\dot{\mathbf{K}} = \delta \mathbf{E}. \tag{6.57}$$

Aunque similares a las Ecs. (6.56), entre estos dos sistemas de ecuaciones existen diferencias importantes. La diagonalización por medio de las simetrías eléctricomagnéticas (capítulos 2 y 3) muestra que aun en presencia del campo eléctrico es posible definir pseudomomentos k que se conservan, tal y como muestra la Ec. (6.56). El término $-Ek_2$, que aparece en la dinámica de X, no aparece en la referencia [60], sin embargo, como vimos en las secciones 6.1 y 6.2, dicho término es esencial para obtener la conductividad de una banda completa de Landau. Finalmente, en (6.57) Δ_{α} (K) y Ω_{α} (K) no dependen de E; éste es el resultado al que se reduce (6.56) si consideramos sólo términos lineales en δE . Sin embargo, considerando la solución de (6.33), en nuestro caso podemos calcular las correcciones no lineales en E a la conductividad de Hall.

En el apéndice G se presenta una deducción de las ecuaciones semiclásicas en presencia de campos perturbativos adicionales $\delta B y \, \delta E y$ la representación variacional de estas mismas.

El siguiente paso es combinar las ecuaciones semiclásicas con la ecuación de Boltzmann para estudiar las propiedades de transporte de los electrones. Suponemos que la función de distribución depende de X y K, con lo que la ecuación de Boltzmann toma la forma

$$\dot{\boldsymbol{X}} \cdot \nabla_{\boldsymbol{X}} f_{\alpha} + \dot{\boldsymbol{K}} \cdot \nabla_{\boldsymbol{K}} f_{\alpha} = \left(\frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t}\right)_{coll}$$
(6.58)

donde f_{α} es la función de distribución de Boltzmann de la banda α . El efecto de las impurezas se incluye en el término de colisión $(\partial f_{\alpha}/\partial t)$; que, utilizando la aproximación de tiempo de relajación, puede ser reemplazado por $-(f_{\alpha} - f_{\alpha}^{0})/\tau$. Haciendo $f_{\alpha} = f_{\alpha}^{0}$ en el lado izquierdo de la Ec. (6.58) y sustituyendo las ecuaciones de movimiento (6.56) obtenemos la función de distribución dada por

$$f_{\alpha} = f_{\alpha}^{0} - \tau \left(\dot{\boldsymbol{X}} \cdot \nabla_{\boldsymbol{X}} f_{\alpha}^{0} + \dot{\boldsymbol{K}} \cdot \nabla_{\boldsymbol{K}} f_{\alpha}^{0} \right) = f_{\alpha}^{0} - \tau \left[\nabla_{\boldsymbol{K}} \Delta_{\alpha} \left(\boldsymbol{K} \right) - \boldsymbol{E} \boldsymbol{e}_{2} + \boldsymbol{E} \times \boldsymbol{\Omega}_{\alpha} \left(\boldsymbol{K} \right) \right] \cdot \nabla_{\boldsymbol{X}} f_{\alpha}^{0}, \quad (6.59)$$

donde $f_{\alpha} = f_{\alpha}^0$ es la función de distribución en equilibrio.

La corriente eléctrica de una banda se define como

$$J_{\alpha} = -\frac{\mathcal{D}}{S} \int d^2 K f_{\alpha} \dot{X} = -\frac{n_0 p}{\nu_F} \int \frac{d^2 K}{2\pi} f_{\alpha} \dot{X}$$
(6.60)



y se puede descomponer en dos partes, $J^D_{\alpha} + J^H_{\alpha}$ que se definen como

$$J^{D}_{\alpha} = \frac{n_{0}p}{\nu_{F}} \int \frac{d^{2}K}{2\pi} \left[\tau \dot{X} \left(\dot{X} \cdot \nabla_{X} f^{0}_{\alpha} \right) - f^{0}_{\alpha} \nabla_{K} \Delta_{\alpha} \left(K \right) \right], \qquad (6.61)$$

$$J_{\alpha}^{H} = E \frac{n_0}{\nu_F} e_2 - E \times \frac{n_0 p}{\nu_F} \int \frac{d^2 K}{2\pi} f_{\alpha}^0 \mathbf{\Omega}_{\alpha} \left(\mathbf{K} \right).$$
(6.62)

El término J^D_{α} está asociado a las corrientes de difusión y a los gradientes de densidad. La segunda componente corresponde a la corriente de Hall. Esto se hace evidente si consideramos una banda llena, es decir, $f^D_{\alpha} = 1$. Entonces la corriente se reduce a la de Hall y toma la forma

$$\boldsymbol{J}_{\alpha}^{H} = n_{0} \boldsymbol{E} \boldsymbol{e}_{2} - \frac{n_{0} p}{\nu_{F}} \boldsymbol{E} \times \int \frac{d^{2} \boldsymbol{K}}{2\pi} \boldsymbol{\Omega}_{\alpha} \left(\boldsymbol{K} \right), \qquad (6.63)$$

que coincide con la obtenida anteriormente en la Ec. (6.37). Concluimos por lo tanto que la teoría semiclásica puede ser también utilizada para explicar la cuantización de la conductividad de un nivel lleno de Landau, así como la cuantización de las conductividades de las sub-bandas en que dichos niveles se rompen debido a la presencia del potencial periódico.

6.4. La Conductividad de Hall Como un Invariante Topológico

Aplicando el teorema de Stokes a la Ec. (6.41) y utilizando la definición (6.38) para la curvatura de Berry obtenemos que η_{α} puede expresarse como una integral de línea sobre el contorno C_{ZMB} que rodea la zona magnética de Brillouin

$$\eta_{\alpha} = \oint_{C_{\text{ZMB}}} \frac{dk}{2\pi} \cdot \mathcal{A}_{\alpha}(k) . \qquad (6.64)$$

Tomando en cuenta la definición (6.20) para el potencial vectorial $\mathcal{A}_{\alpha}(k)$, es fácil ver que η_{α} representa el cambio de fase de la función de onda cuando se recorre el circuito C_{ZMB} que rodea la ZMB, por lo cual es razonable esperar que sea un número entero. Sin embargo de acuerdo al resultado que obtendremos en la Ec. (6.69), η_{α} se puede escribir como la integral de línea sobre una trayectoria cerrada del gradiente de dicha fase, por lo cual se debería cancelar, a menos que existan singularidades en el interior de la ZMB [23, 62].

Thouless y Kohmoto emplearon un argumento topológico para demostrar que η_{α} es un número entero en el contexto de la teoría de la respuesta lineal. A continuación mostramos que el argumento de Thouless y Kohmoto se puede extender al caso más general en el que se considera al campo eléctrico en forma exacta utilizando las funciones de Bloch eléctrico-magnéticas.

Mostramos primero que el cambio de fase de la función de onda a lo largo de un circuito C_{CUM} , que rodea la celda unitaria magnética en el espacio de coordenadas x, es no trivial. Entonces, la función de onda se anula en algunos puntos que se encuentran en el interior de la CUM.







En el capítulo 3 estudiamos las funciones de Bloch-Floquet donde vimos que cumplen con las condiciones (3.44) dadas por

$$\begin{split} \varphi_{\alpha}\left(\boldsymbol{k};t+\tau_{0},\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right) &= \exp\left[-i\tau_{0}\left(\mathcal{E}-\tilde{A}_{0}\right)\right]\varphi_{\alpha}\left(\boldsymbol{k};t,\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right),\\ \varphi_{\alpha}\left(\boldsymbol{k};t,\boldsymbol{x}+q\boldsymbol{b},\boldsymbol{y}\right) &= \exp\left[iqb\left(\boldsymbol{k}_{1}-\tilde{A}_{1}\right)\right]\varphi_{\alpha}\left(\boldsymbol{k};t,\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right),\\ \varphi_{\alpha}\left(\boldsymbol{k};t,\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}+\boldsymbol{b}\right) &= \exp\left[ib\left(\boldsymbol{k}_{2}-\tilde{A}_{2}\right)\right]\varphi_{\alpha}\left(\boldsymbol{k};t,\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\right). \end{split}$$
(6.65)

En particular son interesantes las condiciones de Bloch para la función de modulación u(k; t, x). De las condiciones (6.65) puede verse que la función de modulación en los extremos de la zona magnética de Brillouin se relaciona a través de una fase asociada al potencial vectorial $\tilde{A}(t, x)$ [Ec. (2.22)] en la forma

$$u_{\alpha}(k; t, x + qb, y) = e^{-iqbA_{1}}u_{\alpha}(k; t, x, y)$$

$$= e^{iqb[(\beta_{1} - \frac{1}{2})E_{1}t - (\beta_{0} + \frac{1}{2})y]}u_{\alpha}(k; t, x, y),$$

$$u_{\alpha}(k; t, x, y + b) = e^{-ib\overline{A}_{2}}u_{\alpha}(k; t, x, y)$$

$$= e^{ib[(\beta_{2} - \frac{1}{2})E_{2}t - (\beta_{0} - \frac{1}{2})x]}u_{\alpha}(k; t, x, y).$$
(6.66)

La función de modulación $u_{\alpha}(\mathbf{k}; t, \mathbf{x})$ escrita como

$$u_{\alpha}(\boldsymbol{k};t,\boldsymbol{x}) = |u_{\alpha}(\boldsymbol{k};t,\boldsymbol{x})| \exp\left[i\theta_{\alpha}(\boldsymbol{k};t,\boldsymbol{x})\right], \qquad (6.67)$$

para un pseudomomento y banda dados, puede ser entendida como un parámetro de orden complejo sobre la celda unitaria contenida en el contorno C_{CUM} que



6.4 La Conductividad de Hall Como un Invariante Topológico 105

se muestra en la figura 6.2. De las Ecs. (6.66) puede verse que circulando en dirección positiva alrededor del contorno $C_{\rm CUM}$, el cambio de fase de la función de onda es un múltiplo entero de 2π , dado por p, independientemente de la norma elegida. En efecto, el cambio de fase alrededor de $C_{\rm CUM}$ es

$$\int_{C_{\text{CUM}}} d\theta_{\alpha} (\mathbf{k}; t, \mathbf{x}) = -\underbrace{qb \left[-\left(\beta_{1} - \frac{1}{2}\right) E_{1}t \right]}_{(0,0) \to (qb,0)} - \underbrace{b \left[-\left(\beta_{2} - \frac{1}{2}\right) E_{2}t + \left(\beta_{0} - \frac{1}{2}\right) qb \right]}_{(qb,0) \to (qb,b)} + \underbrace{qb \left[-\left(\beta_{1} - \frac{1}{2}\right) E_{1}t + \left(\beta_{0} + \frac{1}{2}\right) b \right]}_{(qb,b) \to (0,b)} + \underbrace{b \left[-\left(\beta_{2} - \frac{1}{2}\right) E_{2}t \right]}_{(0,b) \to (0,0)} = qb^{2} = 2\pi p. \quad (6.68)$$

Del comportamiento no trivial de la integral cerrada concluimos que en el interior de la celda unitaria debe haber una distribución de singularidades con número de enrollamiento p. Las singularidades corresponden a puntos en los que la fase está indeterminada, los cuales coinciden necesariamente con ceros de la función de onda [63]. Para un flujo magnético racional $\sigma^{-1} = p/q$ debe haber al menos p ceros de la función de onda en el interior de una de las zonas magnéticas de Brillouin.

Regresando a la Ec. (6.64) y sustituyendo la expresión (6.67) en ella, vemos que η_{α} representa el cambio de la fase de la función de onda, pero esta vez al rededor de la zona magnética de Brillouin.

$$\int_{\text{ZMB}} \frac{d^2k}{2\pi} \left[\nabla_{\mathbf{k}} \times \mathcal{A}_{\alpha} \left(\mathbf{k} \right) \right]_{3} = \oint_{C_{\text{ZMB}}} \frac{dk}{2\pi} \cdot \mathcal{A}_{\alpha} \left(\mathbf{k} \right)$$
$$= \frac{(2\pi)^2}{qb^2} \int_{\text{CUM}} d^2x \ |u_{\alpha} \left(\mathbf{k}; t, x \right)|^2 \oint_{C_{\text{ZMB}}} \frac{dk}{2\pi} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \theta_{\alpha} \left(\mathbf{k}; t, x \right)$$
$$= \oint_{C_{\text{ZMB}}} \frac{dk}{2\pi} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \theta_{\alpha} \left(\mathbf{k}; t, x \right). \quad (6.69)$$

Hemos probado ya que la función de onda tiene ceros en el interior de las celdas magnéticas unitarias, entonces podemos esperar que en el interior de la ZMB también los haya. Esto permitirá que θ_{α} (k; t, x) esté indeterminada en esos puntos y consecuentemente el cambio de fase, al recorrer el contorno de la ZMB, sea un múltiplo entero de 2π no trivial, es decir diferente de cero. A diferencia de las Ecs. (6.66), en este caso no conocemos explícitamente los cambios de fase de la función de onda al pasar de un extremo al otro de la ZMB, lo cual impide



obtener una expresión analítica para η_{α} . En la próxima sección presentaremos un método que permitirá calcular η_{α} numéricamente.

6.5. Cálculo de la Curvatura de Berry

Hasta el momento hemos demostrado que la conductividad de Hall de una banda puede expresarse, en unidades de e^2/h , como $\sigma_{\alpha} = (1 - \eta_{\alpha})/p$ donde η_{α} se obtiene como la integral de la curvatura de Berry sobre la zona magnética de Brillouin o la integral de línea del potencial vectorial alrededor de dicha zona

$$\eta_{\alpha} = \int_{\text{ZMB}} \frac{d^2 k}{2\pi} \left[\boldsymbol{\Omega}_{\alpha} \left(\boldsymbol{k} \right) \right]_{3} = \oint_{C_{\text{ZMB}}} \frac{d \boldsymbol{k}}{2\pi} \cdot \boldsymbol{\mathcal{A}}_{\alpha} \left(\boldsymbol{k} \right).$$
(6.70)

En la sección anterior mostramos que esta cantidad debe ser un número entero ya que coincide con el cambio de la fase a lo largo del contorno de la zona magnética de Brillouin. Sin embargo, no hemos precisado el valor que toma la conductividad de Hall para cada banda.

