

---

# CONTENIDO

---

<b>1</b>	<b>Introducción general</b>	<b>1</b>
1.1	Introducción . . . . .	1
1.2	Organización de la tesis . . . . .	4
<b>2</b>	<b>El gas de electrones interactuantes y la teoría de la funcional densidad</b>	<b>7</b>
2.1	Introducción . . . . .	7
2.2	Hamiltoniano de electrones interactuantes y correlaciones. . . . .	7
2.3	Teoría de la funcional densidad . . . . .	11
2.4	Esquema de Kohn-Sham . . . . .	15
2.4.1	Ecuaciones de Kohn y Sham . . . . .	15
2.4.2	Funcionales de intercambio y correlación en el esquema de Kohn y Sham	17
2.5	El gas de electrones homogéneo . . . . .	19
2.5.1	Correlaciones y dimensionalidad . . . . .	20
2.5.2	Aproximaciones a $E_{xc}[n]$ derivadas de los resultados para el GEH . . .	23
<b>3</b>	<b>Teoría de perturbaciones de KS y el método del potencial efectivo optimizado</b>	<b>25</b>
3.1	Introducción . . . . .	25
3.2	Funcionales implícitas de la densidad . . . . .	26
3.3	Teoría de perturbaciones de KS y la funcional implícita de correlación . . . .	27
3.3.1	Serie perturbativa de KS en términos de la constante de acople $\lambda$ . . .	28
3.3.2	Funcional de correlación explícita en términos de los orbitales de KS .	31
3.4	Método del potencial efectivo optimizado para el cálculo de potenciales correspondientes a funcionales implícitas . . . . .	32
<b>4</b>	<b>Sistemas cuasi bidimensionales</b>	<b>37</b>
4.1	Introducción . . . . .	37
4.2	Propiedades generales de sistemas cuasibidimensionales . . . . .	38
4.3	Funcionales implícitas de intercambio y correlación en el sistema C2D . . . .	43
4.4	Método del potencial efectivo para sistemas C2D . . . . .	48
4.5	Método del potencial efectivo en las representaciones $\{V_{KS,\mu}\}$ y $\{V_{KS,N}\}$ . .	52
4.5.1	Ecuaciones OEP en las representaciones $\{V_{KS,\mu}\}$ y $\{V_{KS,N}\}$ . . . . .	52
4.5.2	Equivalencia del OEP para sistemas abiertos y cerrados . . . . .	55

<b>5</b>	<b>Sistemas cuasi 2D en la aproximación de intercambio exacto</b>	<b>59</b>
5.1	Introducción . . . . .	59
5.2	Intercambio exacto en DFT aplicado a un gas de electrones C2D fuertemente inhomogéneo	
	S.Rigamonti, F.A. Reboredo y C.R. Proetto, Phys. Rev. B <b>68</b> , 235309 (2003) . . . . .	59
5.2.1	Descripción del sistema y método numérico . . . . .	60
5.2.2	Hueco de intercambio exacto . . . . .	62
5.2.3	Resultados . . . . .	63
5.2.4	Conclusiones . . . . .	67
5.3	Intercambio exacto para sistemas abiertos: aplicación al gas C2D formado en un pozo cuántico semiconductor.	
	S.Rigamonti, C.R. Proetto y F.A. Reboredo, Europhys. Lett. <b>70</b> , 116 (2005) . . . . .	67
5.3.1	Descripción del sistema . . . . .	68
5.3.2	Formulación OEP para la funcional de XX y resultados numéricos . . . . .	69
5.3.3	Análisis teórico de los resultados obtenidos . . . . .	72
5.3.4	Conclusiones . . . . .	74
<b>6</b>	<b>Correlación exacta a segundo orden en TPKS aplicada a sistemas cuasi 2D</b>	<b>77</b>
6.1	Introducción . . . . .	77
6.2	Analizando la nueva funcional de correlación: aplicación a un potencial de KS cuadrado	
	S.Rigamonti y C.R. Proetto, Phys. Rev. B <b>73</b> , 235319 (2006) . . . . .	78
6.2.1	OEP en el caso de una sola subbanda ocupada y límite 2D estricto . . . . .	79
6.2.2	Functionales de intercambio y correlación: caso 1S y límite 2D . . . . .	82
6.2.3	Método numérico para el cálculo de potenciales correspondientes a functionales dependientes de subbandas ocupadas y desocupadas. . . . .	85
6