La evaluación de (6.70) requiere conocer la función de onda $d_{\alpha}(k)$, que se obtiene de la solución de la ecuación generalizada de Harper (6.33). Una solución bajo la aproximación adiabática fue discutida en la sección 4.10. Alternativamente observamos que si en dicha ecuación consideramos que el término $E(k_2 - i\partial/\partial k_1)$ actúa como un potencial de perturbación, podemos entonces utilizar teoría de perturbaciones obteniendo un desarrollo en serie, donde el parámetro de expansión es la intensidad del campo eléctrico. La solución de orden cero está dada por

$$H(\mathbf{k}) b_{\alpha}(\mathbf{k}) = \mathcal{E}^{0}_{\alpha}(\mathbf{k}) b_{\alpha}(\mathbf{k}).$$
(6.71)

A primer orden en teoría de perturbaciones la función de onda toma la forma [64]

$$d_{\alpha}(\mathbf{k}) = b_{\alpha}(\mathbf{k}) + iE \sum_{\alpha' \neq \alpha} b_{\alpha'}(\mathbf{k}) \frac{b_{\alpha'}^{\dagger}(\mathbf{k}) i\frac{\partial \mathbf{k}}{\partial \mathbf{k}_{1}} b_{\alpha}(\mathbf{k})}{\mathcal{E}_{\alpha}^{0}(\mathbf{k}) - \mathcal{E}_{\alpha'}^{0}(\mathbf{k})}, \qquad (6.72)$$

donde $b_{\alpha}(\mathbf{k})$ son los eigenvectores de la Ec. (6.71). Sustituyendo esta forma del vector $d_{\alpha}(\mathbf{k})$ en la expresión para el potencial vectorial tenemos que

$$\mathcal{A}_{\alpha}(\mathbf{k}) = \mathcal{A}_{\alpha}^{0}(\mathbf{k}) + E\mathcal{A}_{\alpha}^{1}(\mathbf{k}), \qquad (6.73)$$

donde $\mathcal{A}^{0}_{\alpha}(k)$ y $\mathcal{A}^{1}_{\alpha}(k)$ son el potencial vectorial a orden cero y primero en el campo eléctrico. A orden cero el potencial vectorial toma la forma

$$\mathcal{A}^{0}_{\alpha}(\mathbf{k}) = b^{\dagger}_{\alpha}(\mathbf{k}) \, i \nabla_{\mathbf{k}} b_{\alpha}(\mathbf{k}) \,. \tag{6.74}$$

Para simplificar la expressión que se obtiene para $\mathcal{A}^{1}_{\alpha}(\mathbf{k})$ observamos que de (6.71) se puede deducir la siguiente expressión para el elemento de matriz de la derivada parcial de $H(\mathbf{k})$

$$b_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{k}) \nabla_{\mathbf{k}} b_{\alpha'}(\mathbf{k}) = -\nabla_{\mathbf{k}} b_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{k}) b_{\alpha'}(\mathbf{k}) = \frac{b_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{k}) \nabla_{\mathbf{k}} H(\mathbf{k}) b_{\alpha'}(\mathbf{k})}{\mathcal{E}_{\alpha'}^{0}(\mathbf{k}) - \mathcal{E}_{\alpha}^{0}(\mathbf{k})}, \quad (6.75)$$





Figura 6.3: Curvatura de Berry de los primeros tres niveles de Landau. Se muestra $[\Omega_{\nu\alpha}(k)]_3$ como función del pseudomomento para K = 0.2. El subíndice ν representa al nivel de Landau y α es el número de la sub-banda. En este ejemplo $\sigma = 1/3$, por lo que aparecen tres sub-bandas para cada nivel de Landau.

válida cuando $\alpha \neq \alpha'$. Utilizando el último resultado encontramos las correcciones a primer orden, las componentes del potencial vectorial pueden escribirse como

$$\left[\mathcal{A}_{\alpha}^{1}\left(k\right)\right]_{1} = \sum_{\alpha' \neq \alpha} \frac{\left|b_{\alpha}^{\dagger}\left(k\right)\frac{\partial H\left(k\right)}{\partial k_{1}}b_{\alpha'}\left(k\right)\right|^{2}}{\left[\mathcal{E}_{\alpha}^{0}\left(k\right) - \mathcal{E}_{\alpha'}^{0}\left(k\right)\right]^{3}},\tag{6.76}$$

$$\left[\mathcal{A}_{\alpha}^{1}\left(k\right)\right]_{2} = \sum_{\alpha' \neq \alpha} \frac{2\operatorname{Re}\left\{\left[b_{\alpha}^{\dagger}\left(k\right)\frac{\partial H\left(k\right)}{\partial k_{1}}b_{\alpha'}\left(k\right)\right]\left[b_{\alpha'}^{\dagger}\left(k\right)\frac{\partial H\left(k\right)}{\partial k_{2}}b_{\alpha}\left(k\right)\right]\right\}\right\}}{\left[\mathcal{E}_{\alpha}^{0}\left(k\right)-\mathcal{E}_{\alpha'}^{0}\left(k\right)\right]^{3}}.$$
 (6.77)

Consideramos primero la contribución a η_{α} [Ec. (6.70)] de orden uno. En la sección 4.9 se discutieron las condiciones de periodicidad del hamiltoniano y de la función de onda al cambiar de un extremo a otro de la zona magnética de Brillouin. Mientras que $H(\mathbf{k})$ es estrictamente periódico, la función de onda cumple con: $d(k_1 - 2\pi/qb, k_2) = C_1 d(k_1, k_2) y d(k_1, k_2 - 2\pi/b) = C_2 d(k_1, k_2)$ donde $C_1 y C_2$ son matrices multiplicadas por fases $f_1 y f_2$ que son funciones del pseudomomento \mathbf{k} [Ecs. (4.101) y (4.106)]. Observando las Ecs. (6.76) y (6.77) resulta claro que $\mathcal{A}^{1}_{\alpha}(\mathbf{k})$ es periódico; con lo cual su contribución a la integral de línea en (6.70) se cancela y consecuentemente la corrección de orden uno a la conductividad se cancela.

Retornando a la contribución de orden cero (6.74), tenemos que no es periódica; por ejemplo $\mathcal{A}^{0}_{\alpha}(k_{1} + 2\pi/qb, k_{2}) - \mathcal{A}^{0}_{\alpha}(k_{1}, k_{2}) = -\nabla_{k}f_{1}$; con lo cual se



recupera que η_{α} está dado por el cambio de fase de la función de onda al recorrer un circuito que rodea la ZMB. Sin embargo la evaluación numérica del potencial vectorial $\mathcal{A}^{1}_{\alpha}(k)$ resulta ser sumamente inestable. Por esto es conveniente analizar la integral de superficie de la curvatura de Berry, la cual se puede escribir utilizando (6.38) y (6.74) como

$$\begin{bmatrix} \mathbf{\Omega}_{\alpha}^{0}\left(\boldsymbol{k}\right) \end{bmatrix}_{3} = \frac{\partial}{\partial k_{1}} \left[b_{\alpha}^{\dagger}\left(\boldsymbol{k}\right) \frac{\partial}{\partial k_{2}} b_{\alpha}\left(\boldsymbol{k}\right) \right] - \frac{\partial}{\partial k_{2}} \left[b_{\alpha}^{\dagger}\left(\boldsymbol{k}\right) \frac{\partial}{\partial k_{1}} b_{\alpha}\left(\boldsymbol{k}\right) \right] \\ = i \frac{\partial b_{\alpha}^{\dagger}\left(\boldsymbol{k}\right)}{\partial k_{1}} \frac{\partial b_{\alpha}\left(\boldsymbol{k}\right)}{\partial k_{2}} - i \frac{\partial b_{\alpha}^{\dagger}\left(\boldsymbol{k}\right)}{\partial k_{2}} \frac{\partial b_{\alpha}\left(\boldsymbol{k}\right)}{\partial k_{1}}. \quad (6.78)$$

Insertando una base completa $\sum_{\alpha'} b_{\alpha'}(k) b_{\alpha'}^{\dagger}(k)$ entre las derivadas obtenemos

$$[\mathbf{\Omega}_{\alpha}(\mathbf{k})]_{3} = i \sum_{\alpha' \neq \alpha} \left[\frac{\partial b_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{k})}{\partial k_{1}} b_{\alpha'}(\mathbf{k}) b_{\alpha'}^{\dagger}(\mathbf{k}) \frac{\partial b_{\alpha}(\mathbf{k})}{\partial k_{2}} - \frac{\partial}{\partial k_{2}} b_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{k}) b_{\alpha'}(\mathbf{k}) b_{\alpha'}^{\dagger}(\mathbf{k}) \frac{\partial b_{\alpha}(\mathbf{k})}{\partial k_{1}} \right]. \quad (6.79)$$

Observamos que podemos excluir el término $\alpha' \neq \alpha$ de la suma y utilizar la identidad (6.75) para obtener finalmente

$$[\mathbf{\Omega}_{\alpha}(\mathbf{k})]_{3} = i \sum_{\alpha' \neq \alpha} \frac{1}{\left[\mathcal{E}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{k}) - \mathcal{E}_{\alpha'}^{0}(\mathbf{k})\right]^{2}} \\ \times \left\{ \left[b_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{k}) \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial k_{1}} b_{\alpha'}(\mathbf{k}) \right] \left[b_{\alpha'}^{\dagger}(\mathbf{k}) \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial k_{2}} b_{\alpha}(\mathbf{k}) \right] \\ - \left[b_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{k}) \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial k_{2}} b_{\alpha'}(\mathbf{k}) \right] \left[b_{\alpha'}^{\dagger}(\mathbf{k}) \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial k_{1}} b_{\alpha}(\mathbf{k}) \right] \right\}. \quad (6.80)$$

Esta expresión no representa problema para su evaluación numérica: el gradiente del hamiltoniano se obtiene analíticamente, mientras que los eigenvalores y eigenvectores se obtienen con excelente precisión de la diagonalización de la Ec. (6.71).

La zona magnética de Brillouin comprende el intervalo $k_1 \in [0, 2\pi/qb]$, $k_2 \in [0, 2\pi/b]$. Sin embargo, en la sección 4.9 encontramos que las funciones de onda presentan una simetría adicional si consideramos la zona comprendida por el intervalo $k_1 \in [0, 2\pi/qb]$, $k_2 \in [0, 2\pi/qb]$ que llamaremos zona magnética de Brillouin restringida (ZMBR). Así, la ZMB puede dividirse en q zonas magnéticas de Brillouin restringidas. De la estructura de la curvatura de Berry puede verse que ésta es periódica en las ZMBR de tal forma que $[\Omega_{\alpha}(k_1, k_2)]_3 =$ $[\Omega_{\alpha}(k_1, k_2 + 2\pi/qb)]_3 = [\Omega_{\alpha}(k_1, k_2 + 4\pi/qb)]_3 = \dots [\Omega_{\alpha}(k_1, k_2 + 2\pi/b)]_3$. Además la integral de superficie de $\Omega_{\alpha}(k)$ sobre cada una de las ZMBR puede ser sustituida, utilizando el teorema de Stokes, por una integral de línea de $\mathcal{A}_{\alpha}(k)$ a lo largo del contorno C_{ZMBR} que encierra a cada una de las zonas magnéticas de Brillouin restringidas. Dentro de cada uno de estos contornos





Figura 6.4: Brechas del espectro de la mariposa de Hofstadter caracterizadas por la conductividad ζ_{α} . La diferencia de dos valores contiguos de ζ_{α} determina la conductividad de la sub-banda correspondiente.

sólo puede existir un número entero de ceros de la función de onda por lo que esta integral debe ser, al igual que (6.70), un número entero $\bar{\eta}_{\alpha}$

$$\bar{\eta}_{\alpha} = \int_{\text{ZMBR}} \frac{d^2 k}{2\pi} \left[\mathbf{\Omega}_{\alpha} \left(k \right) \right]_3 = \oint_{C_{\text{ZMBR}}} \frac{d \mathbf{k}}{2\pi} \cdot \mathbf{A}_{\alpha} \left(\mathbf{k} \right)$$
(6.81)

que cumple $\eta_{\alpha} = q\bar{\eta}_{\alpha}$. La figura 6.3 muestra la gráfica obtenida para la curvatura de Berry en la zona magnética de Brillouin restringida. El ejemplo corresponde a $\sigma = 1/3$, con lo cual tenemos que cada nivel de Landau se rompe en tres sub-bandas. La integral de superficie dividida entre 2π da el valor de $\bar{\eta}_{\alpha}$ [Ec. (6.81)]. Comprobamos en todos los casos que el resultado converge a un número entero. Para $\sigma = 1/3$ obtenemos $\bar{\eta}_1 = 1$, $\bar{\eta}_2 = -2$ y $\bar{\eta}_3 = -1$. Al igual que en todos los casos estudiados, se cumple la regla de suma $\sum_{\alpha} \bar{\eta}_{\alpha} = 0$.

Ahora bien, como q y p son números primos relativos deben existir números enteros u y v tales que up + vq = 1. De nuestros resultados observamos que podemos identificar $v \equiv \bar{\eta}_{\alpha}$, con lo cual $(1 - q\bar{\eta}_{\alpha})/p$ es también un número entero [65]; pero dicho número resulta ser, de acuerdo a (6.44), la conductividad σ_{α} de la sub-banda.

En el Cuadro (6.1) se muestran los valores de $\bar{\eta}_{\alpha}$ obtenidos por medio de los cálculos numéricos y el correspondiente valor de la conductividad σ_{α} de la subbanda α para varias elecciones del inverso del flujo magnético σ . Es interesante corroborar que se cumplen las reglas de suma, cuando se llena completamente



Cuadro 6.1: Valores obtenidos para $\tilde{\eta}_{\alpha}$, la conductividad σ_{α} de las sub-banda α , así como la conductividad ζ_{α} asignada a la brecha correspondiente, para un nivel de Landau dado y para distintas selecciones del inverso del flujo magnético σ .

$\sigma = 1/3$				$\sigma = 2/3$			$\sigma = 7/11$					
q = 1, p = 3					q = 2, p = 3				q = 7, p = 11			
α	$\tilde{\eta}_{lpha}$	σ_{α}	ζa	α	$\tilde{\eta}_{lpha}$	σ_{α}	ζα	α	$\bar{\eta}_{lpha}$	σ_{α}	ζα	
3	- 1	0	1	3	-1	1	1	11	-3	2	1	
2	-2	1	1	2	2	-1	0	10	8	-5	-1	
1	1	0	0	1	-1	1	1	9	-3	2	4	
	$\sigma = 4/5$				$\sigma = 1/7$			8	-3	2	2	
	q = 4, p = 5				q = 1, p = 7			7	-3	2	0	
α	η_{α}	σ_{α}	Sα	α	η̃a	σ_{a}	ςα	6	8	-2	-2	
5	-1	1	1	7	1	0	1	5	-3	2	3	
4	-1	1	0	6	1	0	1	4	-3	2	1	
3	4	-3	-1	5	1	0	1	3	-3	2	-1	
2	-1	1	2	4	-6	1	1	2	8	-5	-3	
1	-1	1	1	3	1	0	0	1	-3	2	2	
				2	1	0	0					
					-	-	-					

un nivel de Landau

$$\sum_{\alpha} \tilde{\eta}_{\alpha} = 0, \qquad \qquad \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} = 1. \tag{6.82}$$

Las últimas dos ecuaciones garantizan que la conductividad de Hall total del nivel de Landau sea e^2/h . Sin embargo las contribuciones parciales de las subbandas son valores enteros que pueden seguir una secuencia no monótona.

En el Cuadro (6.1) se consigna también el valor de ζ_{α} que representa la conductividad asignada a la brecha α . Es decir, si la energía de Fermi ε_F se localiza en la brecha α , la conductividad acumulada en el correspondiente nivel de Landau esta dado por ζ_{α} ; ζ_{α} se define de acuerdo a la relación

$$\zeta_{\alpha} = \sum_{\beta=1}^{\beta=\alpha} \sigma_{\beta}.$$
 (6.83)

La conductividad ζ_{α} puede ser ahora representada en el espectro de la mariposa de Hofstadter. En la figura 6.4 se han etiquetado las brechas utilizando ζ_{α} . Es interesante observar que si bien el espectro es simétrico con respecto a los ejes $\varepsilon = 0$ y $\sigma = 1/2$, los valores de ζ_{α} que caracterizan las brechas no lo son.

En las figuras 6.5a y (6.5) b se muestra, para $\sigma = 1/3$ y $\sigma = 2/3$, el comportamiento de la conductividad ζ_{α} de Hall obtenida al variar la energía de Fermi





Figura 6.5: Variación de la conductividad de Hall ζ_{α} como función de la energía de Fermi ε_{F} . (a) $\sigma = 1/3$, (b) $\sigma = 2/3$ y (c) $\sigma = 7/11$. Las líneas punteadas indican la posición de las sub-bandas de energía del espectro.

 ε_F . Dichos casos corresponden a lo observado por von Klitzing [15] en la medición de la conductividad de Hall en heteroestructuras laterales. En la figura 6.5c mostramos, para $\sigma = 7/11$, la secuencia de valores de la conductividad de Hall σ_H al variar la energía de Fermi. Observamos una estructura más compleja comparada con los dos casos anteriores. La precisión actual de los experimentos no permite observar dicha *estructura fina* característica de las sub-bandas.

El caso en el que dos bandas se tocan, formando una sola tiene que ser tratado en forma especial. Dos bandas diferentes pueden ser degeneradas por varios motivos. Por ejemplo, cuando el acoplamiento entre los niveles de Landau es despreciable y el espectro del electrón toma la forma de la Mariposa de Hofstadter, se presentan degeneraciones en aquellas bandas para las que $\sigma = q/p$ con p un número par. El caso más simple corresponde a $\sigma = 1/2$, que presenta una sola banda formada originalmente de dos que se tocan en $\varepsilon = 0$ como puede verse en la figura 6.4. En la misma figura pueden observarse degeneraciones para $\sigma = 1/4, 1/8$, etc. Cuando las degeneraciones ocurren, los índices de las brechas se intercambian. Las dos brechas que forman las alas principales de la mariposa, para $\sigma < 1/2$ poseen índices ζ_{α} dados por 0 y 1 en orden ascendente. Cuando $\sigma > 1/2$ las etiquetas se intercambian tomando el orden 1 y 0. En el punto en el cual $\sigma = 1/2$ y debido a la degeneración, los valores de la conductividad y de las etiquetas de las brechas no están unívocamente definidos. El mismo fenómeno ocurre en las repeticiones del fractal de la mariposa.





Figura 6.6: Densidad de estados como función del acoplamiento entre los niveles de Landau K, en la figura se incluyen todos los valores de los pseudomomentos $k_1 y k_2$. Las regiones más oscuras corresponden a las densidades de niveles más altas. Se muestran los valores de la conductividad de Hall asignadas a cada banda. Se observa que en el punto K = 0.28 las bandas superiores se cruzan dando lugar a que las correspondientes valores de la conductividad se intercambien. Los parámetros usados son $\sigma = 1/3$, $\lambda = 1$.

Las degeneraciones pueden también deberse al acoplamiento entre niveles de Landau. La figura 6.6 muestra el espectro de energía para las tres sub-bandas $(\sigma = 1/3)$ del primer nivel de Landau, como función de la constante de acoplamiento K. En dicha figura observamos que las conductividades de Hall de las dos bandas superiores se intercambian en el punto K = 0.28, en el cual dichas bandas se vuelven degeneradas. Para referirnos a las sub-bandas utilizaremos la notación $\alpha = (1,1)$ y $\alpha = (1,2)$ donde el primer índice indica el nivel de Landau y el segundo el número de sub-banda dentro de ese nivel de Landau. Para K < 0.28 las conductividades de las tres sub-bandas toman los valores consecutivos $\sigma_{1,0} = -1$, $\sigma_{1,1} = 2$ y $\sigma_{1,2} = -1$ mientras que para K > 0.28 los valores de las dos últimas sub-bandas se intercambian. Dicho efecto se refleja en la curvatura de Berry; en las figuras 6.3 y 6.1 se presentan las curvaturas como función de los pseudomomentos para valores de K < 0.28 y K > 0.28 respectivamente. Mientras que para los niveles 0 y 2 de Landau no se observan diferencias, notamos que para el nivel 1 las formas de las curvaturas de los dos niveles superiores cambian drásticamente, reflejando el paso a través de una degeneración. Si bien las formas exactas de $\Omega_{11}(k)$ y $\Omega_{12}(k)$ no se intercambian al pasar a través de la degeneración, las correspondientes integrales de superficie que dan la conductividad, si se intercambian. Los cambios de las conductividades debido al cruzamiento de niveles tiene como resultado que las conductividades de las sub-bandas y las correspondientes etiquetas de las brechas se vean modificados como resultado del acoplamiento entre los niveles de Landau (66).



Capítulo 7

Conclusiones

Hemos considerado el grupo de simetrías del problema de Bloch eléctricomagnético con el fin de estudiar el comportamiento de un electrón de Bloch en campos magnético y eléctrico uniformes. En particular investigamos el espectro de energías y la conductividad de Hall más allá de la aproximación de la respuesta lineal respecto al campo eléctrico.

En ausencia de un potencial periódico bidimensional, las traslaciones magnéticas y las evoluciones eléctricas arbitrarias son simetrías del hamiltoniano del electrón. Sus generadores consisten de una traslación y un cambio de norma que compensa el corrimiento debido a la dependencia espacial y temporal de los potenciales vectorial y escalar. Cuando un potencial periódico es incluido en el hamiltoniano se pierde la invariancia ante traslaciones magnéticas infinitesimales. Sin embargo, el sistema es invariante ante traslaciones finitas en múltiplos de los vectores de red por lo que se puede obtener un conjunto de simetrías que está integrado por las traslaciones magnéticas y evoluciones eléctricas finitas.

Definimos en forma explícita las rotaciones magnéticas como una composición de una rotación espacial y una transformación de norma.

Los grupos de simetrías magnético ME(2) y eléctrico-magnético MEE(2) fueron discutidos como generalizaciones del grupo de Galileo, reemplazando los generadores de las traslaciones, rotaciones y boosts usuales por los correspondientes generadores magnéticos.

Con el grupo de operadores formado por las traslaciones magnéticas y las evoluciones eléctricas, se encontró un conjunto completo de operadores del problema y con base en el construimos la función de onda del electrón independiente. Fue necesario introducir un serie de condiciones de conmensurabilidad que restringen:

- 1. las orientaciones del campo eléctrico respecto a la red periódica,
- los valores del flujo magnético por unidad de celda unitaria y de flujo magnético fundamental y
- los tiempos del operador de evolución.



Conclusiones

Utilizamos como generador auxiliar un operador que produce traslaciones en la energía.

La función de onda construida así es efectivamente una eigenfunción de las traslaciones magnéticas. Esto permite escribir a la función de onda como el producto de una onda plana por la función de modulación que cumple con las condiciones generalizadas de Bloch.

La base de los eigenestados de las traslaciones magnéticas y las evoluciones eléctricas fue empleada en la reducción de la ecuación de Schrödinger a una representación matricial. Si el campo eléctrico no está presente, los eigenvalores de la energía pueden ser hallados por medio de la diagonalización de esta ecuación. Si el campo eléctrico es nulo y el acoplamiento entre los niveles de Landau es despreciable, el problema se reduce a la ecuación de Harper. El espectro de energía como función del inverso del flujo magnético obtenido de esta ecuación es la mariposa de Hofstadter, la cual tiene una estructura de bandas multifractal. Para valores más altos del acoplamiento entre los niveles de Landau se observa que la estructura de bandas de la mariposa se distorsiona. Debido a las simetrías que presenta la ecuación generalizada de Harper en la zona magnética de Brillouin, las bandas son q degeneradas. Del caso en el que el acoplamiento entre los niveles de Landau es despreciable y el campo eléctrico se encuentra en una dirección conmensurable se obtiene una ecuación similar a la de Harper pero que contiene términos de campo eléctrico y de interacción a vecinos distantes. Esta ecuación puede también ser calculada por medio de una rotación magnética a partir de la ecuación en la que el campo eléctrico se encuentra a lo largo de uno de los ejes del cristal. Esto permite relacionar los espectros del electrón en ambas situaciones. En presencia de un campo eléctrico, se obtuvo un espectro de bandas utilizando la función de Green y el método de fracciones continuas.

Estudiamos también la evolución de un paquete de ondas para diferentes valores de los parámetros relevantes del problema. Mostramos que la forma en la que se propaga un paquete de ondas inicialmente localizado depende de la naturaleza del inverso del flujo magnético σ . Si σ es un número racional q/p, el espectro electrónico se compone de p bandas. En estas condiciones la propagación del paquete es balística. Por otro lado, si σ es un número irracional, el espectro estará formado por un número infinito de niveles y el paquete se dispersa más lentamente. La localización electrónica puede inducirse seleccionando $\sigma = \gamma_{\mu}$, donde γ_{μ} es una raíz del polinomio de Laguerre, debido al colapso del espectro de bandas en un solo punto.

También se observan otros fenómenos de localización debidos al cruzamiento frustrado de bandas. En el ejemplo discutido, al variar el acoplamiento entre los niveles de Landau se produce una transición de un espectro de bandas a otro de niveles discretos. Esta transición es acompañada por un cambio en el régimen de transporte.

El campo eléctrico produce localización dinámica. Analizamos una situación en la que el potencial periódico presenta una menor modulación a lo largo del eje x, por lo cual para E = 0 el paquete de ondas se dispersa en dicha dirección. Sin embargo al incrementar la intensidad del campo eléctrico, el paquete se localiza



en la dirección longitudinal, mientras que se traslada y dispersa en la dirección de deriva.

Utilizando las propiedades de los estados de Bloch-Floquet se obtuvieron las expresiones para la corriente y la conductividad de Hall que incluyen el efecto completo de los campos externos. Estos resultados pueden ser obtenidos también al aplicar una extensión del modelo semiclásico del transporte. Los resultados permiten concluir que la magnetoresistencia longitudinal de una sub-banda se cancela de manera exacta. Por otro lado resolviendo la ecuación efectiva de Schrödinger perturbativamente, es posible calcular correcciones a la conductividad expandida en potencias de la intensidad del campo eléctrico, mostrándose que la corrección de orden uno se cancela exactamente.

De las expresiones para la corriente de Hall se dedujo la conductividad de Hall σ_{α} de cada sub-banda expresada en términos de la curvatura de Berry. Asimismo, ζ_{α} , que representa la conductividad acumulada por las bandas inferiores, sirve para etiquetar las brechas. Se presentó un método numérico que permite calcular explícitamente σ_{α} y ζ_{α} .

A pesar de que los valores que toma la conductividad son enteros, como se predice para los niveles llenos de Landau, se espera que la conductividad tenga estructura adicional debida al rompimiento de los niveles de Landau en subbandas. Los valores para la conductividad de las sub-bandas no se ordenan de manera ascendente; pueden organizarse en complicadas series de números enteros. Este efecto ha sido encontrado experimentalmente por von Klitzing y sus colaboradores al trabajar con heteroestructuras laterales. El caso de fracciones con denominador mayor puede dar lugar a una estructura interna más compleja de la conductividad, sin embargo la precisión actual de los experimentos y las fluctuaciones térmicas no permiten discernirla.

El acoplamiento entre los niveles de Landau puede modificar las conductividades de las sub-bandas de manera significativa. La presencia de cruzamiento de bandas ocasiona que los valores de la conductividad se intercambien, dando lugar a que σ_{α} y ζ_{α} modifiquen sus valores en comparación con el caso en que el acoplamiento entre los niveles de Landau es despreciable.

A pesar de que se extendió el resultado de Thouless y Kohmoto para la conductividad de Hall más allá de la aproximación de respuesta lineal queda por encontrar su dependencia explícita en términos del campo eléctrico. Una posibilidad es que la única contribución a la conductividad de Hall sea la de orden cero en el campo eléctrico y las de orden superior no participen como lo sugiere la anulación de los términos de segundo orden. De ser así la conductividad de Hall podría calcularse utilizando los métodos descritos. Otra posibilidad es que la conductividad dependa del campo eléctrico en forma no lineal. En este caso se requeriría de la solución exacta del problema ya que σ_H no se puede expresar perturbativamente en términos del campo eléctrico en aquellos lugares en los que ocurre un salto entre dos números enteros distintos.

En resumen, las principales contribuciones de este trabajo son la determinación del espectro de energías para el problema eléctrico magnético de Bloch y la extensión de los resultados de Thouless y Kohmoto sobre la conductividad de Hall para el caso en el que el campo eléctrico es considerado en forma exacta.



Se mostró que el espectro del problema eléctrico magnético de Bloch está formado por un conjunto de bandas que, en el límite de bajo acoplamiento entre los niveles de Landau, tienen entre si una separación de aproximadamente σbE . Se concluye que a medida que se incrementa el campo eléctrico la estructura de bandas multifractal de la mariposa de Hofstadter se transforma en un espectro de bandas uniformemente espaciadas tipo escalera de Stark.

La conductividad de Hall σ_{α} fue expresada como un invariante topológico en la aproximación lineal en el campo eléctrico y en forma exacta. Se demostró que incluso en el caso en el que el campo eléctrico es tomado en cuenta en forma exacta la conductividad de Hall es un número entero. Esto extiende los resultados de Thouless y Kohmoto obtenidos con la formula de Kubo a una forma más general.

a beer and a provide the pro-

an an in Maria an Anna An an Anna an An

N7

Apéndice A

Unidades

A partir de la sección 2 hemos adoptado un sistema adimensional de unidades. En este apéndice se explica como restaurar las unidades a las principales cantidades que aparecen en el texto.

En el siguiente cuadro se presentan algunas cantidades importantes y sus definiciones.

Nombre	Símbolo	Definición	Valor	
Frecuencia de Ciclotrón	ως	eB/m	$1.758820174 \times 10^{11} (B)$	Hz
Energía de Ciclotrón	$\hbar\omega_c$	ħeB/m	$1.854801798 \times 10^{-23} (B)$	J
Longitud Magnética	l ₀	$\sqrt{\hbar/eB}$	$25.6556405 imes 10^{-9}/\sqrt{B}$	m
Constante de von Klitzing	R_K	h/e^2	25812.807	Ω
Fluxón Magnético	φ ₀	h/e	$2.067833636 \times 10^{-15}$	Wb

Cuadro A.1: Definiciones de algunas cantidades importantes.

A continuación se presenta un cuadro en el que se enumeran las cantidades y operadores más relevantes, sus nombres y el factor por el que deben ser multiplicados para recuperar las unidades en Sistema Internacional (SI).

El procedimiento general para recobrar unidades es el siguiente. Supongamos que O es una cantidad o un operador adimensional definido en términos de otras



U	ni	da	de	
---	----	----	----	--

Nombre	Símbolo	Factor
Energía	$p_0, H, L, V, \Pi_0, \mathcal{O}_0, P_0$	ħωc
Tiempo	t, Q_0	$1/\omega_c$
Distancia	a, b, x_1, x_2	ℓ ₀
Momento	$p_1, p_2, \mathcal{O}_1, \mathcal{O}_2, Q_2, P_2$	ħ/lo
Velocidad	Π_1, Π_2, Q_1, P_1	ħ/mlo
Campo eléctrico	E	$\hbar\omega_c/el_0$
Corriente eléctrica	J	$e\hbar/m\ell_0^3$
Conductividad de Hall	σ _H	$e^2/\hbar=2\pi e^2/h$
Flujo magnético	ō	$\hbar/e=\phi_0/2\pi$
Inverso del flujo magnético	σ	$e/\hbar=2\pi/\phi_0$
Curvatura de Berry	Ω	$\left(\ell_0/\hbar\right)^2$
Densidad superficial de electrones	n_0	$1/\ell_0^2$

Cuadro A.2: Unidades de las cantidades y operadores más importantes.

cantidades u operadores o_1, o_2, \ldots , etc.

$$O \equiv O(o_1, o_2, \dots). \tag{A.1}$$

Los factores de conversión, que aparecen en la tercera columna del Cuadro A, para O y o_1 , o_2 , ... son F, f_1 , f_2 , ... respectivamente. Si queremos recobrar las unidades de todas las cantidades y operadores entonces hacemos

$$O \to FO\left(\frac{o_1}{f_1}, \frac{o_2}{f_2}, \dots\right).$$
 (A.2)

Ejemplo El operador de la corriente en la dirección 2 depende del operador de velocidad Π_2 de la siguiente forma

$$J_2 \equiv J_2 (n_0, \Pi_2) = -n_0 \Pi_2. \tag{A.3}$$



1. 124.144

El factor de conversión de la corriente es $e\hbar/m\ell_0$ y el del operador de velocidad II₂ es $\hbar/m\ell_0$. Para recobrar las unidades utilizamos la Ec. (A.2) y obtenemos que

$$J_2 \rightarrow \frac{e\hbar}{m\ell_0^3} J_2 \left(\ell_0^2 n_0, \frac{m\ell_0}{\hbar} \Pi_2 \right) = -n_0 e \Pi_2 \tag{A.4}$$

Ejemplo La posición a lo largo del eje x está dada por el operador

$$x_1 \equiv x_1 (Q_1, P_2) = Q_1 - P_2. \tag{A.5}$$

Los factores de conversión de x_1 , Q_1 y P_2 son ℓ_0 , $\hbar/m\ell_0$ y \hbar/ℓ_0 respectivamente. Recobramos las unidades usando la Ec. (A.2)

$$x_1 \to \ell_0 x_1 \left(\frac{m\ell_0}{\hbar} Q_1, \frac{\ell_0}{\hbar} P_2 \right) = \frac{\ell_0^2}{\hbar} \left(mQ_1 - P_2 \right). \tag{A.6}$$



Unidades

120



Apéndice B

Electrones de Bloch

El método de fracciones continuas puede emplearse para resolver el problema de un electrón en un potencial periódico. El hamiltoniano para un sistema tal es

$$H = \frac{p^2}{2} + V(x),$$
 (B.1)

donde por simplicidad consideraremos el potencial

$$V(x) = V \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right), \qquad (B.2)$$

a es el parámetro de red y V es la modulación del potencial periódico.

Construimos la función de onda en la misma forma que Zak [67](capítulo 3). El hamiltoniano (B.1) es invariante ante traslaciones en múltiplos enteros de a. Entonces la traslación

$$\mathcal{T}_p = \exp\left(-iap\right) \tag{B.3}$$

es una simetría del hamiltoniano (B.1).

Para asegurarnos de que tenemos una base completa de funciones introducimos el operador

$$\mathcal{T}_{x} = \exp\left(i\frac{2\pi}{a}x\right),\tag{B.4}$$

que produce corrimientos de $2\pi/a$ en el momento del electrón. Las traslaciones \mathcal{T}_p y \mathcal{T}_x conmutan por construcción sin embargo, la última no es una simetría del hamiltoniano.

La función de onda es entonces

$$|\kappa,\lambda\rangle = \frac{1}{\sqrt{a}}\sum_{n} \exp\left(-i\frac{2\pi}{a}\lambda n\right) \left|\kappa + \frac{2\pi}{a}n\right\rangle \tag{B.5}$$

y se puede verificar que es eigenfunción de las traslaciones (B.3) y (B.4)

$$\mathcal{T}_{p}|\kappa,\lambda\rangle = e^{-ia\kappa}|\kappa,\lambda\rangle, \qquad \qquad \mathcal{T}_{x}|\kappa,\lambda\rangle = e^{-i\frac{2\pi}{\alpha}\lambda}|\kappa,\lambda\rangle \qquad (B.6)$$





Figura B.1: Estructura de bandas del espectro de un electrón de Bloch calculado por medio de fracciones continuas. En este ejemplo a = 1 y V = 3.

y que su normalización está dada por

$$\langle \kappa', \lambda' | \kappa, \lambda \rangle = \delta (\kappa' - \kappa) \delta (\lambda' - \lambda),$$
 (B.7)

por lo que podemos decir que forma una base completa de funciones ortogonales [67].

Como dijimos antes, \mathcal{T}_x no es una simetría del hamiltoniano y λ no es un buen número cuántico para sus eigenestados. Por ésto sus eigenestados deben expresarse como una superposición de $|\kappa, \lambda\rangle$

$$|\kappa\rangle = \int_{0}^{a} d\lambda \ c(\lambda) |\kappa, \lambda\rangle = \sum_{n} b_{n} \left|\kappa + \frac{2\pi}{a}n\right\rangle, \tag{B.8}$$

donde

$$b_n = \frac{1}{\sqrt{a}} \int_0^a d\lambda \ c(\lambda) \exp\left(-i\frac{2\pi}{a}\lambda n\right). \tag{B.9}$$

Sustituyendo la función de onda (B.5) en la ecuación de Schrödinger

$$H\left|\kappa\right\rangle = \varepsilon\left|\kappa\right\rangle \tag{B.10}$$

obtenemos la ecuación de diferencias finitas

$$\left[\left(\kappa + \frac{2\pi}{a}n\right)^2 - 2\varepsilon\right]b_n + V\left(b_{n-1} + b_{n+1}\right) = 0.$$
 (B.11)

Esta ecuación tiene una estructura muy parecida a la de Harper y puede ser tratada por el método de fracciones continuas explicado en las secciones 4.7 y 4.8.

En la figura B.1 se observa la estructura de bandas típica de los sistemas periódicos.





Figura B.2: Estructura de bandas del espectro de un electrón de Bloch calculado imponiendo que la función $u(\kappa; x)$ sea periódica. En este ejemplo a = 1 y V = 3.

Los resultados anteriores se pueden verificar resolviendo la ecuación diferencial que surge de (B.1) y (B.10)

$$-\frac{d^2}{dx^2}\psi(\kappa;x) + V\cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right)\psi(\kappa;x) = \varepsilon\psi(\kappa;x)$$
(B.12)

donde $\psi(\kappa; x) = \langle x | \kappa \rangle$.

Las soluciones a la ecuación diferencial anterior son las funciones de Mathieu

$$\psi(\kappa;x) = ce_{\kappa\frac{a}{*}}\left(\frac{\pi}{a}x,\frac{a^2}{\pi^2}V\right), \qquad (B.13)$$

donde $ce_r(z,q)$ es la función par de Mathieu [68] que proviene de la ecuación diferencial

$$\frac{d^2y}{dz^2} + (a - 2q\cos 2z)y = 0.$$
 (B.14)

Existe un conjunto de eigenvalores representado por $a_r(q)$ de la función $ce_r(z,q) = e^{irz} f(z)$ que dan lugar a funciones periódicas f(z) con período $\pi \circ 2\pi$ [69]. Este es el caso de las soluciones de la Ec. (B.12). El teorema de Bloch indica que la solución de (B.12) debe tener la forma

$$\psi(\kappa; x) = e^{i\kappa x} u(\kappa; x) \tag{B.15}$$

donde la función de modulación tiene periodicidad $u(\kappa; x + a) = u(\kappa; x)$. De esta forma, los eigenvalores de la energía están dados por

$$\epsilon = \frac{\pi^2}{2a^2} a_{\star \frac{a}{\pi}} \left(\frac{a^2}{\pi^2} V \right), \qquad (B.16)$$



1.9785

Al aplicar esta condición se obtiene el espectro de energías mostrado en la figura B.2. El espectro presenta una primera banda en $\varepsilon \in [-0.22, 3.1]$ y otra cuyo borde inferior se encuentra en $\varepsilon = 6 \cdot 3$. Estos resultados coinciden con los observados en la figura B.1.

and the second second

an search ann an an tha ann an ann ann ann an tha an trainn an tha ann an tha ann an tha ann an tha an tha an t Ann an tha ann an tha ann an tha ann ann ann ann ann ann an tha ann Ann ann an tha ann an tha ann ann ann an tha ann an tha ann an tha ann ann an tha ann an tha ann ann an tha ann

en la vijerni statu Unitedationalistation

TESIS CON A DE ORIGE

Apéndice C

Ecuación de Harper

C.1. Definición del Generador de Estados Coherentes de Landau

El generador de estados coherentes de Landau se define como

$$D(z) = \exp\left(zA^{\dagger} - z^*A\right) \tag{C.1}$$

donde A y A^{\dagger} son los operadores de ascenso y descenso de los niveles de Landau y z es un número complejo.

Puede demostrarse que los elementos de matriz de D(z) en la base de los niveles de Landau están dados por

$$D^{\nu\mu}(z) = \langle \nu | \exp(zA^{\dagger} - z^{\bullet}A) | \mu \rangle$$

= $e^{-\frac{1}{2}|z|^{2}} \begin{cases} (-z^{\bullet})^{\nu-\mu} \sqrt{\frac{\nu!}{\mu!}} L_{\nu}^{\mu-\nu} (|z|^{2}), & \mu > \nu, \\ z^{\nu-\mu} \sqrt{\frac{\mu!}{\nu!}} L_{\mu}^{\mu-\mu} (|z|^{2}), & \mu < \nu, \end{cases}$ (C.2)

donde L^{μ}_{μ} es el polinomio de Legendre extendido de grado μ .

C.2. Reducción a Bloques de la Matriz del Hamiltoniano

Si aplicamos la transformación (4.33) a la Ec. (4.13) obtenemos

$$\sum_{ij} \mathbb{U}_{i}(\phi) \mathbb{H}_{ij}(k_{1}, k_{2}) \mathbb{U}_{j}^{\dagger}(\varphi)$$

$$= \frac{1}{2\pi q b N} \sum_{n} e^{iq b N(\phi-\varphi)} \sum_{k} e^{-iq b \phi N k} e^{i\sigma b \phi \mathbf{D}_{N_{p}}} \mathbb{Q}_{k}(k_{1}, k_{2}) e^{-i\sigma b \phi \mathbf{D}_{N_{p}}}$$

$$= \delta(\phi-\varphi) \sum_{k} e^{-iq b \phi N k} e^{i\sigma b \phi \mathbf{D}_{N_{p}}} \mathbb{Q}_{k}(k_{1}, k_{2}) e^{-i\sigma b \phi \mathbf{D}_{N_{p}}}. \quad (C.3)$$



La parte interna de la transformación se puede escribir como

$$\left[e^{i\sigma b\phi \mathbf{D}_{N_{\mathbf{F}}}}\right]_{mn} = e^{i\sigma b\phi D_{N}} e^{i\sigma b\phi Nm} \delta_{m,n}. \tag{C.4}$$

Ahora calculamos los términos H_k transformados en la Ec. (C.3), que explícitamente toman la forma

$$\begin{bmatrix} e^{i\sigma b\phi \mathbf{D}_{N_{p}}} \mathbb{Q}_{-1} (k_{1}, k_{2}) e^{-i\sigma b\phi \mathbf{D}_{N_{p}}} \end{bmatrix}_{mn} \\ = e^{i\sigma b\phi D_{N}} Q_{m}^{-} (k_{1}, k_{2}) e^{-i\sigma b\phi D_{N}} e^{-i\sigma b\phi N(p-1)} \delta_{m,0} \delta_{n,p-1}, \quad (C.5)$$

$$\begin{bmatrix} e^{i\sigma b\phi \mathbf{D}_{N_{P}}} \mathbf{Q}_{0} (k_{1},k_{2}) e^{-i\sigma b\phi \mathbf{D}_{N_{P}}} \end{bmatrix}_{mn} \\ = e^{i\sigma b\phi N} e^{i\sigma b\phi D_{N}} Q_{m}^{-}(k_{1},k_{2}) e^{-i\sigma b\phi D_{N}} \delta_{m,n+1} \\ + e^{i\sigma b\phi D_{N}} Q_{m} (k_{1},k_{2}) e^{-i\sigma b\phi D_{N}} \delta_{m,n} \\ + e^{-i\sigma b\phi N_{N}} e^{i\sigma b\phi D_{N}} Q_{m}^{+} e^{-i\sigma b\phi D_{N}} \delta_{m,n-1}, \quad (C.6)$$

$$\begin{bmatrix} e^{i\sigma b\phi \mathbf{D}_{N_{P}}} \mathbf{Q}_{1} \ (k_{1},k_{2}) \ e^{-i\sigma b\phi \mathbf{D}_{N_{P}}} \end{bmatrix}_{mn} \\ = e^{i\sigma b\phi \mathbf{D}_{N}} \mathbf{Q}_{m}^{+} \ (k_{1},k_{2}) \ e^{-i\sigma b\phi \mathbf{D}_{N}} e^{i\sigma b\phi N(p-1)} \delta_{m,p-1} \delta_{n,0}.$$
(C.7)

Las Q_m^-, Q_m y Q_m^+ de las ecuaciones previas son transformadas de la siguiente manera

$$\begin{bmatrix} e^{i\sigma b\phi D_N} Q_m^-(k_1, k_2) e^{-i\sigma b\phi D_N} \end{bmatrix}_{cd} = e^{i\sigma b\phi(c-d)} A_{Nm+c-1}^{d-c-N}(k_1, k_2) = e^{-i\sigma b\phi N} \left[Q_m^-(k_1 + \phi, k_2) \right]_{cd}, \quad (C.8)$$

$$\begin{bmatrix} e^{i\sigma b\phi D_N} Q_m(k_1, k_2) e^{-i\sigma b\phi D_N} \end{bmatrix}_{cd} \\ = e^{i\sigma b\phi(c-d)} A_{Nm+c-1}^{d-c}(k_1, k_2) = [Q_m(k_1 + \phi, k_2)]_{cd}, \quad (C.9)$$

$$\begin{bmatrix} e^{i\sigma b\phi D_N} Q_m^+(k_1, k_2) e^{-i\sigma b\phi D_N} \end{bmatrix}_{cd} \\ = e^{i\sigma b\phi(c-d)} A_{m+c-1}^{d-c+N} (k_1, k_2) = e^{i\sigma b\phi N} \left[Q_m^+(k_1+\phi, k_2) \right]_{cd}.$$
(C.10)

Sustituyendo las Ecs. (C.8)-(C.10) en las Ecs. (C.5)-(C.7) obtenemos que la matriz del hamiltoniano está tiene la siguiente propiedad

$$e^{i\sigma b\phi \mathbf{D}_{N_{p}}} \mathbb{Q}_{k} (k_{1}, k_{2}) e^{-i\sigma b\phi \mathbf{D}_{N_{p}}} = e^{iq b\phi N k} \mathbb{Q}_{k} (k_{1} + \phi, k_{2}).$$
(C.11)

Finalmente, substituyendo (C.11) en (C.3) obtenemos

$$H(k_1 + \phi, k_2) \,\delta(\phi - \varphi) = \delta(\phi - \varphi) \sum_{\mathbf{k}} \mathbb{Q}_{\mathbf{k}} \left(k_1 + \phi, k_2\right). \tag{C.12}$$

TESIS CON LA DE ORIGEN

C.3. Suma de Productos de Funciones de Oscilador Armónico

Queremos calcular la suma de productos de funciones de onda de oscilador armónico que se muestra a continuación

$$\sum_{\mu=0}^{\infty} z^{\mu} \phi_{\mu} (x) \phi_{\mu} (y)$$
 (C.13)

donde $\phi_{\mu}(x)$ es la función de onda de un oscilador armónico dada por

$$\phi_{\mu}(x) = \frac{1}{\sqrt{2^{\mu}\mu! \pi^{1/2}}} e^{-x^{2}/2} H_{\mu}(x) \,. \tag{C.14}$$

Utilizamos la representación integral de los polinomios de Hermite [70, 71]

$$H_{\mu}(x) = \frac{2^{\mu}}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt \ (x+it)^{\mu} e^{-t^2}$$
(C.15)

y escribimos la Ec. (C.13) utilizando la definición anterior e integramos obteniendo finalmente

$$\sum_{\mu=0}^{\infty} z^{\mu} \phi_{\mu} (x) \phi_{\mu} (y) = \frac{1}{\pi^{2}} \sum_{\mu=0}^{\infty} \frac{(2z)^{\mu}}{\mu!} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dt \, ds \, (x+it)^{\mu} \, (y+is)^{\mu}$$
$$= \frac{1}{\pi \sqrt{1-z^{2}}} \exp\left[\frac{4xyz - (x^{2}+y^{2})(1+z^{2})}{2(1-z^{2})}\right]. \quad (C.16)$$



1.3.1

128



.

Apéndice D

Artículo: Bloch Electrons in Electric and Magnetic Fields

D.1. Resumen

Investigamos un electrón de Bloch en dos dimensiones sujeto a campos eléctrico y magnético constantes. El modelo resultante es governado por una ecuación de diferencias finitas con un espectro de cuasi-energías que interpola una estrucutura de mariposa con una estructura tipo escalera de Stark. Estos resultados fueron obtenidos por medio de los operadores de las traslaciones eléctricas y magnéticas.

D.2. Abstract

We investigate Bloch electrons in two dimensions subject to constant electric and magnetic fields. The model that results from our pursuit is governed by a finite difference equation with a quasienergy spectrum that interpolates between a butterflylike structure and a Stark ladder structure. These findings ensued from the use of electric and magnetic translation operators.

D.3. Artículo



PHYSICAL REVIEW B

VOLUME 61, NUMBER 15

15 APRIL 2000-I

Bloch electrons in electric and magnetic fields

Alejandro Kunold

Departamento de Ciencias Básicas, Univerzidad Autónoma Metropoliana-Azcapotzaico, Av. S. Pablo 180, Mézico D.F. 02200, Mezico

Manual Torres

Instituto de Física, Universidad Nacional Autóana de Mésico, Aprilo, Postal 20-364, México D.F. 01000, Mexico (Received 11 October 1999)

Work investigate Block electrons in two distantions subject to constant electric and magnetic fields. The model that remains from our prevails is governed by a finite difference equation with a guarantemary guarantee share indeplete the second second second second second second second second from the use of electric and marries transmission commune.

We consider the problem of an electron moving in a twodimensional lattice in the presence of applied electric and reagnetic fields. We refer to this as the two-dimensional electric-magnetic Bloch problem (EMB). The corresponding magnetic Bloch system (MB) has a long and rich history. An important carly contribution to the analysis of the symmetries of the MB problem was made by Zak.⁴ who worked out the representation theory of the group of magnetic translas is the problem was made by Zak.⁴ who worked out her processing approximation.⁵ and Rash derived a dual Harper equation ¹ in the strong magnetic-field intel. The studies of the basilitial self-similar structure of the butterfly proctrum.⁵ A remarkable experimental mailization of the line application in the strong wave guide.⁶ The symmetries of the EMB problem were analyzed some time ago by Abby protection-magnetic operators, and worked out their irreducible representation, but his paper we utilize the properties of the electric-magnetic operators in order to derive a finite differ procession of the Strong the dynamic of the BdB problement of the Start induce the transmission of the Start strain the sports we utilize the properties of the electric-magnetic operators in order to derive a finite differ structure and a Stark ladder structure.

For the purposes of our research we consider the motion of an electron in a two-dimensional periodic potential, subject to a uniform magnetic field B perpendicular to the plane and to a constant electric field \tilde{E} , lying on the plane according to $\tilde{E} = E(\cos\theta, \sin\theta)$ with θ the angle between \tilde{E} and the lattice x_1 such The dynamics of the electron is governed by a time-dependent Schrödinger equation that for convenience is written as

$$S\Psi(t,\bar{t}) = \left[\pi_0 - \frac{\pi_1^2 + \pi_2^2}{2m} - U(\bar{t})\right]\Psi(t,\bar{t}) = 0, \quad (1)$$

where $\pi_0 = p_0 + A_0$ and $\vec{w} = \vec{p} + \vec{A}$, with the momentum operator $p_{\mu} = [i\partial/\partial t, -i\nabla]$. Units have been chosen here in which A = c = c = 1. Where necessary we use a covariant no-

0163-1829/2000/61(15)/9879(4)/815.00

PR.B 61 9879

02000 The American Physical Society

tation with space-time three vectors $x_{\mu} = (t, \bar{t}); \ \mu = 0, 1, 2$. Equation (1) can be considered as an eigenvalue equation for the operator S with eigenvalue O. We adopt a gaugeindependent procedure, thus the gauge potential is written as

$$A_0 = (\beta - 1)r \cdot E,$$

$$A_1 = (\alpha - 1/2)Bx_2 - \beta E_1 t,$$

$$A_2 = (\alpha + 1/2)Bx_1 - \beta E_2 t.$$
(2)

This potential yields the correct background fields independent to parameters α and β . A general potential can be represented by its Fourier decomposition, however, for simplicity we shall consider the potential

 $U(x_1, x_2) = U_1 \cos(2\pi x_1/a) + U_2 \cos(2\pi x_2/a).$ (3)

Let $(t, \tilde{r}) - (t + \tau, \tilde{r} + \tilde{R})$ be a uniform translation is space and time, where τ is an arbitrary time and \tilde{R} is a lattice vector. The classical equations of motion remain invariant under these transformations, whereas the Schrödinger equation does not, the reason being the space and time departion does not, the reason being the space and time departies of the system remain invariant under the combined action of space-time translations and space transformations. Following Auby and Miller² we define the electric and magnetic constitution operators

$$T_{a}(\tau) = \exp(-i\tau \mathcal{O}_{a}), \quad T_{a}(a) = \exp(ia\mathcal{O}_{a}), \quad (4)$$

where j=1,2 and the symmetry generators are written as new covariant derivatives $\mathcal{O}_{\mu} = p_{\mu} + \mathcal{A}_{\mu}$, with the components of the gauge potentials \mathcal{A}_{μ} given by

$$A_0 = \beta \vec{r} \cdot \vec{E}$$

$$A_1 = (\alpha + 1/2)Bx_2 - (\beta - 1)E_1t$$

$$A_1 = (\alpha - 1/2)Bx_1 - (\beta - 1)E_1t,$$
 (5)

The symmetry operators in Eq. (4) commute with the operator S in Eq. (1). The electric-magnetic operators given by Ashby and Miller include simultaneous space and time translations; we deemed it more convenient to secure the effect

TESIS CON FALLA DE ORIGEN 9880

of the time evolution generated by the T_0 to that of the space translations generated by T_j . The following commutators can be worked out with the previous expressions

$$[\pi_0, \pi_j] = -iE_j, [\pi_1, \pi_2] = -iB,$$

 $[\mathcal{O}_0, \mathcal{O}_j] = iE_j, [\mathcal{O}_1, \mathcal{O}_2] = iB.$ (6)

with all other commutators being zero. The commutators in the second line of Eq. (6) are part of the more general Lie algebra of the magnetic-electric Euclidean two-dimensional group." Schrödinger's equation and the symmetry operators group. Schoolinger's equation and the symmetry operators are expressed in terms of covariant derivatives π_{μ} and \mathcal{O}_{μ} , respectively. A dual altustion in which the roles of π_{μ} and \mathcal{O}_{μ} are interchanged, could be considered. According to Eqs. (2), (5), and (6), the dual problem corresponds to a simultaneous reverse in the directions of B and \vec{E} .

The symmetry operators in Eq. (4) commute with S but they do not commute with each other. We follow a three step method to find a set of simultaneously commuting symmet operators. (1) First we consider a frame rotated at angle θ , with the axis along the longitudinal and transverse direction relative to the electric field. An orthonormal basis for this frame is given by $\hat{e}_L = (\cos \theta, \sin \theta)$ and $\hat{e}_T = (-\sin \theta, \cos \theta)$. We assume a particular orientation of the electric field, for which the following condition holds

$$\rho = \tan \theta - \frac{E_2}{E_1} - \frac{m_2}{m_1}.$$
 (7)

where m₁ and m₂ are relatively prime integers. This condition insures that spatial periodicity is also found both along the transverse and the longitudinal directions. Hence, we define a rotated lattice spanned by vectors $b_L = b\hat{e}_L$ and $b_T = b\hat{e}_T$ where $b = a\sqrt{m_1^2 + m_2^2}$. The spatial components of the symmetry generator \mathcal{O} are projected along the longitudinal and transverse directions : $\mathcal{O}_L = \hat{e}_L \cdot \hat{\mathcal{O}}$ and $\mathcal{O}_T = \hat{e}_T \cdot \hat{\mathcal{O}}$. It is readily verified that $[\mathcal{O}_0, \mathcal{O}_T] = 0$. (2) For the rotated lattice, we regard the number of flux

quanta per unit cell to be a rational number p/q, that is

$$\phi = \frac{Bb^2}{2\pi} = \frac{p}{q}.$$
 (6)

We can then define the extended supportation. A rectangle made of q adjacent lattice cells of side b contains an integer number of flux quanta. The basis vectors of the superlattice are chosen as $q \delta_L$ and δ_T . Under these conditions the iongitudinal and transverse magnetic translations $T_L(qb) = exp(iqbO_L)$ and $T_T(b) = exp(ibO_T)$ define commuting

$$\tau_0 = \frac{2\pi}{qbE} = \frac{1}{p} \left(\frac{b}{v_d} \right), \qquad (9)$$

BREF BRORTS

where $v_d = E/B$ and we utilized Eq. (8) to write the second equality, b/v_d is the period of time it takes an electron with drift voicity v_d to reveal between lattice points. Hence, the meaning of Eq. (9) is that the ratio of the Stark indeer spac-ing (bE) to the helicionia non-forth equations energy (2 v_{ed}/b) is given by the ratio can annhow $d = \rho t_d$. We homoforth consider that the where conditions (7), (8),

and (9) hold simultaneously. In this case the three EMB operators—the electric evolution $T_0 = T_0(\tau_0)$ and the magnetic translations $T_L = T_L(qb)$, and $T_T = T_T(b)$ —form a set of mutually commuting symmetry operators. In addition to the symmetry operators, we can define the energy translation operator

$$T_{g} = \exp\left(-i\frac{2\pi}{\tau_{0}}t\right), \qquad (10)$$

that produces a finite translation in energy by $2\pi/\tau_0$ = qbE. T_{g} commutes with the three symmetry operators but not with S. Its eigenfunction $exp(-iabE\xi)$ defines a quasi-

how with S, its eigenstances and $-\frac{1}{2}\sqrt{2}\sqrt{2}$. Maying defined σ_0 , T_{d} , and T_{p} that commute with each other and that also commute with S, we can look for solu-tions of the Schrödiager equation characterized by the qualitary T_{d} and qualitary T_{d} and δ_{T} quarks much much and δ_{T} quarks much and δ_{T} quarks much much and δ_{T} quarks much and δ_{T} quarks much much and δ_{T} quarks much and δ_{T} quarks much much and δ_{T} quarks much and δ_{T} quarks much much and δ_{T} quarks much and δ_{T} quarks much and δ_{T} quarks much much and δ_{T} quarks much and δ_{T} quarks much and δ_{T} quarks much and δ_{T} and quarks much and δ_{T} quarks much and δ_{T} quarks much and δ_{T} and quarks much and δ_{T} quarks much and δ_{T} quarks much and δ_{T} and quarks much and δ_{T} quarks much and δ_{T} quarks much and δ_{T} and quarks much and δ_{T} quarks much and δ_{T} quarks much and δ_{T} and quarks much and δ_{T} quarks mu bers according to

$$T_0 \Psi = \exp(-i\tau \mathcal{E})\psi,$$

 $T_L \Psi = \exp(ik_Lqb)\psi,$

Tr♥=exp(/kr+). an

In particular, the previous relations imply that if a simple space-time translation acts on the wave function, the latter satisfy the generalized Bloch conditions

$$\begin{split} \Psi(i,\tau_{0},\bar{r}) = \exp\{-i\tau_{0}(\bar{r}+A_{0}(t,\bar{r}))\}\Psi(t,\bar{r}), \\ \Psi(t,\bar{r}+q\bar{b}_{\perp}) = \exp\{iqb(k_{\perp}+A_{k}(t,\bar{r}))\}\Psi(t,\bar{r}), \\ \Psi(t,\bar{r}+\bar{b}_{T}) = \exp\{ib(k_{T}+A_{T}(t,\bar{r}))\}\Psi(t,\bar{r}), \end{split}$$
(12)

We now find convenient to apply a transformation to new variables given by

$$X_0 = -i, \quad P_0 = O_0,$$

$$X_1 = \pi_T + m \frac{E}{B}, \quad P_1 = \pi_L/B,$$

$$X_2 = O_L/B, \quad P_2 = O_T + m \frac{E}{B},$$
(13)

that satisfy $[X_{,,P}] = i$ for a = 0, 1,2. The applicit relation between $(X_{,,P})$ and $(x_{,,P})$ can be worked one using the definition of π_{a} , and $G_{,a}$ and Eqs. (2) and (3). The transformation is not constructed because of communication $[P_{a}, X_{,2}] = iE/B_{,a}$ all others being zero. Applied to Eq. (1) the transformation yields for the Schwädinger equation



PR.0 61

Artículo: Bloch Electrons in Electric and Magnetic Fields

PRB 61

$$\left(P_0 + \frac{E}{B}P_3\right)\Psi = \left[\frac{B^2P_1^2 + X_1^2}{2m} + \frac{mv_d^2}{2} + U(x_1, x_2)\right]\Psi,$$
(14)

where x_1 and x_2 have to be written in terms of the new variables as

$$\frac{x_1}{a} = \frac{m_2}{b} (P_1 - BX_2 - EX_0) + \frac{m_1}{b} (BX_1 - P_2),$$

$$\frac{x_2}{a} = -\frac{m_1}{b} (P_1 - BX_2 - EX_0) + \frac{m_2}{b} (BX_1 - P_2). \quad (15)$$

For U=0 the dynamics is cyclic in coordinates X_3 and X_6 . The appearance of the time variable X_6 introduced by the periodic potential suggests that an approximation is required to solve the problem (e.g., adiabatic approximation, How-ever, as we show below the use of an appropriate representation makes such an approximation unnecessary. We a dopt the P_6, P_1, P_3 representation $\Psi_{cd_1,d_2,d_3}(P)$ these functions yield exact segminations of the Linesch part of the functions yield exact segminations, with the cyclo-bien fight-hand idde of Eq. (4) (a+1/2a)), with the cyclo-variables $(X_{a}, F_{a}; X_{a}, F_{a})$, we notice that the four operations (J_{a}, J_{a}) , (T_{a}, T_{a}) with all possible imager values of (J_{a}, J_{a}) . (The cyclosed set of operators. The demonstra-tion follows similar steps as those presented by Zak in Ref. 10. Hence a complete set of functions, for the subspace $(X_0, P_0; X_2, P_2)$, is provided by the eigenfunctions of the operators $(T_0, T_L^i, T_T^i, T_S^i)$, we write them down and verify their correctness:

$$\begin{split} \phi_{\delta_{L},\delta_{T},s_{L}}(P_{0},P_{2}) &= \sum_{l=1}^{L} c_{m} e^{i(d \cdot b \cdot L(p_{l}-m))} e^{i(1 \cdot m \cdot b) m \delta_{L}} \\ &\times \delta(P_{0} - \mathcal{E} - l \cdot q b \mathcal{E}) \\ &\times \delta\left(P_{2} - k_{T} + \frac{2\pi}{b} m\right), \end{split}$$
(16)

where we defined $\sigma = 1/\phi = q/p$. It is easy to check that this function automatically satisfies the first and third EMB transitions in Eq. (11), whereas the second equation is a satisfied by imposing the periodicity condition $c_{\alpha+p} - c_{\alpha-}$. In addition, ϕ_i is a bole element of the energy translation operator Eq. (10) with eigenvalue exp(-4 ϕ E). The wave function Ψ is then expanded in terms of χ_n and $\phi_{k_n,k_T,n,\ell}$. The operator $T_{\rm g}$ is not a symmetry of the problem, so we have to multiply ϕ by a coefficient $d_{\rm g}$ and add over all possible values of ξ ; the resulting wave function can be recast as

$$\Psi_{k_{L},\delta_{T},\delta}(P) = \sum_{a,l,m} a_{a}\chi_{a}(P_{1})h_{m-pl}c_{m}e^{i(2\omega b)m\delta_{L}}$$
$$\times d(P_{b}-C-lqbE) d\left(P_{2}-k_{T}+\frac{2\pi}{b}m\right), \qquad (17)$$

(17) where $h_{m-\mu} = \sum_{ed} e^{e^{i(e+\delta E(\mu)-m)}}$. Of particular interest are the following Bloch conditions obeyed by Ψ with respect to the eigenvalues:

$$\Psi(\mathcal{E}, k_L + bB, k_T) = \Psi(\mathcal{E}, k_L, k_T),$$

$$\Psi(\mathcal{E}, k_L, k_T + qbB) = g^{iqbl} \Psi(\mathcal{E} + qbE, k_L, k_T). \quad (18)$$

These conditions are quite different from those satisfied by the usual Bloch and magnetic Bloch functions; the second one is not periodic, because in addition to the Bloch phase $e_1^{(qb)_k}$ the $k_T \rightarrow k_T + qb$ shift leads to the change in energy E→E+abE.

Based on wave function (17) it is possible to work out a assessed on wave runcion (//) if is possible to work out a complete solution of the EMB problem, similar to what has been achieved for the rangestic-Bloch problem.¹¹ This will be analyzed elsewhere, ¹² Nevertheless, the approximated so-lution wherein the coupling between different Landau levels indice wherein its coupling covers of interest Landau seven is neglected is interesting cough, and probably more illumi-nating. Within this approximation the Landau number n is also a conserved quantum number and the substitution of Eqs. (17) in (14) yields the secular equation

$$\Delta = \frac{Eb}{2\pi} \Sigma_{\alpha} \Big| \overline{c}_{\alpha}$$

$$= f_{\alpha}(\sigma) \{U_{1}\lambda (\sigma^{-i\omega_{1}\Sigma_{\alpha}} \overline{c}_{\alpha+\omega_{2}} + \sigma^{i\omega_{1}\Sigma_{\alpha}} \overline{c}_{\alpha-\omega_{2}})$$

$$+ U_{2}\lambda^{4} (\sigma^{i\omega_{2}\Sigma_{\alpha}} \overline{c}_{\alpha+\omega_{1}} + \sigma^{-i\omega_{2}\Sigma_{\alpha}} \overline{c}_{\alpha-\omega_{1}}) \Big]. \quad (19)$$

where we defined $\tilde{c}_{m} = e^{i(2\pi i \theta)mk_{L}} k_{m} c_{m}$, $\tilde{\Sigma}_{m} = (2\pi m - k_{f} \theta)\sigma$, $\lambda = \exp\{-i\pi m m_{F}\sigma_{f}$, $f_{m}(\sigma) = e^{-i\pi m_{L}} k_{n}(\pi \sigma)$ and L_{n} are the Laguerre polynomials. The quasienergy \mathcal{E} is related γ_{m} the eigenvalue Δ accounding to $\mathcal{E} = (n + 1/2)\omega_{c}$. + mu2/2+ 4.

The dynamics of the system is then described by Eq. (19), a finite difference equation with distant neighbor couplings m_1 and m_2 , which also includes a linear term proportional to

A finite derivative effektive einer unsetze erspense Contention of the State of the State and State of State of State and State of State

TESIS CON FALLA DE ORIGEN 9882

σ

 $\Delta/(U_0 f_0)$ FIG. 1. Quasionargy spectrum for the lowest Landau level. The energy axis is rescaled to $\Delta f(U_{aff} \phi(\sigma))$, the parameters selected are -100 mm, $U_{g} = 0.5$ mmV, $m = 0.07m_{e}$, $E = 0.05 V(cm and <math>k_T$ 20

and 2 show plots for the scaled Δ spectrum as function of σ .

and a more proof the scales A spectrum as function of \mathcal{O}_{-} ($\mathcal{M} = \operatorname{recall}$ inter for E = 0 the spectrum for $\mathcal{A}_{-}^{T}(\mathcal{A}_{-}^{-}(\sigma))$ is invariant under the substitution $\sigma \rightarrow \sigma + N$ with N an integer. In Fig. 1 for the lowest Landau level we observe that for a strong magnetic field the Hofstadter butterfly is clearly shown for σ in the instruct [0,1]. However, as the magnetic intown for or in the interval [1,2]. Flowever, as the magnetic field decrease (or increases), some of the fine-grained struc-tures of the spectrum are smeared by the effect of the electric field. A weak distorted replica of the butterfly is still ob-served for or in the interval [1,2]. Finally, for bigger values serves for σ in the interval [1,2], rinking, for bigger values of σ , the spectrum is strongly distored by the electric field and the butterfly "flies away." At this limit the effect of the periodic potential is negligible and the spectrum consists of qually spaced levels with separation $\sigma \mathcal{E}b$, i.e., a Stark lad-

¹J. Zak, Phys. Rev. 134, A1602 (1964); I. Dans and J. Zak, Phys. Rev. B 28, 811 (1982); J. Zak. Phys. Rev. Lett. 79, 533 (1997). ²P. G. Harper, Proc. Phys. Soc., London, Sect. A 68, 874 (1955); J.

- Phys.; Condens. Matter 3, 3047 (1991).
- Phys. Commun. Mather 5, 3047 (1991).
 Rau, Phys. Stema Solidi B 69, K9 (1975).
 D. R. Hofstacher, Phys. Rev. B 14, 2239 (1976); for a review see, e.g., J. Sokoloff, Phys. Rep. 126, 189 (1985).
- ⁵For a review see, s.g., T. Geisel, R. Ketzmarick, and G. Peachel, In Question Charge, addied by Q. Castl and B. Chirikov (Cambridge University Press, Cambridge, 1995), p. 633.
 W. Kuhl and H. J. Sköckmann, Phys. Rev. Lett. 60, 3232 (1996).



BRIEF REPORTS

FIG. 2. Quantenergy apecanass of the second Landau level (n = 2). In this case the energy axis is reacaled to $\Delta/(U_0)$, the other parameters are the second as in Fig. 1.

parameters are the same as in Fig. 1. der. For the n = 2 Landau level (Fig. 2) three smeared repli-cas of the butterfly can be observed, the nerrow weist aga-ments of the pict corresponds to the fift band condition given by $\sigma - \gamma_{c}/\pi$, with γ_{c} a sero of the Laguerre polynomial. In conclusion, the electric and magnetic translation sym-functions are derived and their properties established in Eq. (12) and (18). The system is governed by Eq. (19), the spec-trum of which interpolates between a butterflylike structure and a Start ladder structure. This equation offers a very in-teresting model, succeptible to stallyde in terms of dynami-cal systems. We finally remark that the present formalism the linear response approximation.

We have profiled from helpful discussions with Rocio Jauregui and José Luis Matson.

- Ashby and S. C. Miller, Phys. Rev. 139, A428 (1985).
 F. T. Hadjioannou and N. V. Sartis, Phys. Rev. B 84, 5334 (1986); 84, 9606 (1997).
 Zak, Phys. Rev. Lett. 71, 3623 (1993).
 Zak, Phys. Rev. Lett. 71, 3633 (1987).
 Zak, Phys. Rev. Lett. 71, 863 (1987).
 Zak, Charlet and M. Torse (upperbilled).
 R. Contenda, D. Weiss, and K. von Kitclag, Phys. Rev. Lett. 61, 124 (1973).
 S. Charlet and M. Torse (upperbilled).
 R. Contenda, D. Weiss, and K. von Kitclag, Phys. Rev. Lett. 61, 124 (1974).
 Schlömm et al., Barophys. Lett. 33, 663 (1986).





Artículo: Bloch Electrons in Electric and Magnetic Fields

134

TESIS CON FALLA DE ORIGEN
Apéndice E

Fórmula de Kubo

La fórmula de Kubo es una expresión general para la corriente [57, 58] estudiada en la aproximación de respuesta lineal a un campo externo. En esta aproximación la conductividad de Hall se puede escribir como

$$\sigma_H = \frac{n_0}{\nu_F} \left(1 - \sum_{\alpha \le \nu_F} \eta_\alpha \right), \qquad (E.1)$$

donde el índice α denota a la banda, η_{α} está dada por

$$\eta_{\alpha} = \frac{1}{2\pi i} \sum_{\alpha' > \nu_{F}} \int d^{2}k \; \frac{\langle \alpha, \boldsymbol{k} | \Pi_{2} | \alpha', \boldsymbol{k} \rangle \langle \alpha', \boldsymbol{k} | \Pi_{1} | \alpha, \boldsymbol{k} \rangle - \text{c.c.}}{\left[\mathcal{E}_{\alpha} \left(\boldsymbol{k} \right) - \mathcal{E}_{\alpha'} \left(\boldsymbol{k} \right) \right]^{2}}, \tag{E.2}$$

 $\Pi_1 \to \Pi_2$ son los operadores de velocidad introducidos en el capítulo 2, ν_F es el número de sub-bandas llenas por debajo de la energía de Fermi y la suma corre sobre los estados que tienen energía superior a la de Fermi.

En la Ec. (E.2), los elementos de matriz del operador de velocidad pueden ser expresados como

$$\langle \alpha', \boldsymbol{k} | \boldsymbol{\Pi} | \alpha, \boldsymbol{k} \rangle = (\alpha', \boldsymbol{k} | \boldsymbol{\Pi} (\boldsymbol{k}) | \alpha, \boldsymbol{k})$$
(E.3)

donde $|\alpha, \mathbf{k}\rangle$ es el ket de la función de modulación $u_{\alpha}(\mathbf{k}; t, \mathbf{x})$ introducido en la sección 3.4 y el operador de la velocidad puede reemplazarse por

$$\Pi(\mathbf{k}) = \exp\left(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}\right)\Pi\exp\left(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}\right) = \Pi + \mathbf{k}.$$
(E.4)

En la representación de las funciones de modulación el hamiltoniano toma la forma

$$H(\mathbf{k}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{x}} H e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{x}} = \frac{1}{2}\mathbf{\Pi}^2(\mathbf{k}) + V, \qquad (E.5)$$

de tal manera que el operador de velocidad puede escribirse como el gradiente del hamiltoniano

$$\Pi(\boldsymbol{k}) = \nabla_{\boldsymbol{k}} H(\boldsymbol{k}) \,. \tag{E.6}$$



THE R. LEWIS CO., LANSING, MICH.

Finalmente, podemos escribir los elementos de matriz del operador de velocidad como

$$\begin{aligned} (\alpha, k | \mathbf{\Pi} | \alpha', k) &= (\alpha, k | \nabla_{k} H(k) | \alpha', k) \\ &= [\mathcal{E}_{\alpha} (k) - \mathcal{E}_{\alpha'} (k)] (\alpha, k | \nabla_{k} [| \alpha', k)] \\ &= [\mathcal{E}_{\alpha'} (k) - \mathcal{E}_{\alpha} (k)] \nabla_{k} [(\alpha, k|] | \alpha', k). \end{aligned}$$
(E.7)

De la Ec. (E.7), la Ec. (E.2) se escribe como

$$\eta_{\alpha} = \frac{1}{2\pi i} \sum_{\alpha' > \nu_{F}} \int d^{2}k \left[\frac{\partial (\alpha, \boldsymbol{k}|}{\partial k_{2}} | \alpha', \boldsymbol{k} \rangle (\alpha', \boldsymbol{k}| \frac{\partial |\alpha, \boldsymbol{k} \rangle}{\partial k_{1}} - \frac{\partial (\alpha, \boldsymbol{k}|}{\partial k_{1}} | \alpha', \boldsymbol{k} \rangle (\alpha', \boldsymbol{k}| \frac{\partial |\alpha, \boldsymbol{k} \rangle}{\partial k_{2}} \right]. \quad (E.8)$$

Usando la identidad

$$\sum_{\alpha < \nu_F < \alpha'} \left[|\alpha, k\rangle \left(\alpha, k \right] + |\alpha', k\rangle \left(\alpha', k \right] \right] = 1$$
 (E.9)

tenemos que la conductividad de Hall de la banda α está dada por

$$\eta_{\alpha} = \frac{1}{2\pi i} \int d^2k \int d^2x \left[\frac{\partial u_{\alpha}^{*}(\boldsymbol{k}; \boldsymbol{t}, \boldsymbol{x})}{\partial k_2} \frac{\partial u_{\alpha}(\boldsymbol{k}; \boldsymbol{t}, \boldsymbol{x})}{\partial k_1} - \frac{\partial u_{\alpha}^{*}(\boldsymbol{k}; \boldsymbol{t}, \boldsymbol{x})}{\partial k_1} \frac{\partial u_{\alpha}(\boldsymbol{k}; \boldsymbol{t}, \boldsymbol{x})}{\partial k_2} \right]. \quad (E.10)$$

Arreglando las derivadas en la ecuación anterior obtenemos

$$\eta_{\alpha} = \frac{i}{2\pi} \int d^2k \; \frac{\partial}{\partial k_1} \left[\int d^2x \; u^*_{\alpha} \left(\boldsymbol{k}; t, \boldsymbol{x} \right) \frac{\partial u_{\alpha} \left(\boldsymbol{k}; t, \boldsymbol{x} \right)}{\partial k_2} \right] \\ - i \int d^2k \; \frac{\partial}{\partial k_2} \left[\int d^2x \; u^*_{\alpha} \left(\boldsymbol{k}; t, \boldsymbol{x} \right) \frac{\partial u_{\alpha} \left(\boldsymbol{k}; t, \boldsymbol{x} \right)}{\partial k_1} \right]. \quad (E.11)$$

El argumento de la integral anterior es el rotacional del potencial vectorial que equivale a la curvatura de Berry, entonces la conductividad de la banda α es

$$\eta_{\alpha} = \int \frac{d^2k}{2\pi} \left[\nabla_{\boldsymbol{k}} \times \boldsymbol{\mathcal{A}}_{\alpha} \left(\boldsymbol{k} \right) \right]_{3} = \int \frac{d^2k}{2\pi} \left[\boldsymbol{\Omega}_{\alpha} \left(\boldsymbol{k} \right) \right]_{3}.$$
 (E.12)

Este resultado coincide con los de las secciones 6.2 y 6.3 a pesar de que se obtiene de consideraciones completamente diferentes.

TESIS CON FALLA DE ORIGEN

Apéndice F

Potencial Vectorial de la Curvatura de Berry

En este apéndice se demuestra que

$$\mathcal{A}_{\alpha}\left(k_{1},k_{2}\right)=\int_{0}^{\frac{2\pi}{q^{*}}}d\phi \ d_{\alpha}^{\dagger}\left(k_{1}+\phi,k_{2}\right)\nabla_{\mathbf{k}}d_{\alpha}\left(k_{1}+\phi,k_{2}\right), \qquad (F.1)$$

donde $d_{\alpha}(k_1, k_2)$ es solución de la ecuación de Schrödinger (4.38) dada por

$$H(k_1 + \phi, k_2) d_{\alpha}(k_1 + \phi, k_2) = \left(\mathcal{E}_{\alpha} + Ek_2 - iE\frac{\partial}{\partial k_1}\right) d_{\alpha}(k_1 + \phi, k_2). \quad (F.2)$$

El potencial vectorial de la fase de Berry $\mathcal{A}_{\alpha}(\mathbf{k})$ se define a través del valor esperado de la posición como puede verse en la Ec. (6.19)

$$\delta(\mathbf{k}'-\mathbf{k}) \mathcal{A}^{\alpha',\alpha}(\mathbf{k}) = \langle \alpha', \mathbf{k}' | \mathbf{x} | \alpha, \mathbf{k} \rangle + i \nabla_{\mathbf{k}} \delta(\mathbf{k}'-\mathbf{k}) \delta_{\alpha',\alpha}$$
$$= \langle \alpha', \mathbf{k}' | (Q_1 - P_2, Q_2 - P_1) | \alpha, \mathbf{k} \rangle + i \nabla_{\mathbf{k}} \delta(\mathbf{k}'-\mathbf{k}) \delta_{\alpha',\alpha}. \quad (F.3)$$

En esta ecuación Q_1, Q_2, P_1 y P_2 son los operadores definidos en la Ec. (2.29) y $|k_1, k_2\rangle$ es un ket de la base de funciones de onda (3.25)

$$|\alpha, \mathbf{k}\rangle = \mathcal{W}(k_1) \sum_{\mu, m} e^{i\sigma bm(Q_2 - k_1)} b_m^{\mu} |\mu, \mathcal{E}, k_2\rangle = \mathcal{W}(k_1) |\mathcal{E}, k_2\rangle, \qquad (F.4)$$

donde

$$\mathcal{W}(k_1) = \sum_{l} \left[\mathcal{T}_1 e^{-iqbk_1} \right]^l = \sum_{l} e^{iqbl(EQ_0 + Q_2 - k_1)}.$$
 (F.5)

Las derivadas de estos estados con respecto a los pseudomomentos están dadas



A 1 PERSONAL PROPERTY AND A 1999 AND A 1999

por

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial k_1} |\alpha, \mathbf{k}\rangle &= i \left(k_2 - P_2 \right) |\alpha, \mathbf{k}\rangle - \mathcal{W} \left(k_1 \right) \sum_{\mu, m} \frac{\partial b_m^\mu}{\partial k_1} e^{-i\sigma b k_1 m} \left| \mu, k_2 + 2\pi m/b \right\rangle, \\ \frac{\partial}{\partial k_2} |\alpha, \mathbf{k}\rangle &= i Q_2 \left| \alpha, \mathbf{k} \right\rangle - \mathcal{W} \left(k_1 \right) \sum_{\mu, m} \frac{\partial b_m^\mu}{\partial k_2} e^{-i\sigma b k_1 m} \left| \mu, k_2 + 2\pi m/b \right\rangle. \end{aligned}$$
(F.6)

Agrupando estos resultados obtenemos que

$$\langle \alpha', \mathbf{k}' | (-P_2, Q_2) | \alpha, \mathbf{k} \rangle = -i \nabla_{\mathbf{k}} \delta \left(\mathbf{k}' - \mathbf{k} \right) \delta_{\alpha', \alpha} + i \delta \left(\mathbf{k}' - \mathbf{k} \right) \sum_{\mu, m} b_m^{\mu *} \nabla_{\mathbf{k}} b_m^{\mu} - (k_2, 0) \delta \left(\mathbf{k}' - \mathbf{k} \right) \delta_{\alpha', \alpha} \quad (F.7)$$

En la representación matricial introducida en la sección 4.3 el segundo término del lado derecho de la expresión anterior toma la forma

$$i\delta\left(k'-k\right)\sum_{\mu,m}b_{m}^{\mu*}\nabla_{k}b_{m}^{\mu} = \int_{0}^{\frac{2\pi}{4}} d\phi \ d_{\alpha'}^{\dagger}\left(k_{1}+\phi,k_{2}\right)i\nabla_{k}d_{\alpha}\left(k_{1}+\phi,k_{2}\right).$$
(F.8)

Los operadores Q_1 y P_1 actúan sólo sobre los estados de Landau, por lo que sus valores esperados son proporcionales a $\delta(\mathbf{k'} - \mathbf{k})$

$$\langle \alpha', \mathbf{k}' | (\mathbf{Q}_1, -\mathbf{P}_1) | \alpha, \mathbf{k} \rangle = \mathcal{X}^{\alpha', \alpha} (\mathbf{k}) \, \delta (\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \,.$$
 (F.9)

Sustituyendo estas relaciones en la Ec. (F.3) obtenemos

$$\mathcal{A}^{\alpha',\alpha}(\mathbf{k}) = \mathcal{X}^{\alpha',\alpha}(\mathbf{k}) - (k_2,0) \,\delta_{\alpha',\alpha} \\ + \int_0^{\frac{2\pi}{q^*}} d\phi \,d^{\dagger}_{\alpha'}(k_1 + \phi, k_2) \,i \nabla_{\mathbf{k}} d_{\alpha}(k_1 + \phi, k_2) \,. \quad (F.10)$$

El vector $(k_2, 0)$ resulta de la invariancia de norma discutida en la sección G.2 y puede ser absorbido en la fase de $d_{\alpha}(\mathbf{k})$ tomando

$$d_{\alpha}(\mathbf{k}) \to e^{-i(k_1k_2 - k_1^2/2)} d_{\alpha}(\mathbf{k}).$$
 (F.11)

Por otro lado, el vector $\mathcal{X}^{\alpha',\alpha}(\mathbf{k})$, que se obtiene de una contracción, es entonces periódico en los extremos de la ZMB y su integral de linea sobre el borde de la ZMB se anula. Estamos interesados en el cálculo de cantidades de la forma

$$\int d\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{\mathcal{A}}^{\alpha',\alpha}\left(\boldsymbol{k}\right) = \int_{\text{ZMB}} d^{2}\boldsymbol{k} \left[\nabla_{\boldsymbol{k}} \times \boldsymbol{\mathcal{A}}^{\alpha',\alpha}\left(\boldsymbol{k}\right)\right]_{3}, \quad (F.12)$$

por lo que es posible redefinir al potencial vectorial como

$$\mathcal{A}^{\alpha',\alpha}(k) = \int_{0}^{\frac{2\pi}{q_{1}}} d\phi \, d^{\dagger}_{\alpha'}(k_{1}+\phi,k_{2}) \, i\nabla_{k} d_{\alpha}(k_{1}+\phi,k_{2}) \,. \tag{F.13}$$

De esta expresión se sigue directamente la Ec. (F.1).

<u>, </u>			
	FESIS	CON	
FATI	ADF	ORIC	ieni I
TABL	IN DE	Unit	

Apéndice G

Teoría Semiclásica

G.1. Las Ecuaciones de Movimiento Semiclásicas con Campos Perturbativos

En este apéndice obtenemos las ecuaciones semiclásicas de movimiento para un electrón eléctrico-magnético de Bloch y su representación variacional. Incluimos además la presencia de los campos perturbativos magnético δB y eléctrico δE que pueden variar lentamente en el tiempo y el espacio. Estos están caracterizados por los potenciales vectorial $\delta A(t,x)$ y escalar $\delta A_0(t,x)$ de tal forma que

$$\delta \boldsymbol{B} = \nabla \times \delta \boldsymbol{A}(t, \boldsymbol{x}), \qquad \delta \boldsymbol{E} = -\nabla \delta \boldsymbol{A}_0(t, \boldsymbol{x}). \qquad (G.1)$$

El paquete de ondas del electrón está caracterizado por la función

$$\psi(\boldsymbol{x}) = e^{-i\delta A(\boldsymbol{X})\cdot\boldsymbol{x}} \int d^2 k \,\phi_\alpha(\boldsymbol{k}) \,\varphi_\alpha(\boldsymbol{k};\boldsymbol{x}) \,, \qquad (G.2)$$

formada de la superposición de estados de Bloch pertenecientes a una sola banda como los estudiados en el capítulo 3. El término de norma exp $[-i\delta A(X) \cdot x]$ centra la órbita del paquete alrededor de la posición media X dada por

$$\boldsymbol{X} = \int d^2 \boldsymbol{x} \, \boldsymbol{\psi}^* \left(\boldsymbol{x} \right) \, \boldsymbol{x} \boldsymbol{\psi} \left(\boldsymbol{x} \right) \,. \tag{G.3}$$

Supongamos también que el paquete está localizado en el momento K expresado como

$$\boldsymbol{K} = \int d^2 \boldsymbol{k} \, \phi^*_{\alpha} \left(\boldsymbol{k} \right) \, \boldsymbol{k} \phi_{\alpha} \left(\boldsymbol{k} \right) \, . \tag{G.4}$$

La funcional lagrangiana para el paquete está dada por

$$L[\psi,\psi^*] = -\int d^2 x \,\psi^*(x) \left\{S + \delta S\right\} \psi(x) \tag{G.5}$$



donde *S* corresponde al operador de Schrödinger (2.1) y δS es la contribución de los campos perturbativos magnético y eléctrico y de los términos provenientes de la norma del paquete de ondas (G.2). Elegimos campos δB perpendicular al plano y δE paralelo al mismo. En la norma simétrica sus potenciales pueden escribirse como $\delta A = \frac{1}{2} \delta B \times x$ y $\delta A_0 = \delta E \cdot x$.

En el espacio de los pseudomomentos k, la funcional lagrangiana es

$$L\left[\phi_{\alpha},\phi_{\alpha}^{*}\right] = \int d^{2}k \,\phi_{\alpha}^{*}\left(k\right) \left\{\dot{\phi}_{\alpha}\left(k\right) - \mathcal{E}_{\alpha}\left(k\right)\phi_{\alpha}\left(k\right)\right\} \\ - \int d^{2}k' \int d^{2}k \,\phi_{\alpha}^{*}\left(k'\right)\delta S_{\alpha,\alpha}\left(k',k\right)\phi_{\alpha}\left(k\right), \quad (G.6)$$

donde

 $\delta S_{\alpha',\alpha}\left(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}\right) = \left\langle \alpha',\boldsymbol{k}' \left| \delta S \right| \alpha,\boldsymbol{k} \right\rangle \tag{G.7}$

es el elemento de matriz de δS .

Las ecuaciones de Euler obtenidas de la Ec. (G.6) son

$$\dot{\phi}_{\alpha}(\mathbf{k}) = -i\mathcal{E}_{\alpha}(\mathbf{k})\phi_{\alpha}(\mathbf{k}) - i\int d^{2}\mathbf{k}'\,\delta S_{\alpha,\alpha}\left(\mathbf{k},\mathbf{k}'\right)\phi_{\alpha}\left(\mathbf{k}'\right),\\ \dot{\phi}_{\alpha}^{*}\left(\mathbf{k}\right) = i\phi_{\alpha}^{*}\left(\mathbf{k}\right)\mathcal{E}_{\alpha}\left(\mathbf{k}\right) + i\int d^{2}\mathbf{k}'\,\phi_{\alpha}^{*}\left(\mathbf{k}'\right)\delta S_{\alpha,\alpha}\left(\mathbf{k}',\mathbf{k}\right).$$
(G.8)

Sumando estas contribuciones y las asociadas al término de norma obtenemos que

$$\delta S = \left[\delta \boldsymbol{E} - \delta \dot{\boldsymbol{A}} \left(\boldsymbol{X} \right) \right] \cdot \boldsymbol{x} + \left[\delta \boldsymbol{A} \left(\boldsymbol{x} \right) - \delta \boldsymbol{A} \left(\boldsymbol{X} \right) \right] \cdot \boldsymbol{\Pi}.$$
(G.9)

Los elementos de matriz de este operador pueden calcularse por medio de las Ecs. (6.19), (6.20), (6.21) y (6.22) obteniéndose

$$\begin{split} \delta S_{\alpha,\alpha}\left(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}\right) &= \\ \left[\delta \boldsymbol{E} - \delta \dot{\boldsymbol{A}}\left(\boldsymbol{X}\right)\right] \cdot \left[-i\nabla_{\boldsymbol{k}}\delta\left(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}\right) + \delta\left(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}\right)\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\alpha}\left(\boldsymbol{k}\right)\right] \\ &+ \frac{1}{4}\delta \boldsymbol{B} \cdot \left[\boldsymbol{\Pi}_{\alpha}\left(\boldsymbol{k}\right) + \boldsymbol{\Pi}_{\alpha}\left(\boldsymbol{k}'\right)\right] \\ &\times \left[i\nabla_{\boldsymbol{k}} - \boldsymbol{X} - \boldsymbol{\mathcal{A}}_{\alpha}\left(\boldsymbol{k}\right)\right]\delta\left(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}\right) + \frac{1}{2}\delta \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{\mathcal{L}}_{\alpha}\left(\boldsymbol{k}\right), \quad (G.10) \end{split}$$

donde hemos definido el momento angular

$$\mathcal{L}_{\alpha}(\mathbf{k}) = \sum_{\alpha' \neq \alpha} \mathcal{A}^{\alpha, \alpha'}(\mathbf{k}) \\ \times \left\{ \dot{\mathcal{A}}^{\alpha', \alpha}(\mathbf{k}) + i \left[\mathcal{E}_{\alpha'}(\mathbf{k}) - \mathcal{E}_{\alpha}(\mathbf{k}) \right] \mathcal{A}^{\alpha', \alpha}(\mathbf{k}) \right\}. \quad (G.11)$$

Sustituyendo la Ec. (G.10) en las ecuaciones de movimiento (G.8) obtenemos

$$\dot{\phi}_{\alpha} = -i \left(\mathbf{E}_{\alpha} - \mathcal{P} \cdot \mathcal{A}_{\alpha} + \mathcal{V} \cdot \mathbf{X} \right) \phi_{\alpha} - \frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{k}} \cdot \mathcal{P} \phi_{\alpha} - \mathcal{P} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \phi_{\alpha},$$
$$\dot{\phi}_{\alpha}^{*} = i \left(\mathbf{E}_{\alpha} - \mathcal{P} \cdot \mathcal{A}_{\alpha} + \mathcal{V} \cdot \mathbf{X} \right) \phi_{\alpha}^{*} - \frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{k}} \cdot \mathcal{P} \phi_{\alpha}^{*} - \mathcal{P} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \phi_{\alpha}^{*}, \qquad (G.12)$$



G.1 Las Ecuaciones de Movimiento Semiclásicas con Campos Perturbativos

donde

$$\mathcal{\mathbf{V}}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \delta \mathbf{B} \times \mathbf{\Pi}_{\alpha}(\mathbf{k}) ,$$

$$\mathcal{\mathbf{P}}(\mathbf{k}) = \mathcal{\mathbf{V}}(\mathbf{k}) - \delta \mathbf{E} + \delta \dot{\mathbf{A}}(\mathbf{X}) = \mathcal{\mathbf{V}}(\mathbf{k}) - \delta \mathbf{E} + \frac{1}{2} \delta \mathbf{B} \times \dot{\mathbf{X}} ,$$

$$(G.13)$$

y a la energía \mathcal{E}_{α} le ha sido agregado un término relacionado a la interacción entre el campo magnético y el momento angular \mathcal{L}_{α}

$$\mathbf{E}_{\alpha}(\boldsymbol{k}) = \mathcal{E}_{\alpha}(\boldsymbol{k}) + \frac{1}{2}\delta\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{\mathcal{L}}_{\alpha}(\boldsymbol{k}). \qquad (G.14)$$

Las derivadas temporales de la posición y el momento medio están dadas por

$$\begin{split} \dot{\mathbf{X}} &= \int d^2 k \, \left[\dot{\phi}^*_{\alpha} \left(\mathbf{k} \right) i \nabla_{\mathbf{k}} \phi_{\alpha} \left(\mathbf{k} \right) + \phi^*_{\alpha} \left(\mathbf{k} \right) i \nabla_{\mathbf{k}} \dot{\phi}_{\alpha} \left(\mathbf{k} \right) \right] \\ &+ \int d^2 k \, \left[\dot{\phi}^*_{\alpha} \left(\mathbf{k} \right) \mathcal{A}_{\alpha} \left(\mathbf{k} \right) \phi_{\alpha} \left(\mathbf{k} \right) + \phi^*_{\alpha} \left(\mathbf{k} \right) \mathcal{A}_{\alpha} \left(\mathbf{k} \right) \dot{\phi}_{\alpha} \left(\mathbf{k} \right) \right] \\ &+ \int d^2 k \, \phi^*_{\alpha} \left(\mathbf{k} \right) \dot{\mathcal{A}}_{\alpha} \left(\mathbf{k} \right) \phi_{\alpha} \left(\mathbf{k} \right) , \\ \dot{\mathbf{K}} &= \int d^2 k \, \dot{\phi}^*_{\alpha} \left(\mathbf{k} \right) k \phi_{\alpha} \left(\mathbf{k} \right) + \int d^2 k \, \phi^*_{\alpha} \left(\mathbf{k} \right) k \dot{\phi}_{\alpha} \left(\mathbf{k} \right) . \end{split}$$
(G.15)

Sustituyendo la forma explícita de las ecuaciones de movimiento (G.12) en las ecuaciones anteriores e integrando por partes

$$\begin{split} \dot{\boldsymbol{X}} &= \int d^{2}\boldsymbol{k} |\phi_{\alpha}\left(\boldsymbol{k}\right)|^{2} \left[\nabla_{\boldsymbol{k}} \mathbf{E}_{\alpha}\left(\boldsymbol{k}\right) - \boldsymbol{\mathcal{P}}\left(\boldsymbol{k}\right) \times \boldsymbol{\Omega}_{\alpha}\left(\boldsymbol{k}\right) + \dot{\boldsymbol{\mathcal{A}}}_{\alpha}\left(\boldsymbol{k}\right) \right] \\ &- \frac{1}{2} \int d^{2}\boldsymbol{k} \frac{\partial \boldsymbol{\mathcal{P}}\left(\boldsymbol{k}\right)}{\partial \boldsymbol{k}} \\ &\times \left\{ \phi_{\alpha}^{*}\left(\boldsymbol{k}\right) \boldsymbol{i} \nabla_{\boldsymbol{k}} \phi_{\alpha}\left(\boldsymbol{k}\right) + \left[\boldsymbol{\mathcal{A}}_{\alpha}\left(\boldsymbol{k}\right) - \boldsymbol{\mathcal{X}} \right] |\phi_{\alpha}\left(\boldsymbol{k}\right)|^{2} - \text{c.c.} \right\}, \qquad (G.16) \end{split}$$

$$\dot{\boldsymbol{K}} = \int d^2 \boldsymbol{k} \, \left| \phi_{\alpha} \left(\boldsymbol{k} \right) \right|^2 \boldsymbol{\mathcal{P}} \left(\boldsymbol{k} \right). \tag{G.17}$$

Los resultados obtenidos hasta ahora son exactos. Para calcular el límite semiclásico se aproximan los promedios de las funciones en k por sus valores en X y K. El segundo término de la Ec. (G.16) es cero y las Ecs. (G.16) y (G.17) toman la forma

$$\dot{\boldsymbol{X}} = \nabla_{\boldsymbol{K}} \mathbf{E}_{\alpha} \left(\boldsymbol{K} \right) - \boldsymbol{\mathcal{P}} \left(\boldsymbol{K} \right) \times \boldsymbol{\Omega}_{\alpha} \left(\boldsymbol{K} \right) + \dot{\boldsymbol{\mathcal{A}}}_{\alpha} \left(\boldsymbol{K} \right), \qquad (G.18)$$

$$\dot{\boldsymbol{K}} = \boldsymbol{\mathcal{P}}\left(\boldsymbol{K}\right). \tag{G.19}$$

A primer orden en δB y δE , las Ecs. (G.18) y (G.19) pueden reescribirse como

$$\dot{\boldsymbol{X}} = \nabla_{\boldsymbol{K}} \mathbf{E}_{\alpha} \left(\boldsymbol{K} \right) - \dot{\boldsymbol{K}} \times \boldsymbol{\Omega}_{\alpha} \left(\boldsymbol{K} \right) + \dot{\boldsymbol{A}}_{\alpha} \left(\boldsymbol{K} \right), \qquad (G.20)$$

$$\dot{K} = -\delta E - \dot{X} \times \delta B. \tag{G.21}$$



141

La derivada temporal del potencial vectorial $\mathcal{A}_{\alpha}(\mathbf{k})$ puede sustituirse por derivada direccional a lo largo del campo eléctrico $-\mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{A}_{\alpha}(\mathbf{k})$ (sección 6.3). Además en las Ecs. (6.54) el gradiente de la energía se puede reemplazar por la expresión (6.34). Así las ecuaciones de movimiento toman la forma

$$\dot{\boldsymbol{X}} = \nabla_{\boldsymbol{K}} \left[\Delta_{\boldsymbol{\alpha}} \left(\boldsymbol{K} \right) + \frac{1}{2} \delta \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{\mathcal{L}}_{\boldsymbol{\alpha}} \left(\boldsymbol{K} \right) \right] + \left(\boldsymbol{E} - \dot{\boldsymbol{K}} \right) \times \boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{\alpha}} \left(\boldsymbol{K} \right), \qquad (G.22)$$

$$\dot{\mathbf{K}} = -\delta \mathbf{E} - \dot{\mathbf{X}} \times \delta \mathbf{B}. \tag{G.23}$$

Cuando $\delta E = 0$ las ecuaciones anteriores se reducen a las encontradas por Ming-Che Chang y Qian Niu [60]. En ausencia de los potenciales perturbativos δB y δE las Ecs. (G.22) y (G.23) toman la forma de las ecuaciones semiclásicas halladas en el capítulo 6.

G.2. Representación Variacional de las Ecuaciones Semiclásicas

Es posible mostrar que las Ecs. (G.22) y (G.23) pueden obtenerse de la función lagrangiana

$$L\left(\boldsymbol{K}, \dot{\boldsymbol{K}}, \boldsymbol{X}, \dot{\boldsymbol{X}}\right) = \boldsymbol{K} \cdot \dot{\boldsymbol{X}} + \boldsymbol{\mathcal{A}}(\boldsymbol{K}) \cdot \dot{\boldsymbol{K}} - \delta \boldsymbol{A}(\boldsymbol{X}) \cdot \dot{\boldsymbol{X}} + \delta A_0(\boldsymbol{X}) - \Delta(\boldsymbol{K}), \quad (G.24)$$

donde

$$\delta A_0(\mathbf{X}) = \delta \mathbf{E} \cdot \mathbf{X}, \qquad \delta A(\mathbf{X}) = \frac{1}{2} \delta \mathbf{B} \times \mathbf{X}.$$
 (G.25)

En las ecuaciones anteriores hemos omitido los subíndices de las bandas por simplicidad.

La función lagrangiana anterior resalta el carácter de potencial vectorial de $\mathcal{A}(K)$ y revela que estas ecuaciones son invariantes ante la transformación de norma

$$\mathcal{A}(\mathbf{K}) \to \mathcal{A}(\mathbf{K}) + \nabla_{\mathbf{K}} \Lambda(\mathbf{K}) \tag{G.26}$$

donde $\Lambda(\mathbf{K})$ es una función arbitraria de lo pseudomomentos.



Bibliografía

- [1] K. Klitzing, G. Dorda, y M. Pepper, Phys. Rev. Lett. 45, 494 (1980).
- [2] D. C. Tsui, H. L. Störmer, y A. C. Gossard, Phys. Rev. Lett. 48, 1559 (1982).
- [3] A. Paalanen, D. C. Tsui, y A. C. Gossard, Phys. Rev. B 25, 5566 (1982).
- [4] B. Jeckelmann y B. Jeanneret, Rep. Prog. Phys. 64, 1603 (2001).
- [5] P. J. Mohr y B.N. Taylor, Physics Today 53, BG7 (2000).
- [6] J. T. Devreese y F. M. Peeters, eds., The Physics of the Two-Dimensional Electron Gas (Plenum, New York, 1987).
- [7] J. P. Eisenstein y H. L. Störmer, Science 248, 1461 (1990).
- [8] H. L. Störmer, D. C. Tsui, y A. C. Gossard, Rev. Mod. Phys. 71, S298 (1999).
- [9] T. Chakraborty y P. Pietiläinen, The Quantum Hall Effects (Springer-Verlag, Berlin, 1995), capítulo 1.
- [10] L. Pfeiffer, K. W. West, y H. L. S. y K. W. Baldwin, Appl. Phys. Lett. 55, 1888 (1989).
- [11] P. F. Hopkins, A. J. Rimberg, G. T. R. M. Westervelt, y H. Kroemer, Appl. Phys. Lett. 58, 1428 (1991).
- [12] H. Ibach y H. Lüth, Solid-State Physics. An Introduction to Principles of Materials Science (Springer-Verlag, Berlin, 1996), capítulo 12.
- [13] A. Dorn, M. Sigrist, A. Fuhrer, T. H. T. Ihn, K. Ensslin, W. Wegscheider, y M. Bichler, Appl. Phys. Lett. 80, 252 (2002).
- [14] C. Albrecht, J. H. Smet, D. Weiss, K. von Klitzing, R. Hennig, M. Langenbuch, M. Suhrke, U. Rssler, V. Umansky, y H. Schweizer, Phys. Rev. Lett. 83, 2234 (1999).
- [15] C. Albrecht, J. H. Smet, K. von Klitzing, D. Weiss, V. Umansky, y H. Schweizer, Phys. Rev. Lett. 86, 147 (2001).



We have been a state of the second se

[16]	P. L. Taylor y O. Heinonen, Condensed Matter Physics (Cambridge, UK, 2002), capítulo 10.
[17]	J. H. Davies, The Physics of Low Dimensional Semiconductors (Cambridge, UK, 1998), capítulo 6.
[18]	T. Chakraborty y P. Pietiläinen, The Quantum Hall Effects (Springer- Verlag, Berlin, 1995), capítulo 3.
[19]	D. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, y M. den Nijs, Phys. Rev. Lett. 49, 405 (1982).
[20]	R. Peierls, Z. Phys. 80, 763 (1933).
[21]	Harper, no. 68 en Proc. Phys. Soc. and Sect. A (1955).
[22]	J. Zak, Phys. Rev. 134, A1602 (1964).
[23]	G. Watson, Contemporary Physics 37, 127 (1996).
[24]	P. G. Harper, J. Phys.: Condens Matter 3, 3047 (1991).
[25]	A. Rau, Phys. Status Solidi B 69, K9 (1975).
[26]	M. Y. Azbel', Sov. Phys. JETP 19, 634 (1964).
[27]	D. R. Hofstadter, Phys. Rev. B 14, 2239 (1976).
[28]	U. Kuhl y H. J. Stöckmann, Phys. Rev. Lett. 80, 3232 (1998).
[29]	O. Richoux y V. Pagneux, Europhys. Lett. 59, 34 (2002).
[30]	T. Schlösser, J. P. K. K. Ensslin, y M. Holland, Europhys. Lett. 33, 683 (1996).
[31]	G. Morandi, The Role of Topology in Classical and Quantum Physics (Springer-Verlag, Berlin, 1992), capítulo 6.
[32]	M. K. Fung y Y. F. Wang, Modern Physics Letters B 13, 135 (1999).
[33]	H. Goldstein, Mecánica Clásica (Reverté, España, 1994), capítulo 2.
[34]	N. Ashby y S. Miller, Phys. Rev. B 139, A428 (1965).
[35]	F. T. Hadjioannou y N. V. Sarlis, Phys. Rev. B 54, 5334 (1996).
[36]	F. T. Hadjioannou y N. V. Sarlis, Phys. Rev. B 56, 9406 (1997).
[37]	M. Moshinsky y C. Quesne, Journal of Mathematical Physics 12, 1772 (1971).
[96]	S Weinhorg The Quantum Theory of Fields (Cambridge University Pro-

[38] S. Weinberg, The Quantum Theory of Fields (Cambridge University Press, UK, 1999), vol. I, p. 62.



- [39] F. T. Hadjioannou y N. V. Salris, Phys. Rev. B 54, 5334 (1996).
- [40] P. A. M. Dirac, The Principles of Quantum Mechanics (Oxford University Press, Hong Kong, 1993), vol. 27 de The International series of monographs on physics, capítulo 13.
- [41] J. Zak, Phys. Rev. Lett. 79, 533 (1997).
- [42] T. Dittrich, P. Hänggi, B. K. G. L. Ingold, G. Schön, y W. Zwerger, Quantum Transport and Dissipation (Wiley-VCH Verlag GmbH, Weinheim, 1998), sección 5.3.1.
- [43] T. Geisel, R. Ketzmerick, y G. Petschel, Phys. Rev. Lett. 66, 1651 (1991).
- [44] H. Risken, The Fokker-Planck Equation-Methods of Solution and Applications (Springer-Verlag, Berlin, 1984), vol. 18 de Springer Series in Synergetics, capítulo 9.
- [45] M. Kohmoto, L. P. Kadanoff, y C. Tang, Phys. Rev. Lett. 50, 1873 (1983).
- [46] W. Kinzel y G. Reents, Physics by Computer (Springer-Verlag, Berlin, 1998), sección 2.4.
- [47] F. A. Buttler y E. Brown, Phys. Rev. 166, 630 (1968).
- [48] A. Kunold y M. Torres, Phys. Rev. B 61, 9879 (2000).
- [49] E.N. Economou, Green's Functions in Quantum Physics (Springer-Verlag, Berlin, 1979), parte I, Springer Series in Solid-State Sciences.
- [50] G. Petschel y T. Geisel, Phys. Rev. Lett. 71, 239 (1993).
- [51] T. Dittrich, P. Hänggi, B. K. G. L. Ingold, G. Schön, y W. Zwerger, Quantum Transport and Dissipation (Wiley-VCH Verlag GmbH, Weinheim, 1998), sección 5.3.2.
- [52] A. Messiah, ed., Quantum Mechanics (Wiley, EUA, 1972), capítulo XVII.
- [53] R. Ketzmerick, K. Kruse, D. Springsguth, y T. Geisel, Phys. Rev. Lett. 84, 2929 (2000).
- [54] A. Barelli, J. Bellissard, y F. Claro, Phys. Rev. Lett. 83, 5082 (1999).
- [55] H.N. Nazareno y P. E. de Brito, Phys. Rev. B 64, 045112 (2001).
- [56] Q. Niu, D. Thouless, y Y.-S. Wu, Phys. Rev. B 31, 3372 (1985).
- [57] R. Kubo, J. Phys. Soc. Japan 12, 570 (1957).
- [58] J. Callaway, Quantum Theory of the Solid State (Academic Press, London, 1991), capítulo 6.



- [59] H. Haken, Quantum Field Theory of Solids (North-Holland, London, 1976), capítulo 14.
- [60] M.-C. Chang y Q. Niu, Phys. Rev. B 53, 7010 (1996).
- [61] M.-C. Chang y Q. Niu, Phys. Rev. Lett. 75, 1348 (1995).
- [62] M. Kohmoto, Annals of Phys. 160, 343 (1985).
- [63] G. Morandi, The Role of Topology in Classical and Quantum Physics (Springer-Verlag, Berlin, 1992), capítulo 1.
- [64] J. J. Sakurai, Modern Quantum Mechanics (Addison Wesley, EUA, 1995), pp. 285-304.
- [65] I. Dana, Y. Avron, y J. Zak, J. Phys. C: Solid State Phys. 18, L679 (1985).
- [66] D. Springsguth, R. Ketzmerick, y T. Geisel, cond-mat/9705208 (1997).
- [67] J. Zak, Phys. Rev. Lett. 19, 1385 (1967).
- [68] M. Abramowitz y I. A. Stegun, eds., Handbook of Mathematical Functions (Dover, New York, 1972), p. 721.
- [69] M. Abramowitz y I. A. Stegun, eds., Handbook of Mathematical Functions (Dover, New York, 1972), p. 722.
- [70] G. Arfken, Mathematical Methods for Physicists (Academic Press, San Diego, 1985), capítulo 13.
- [71] M. Abramowitz y I. A. Stegun, eds., Handbook of Mathematical Functions (Dover, New York, 1972), p. 505.

146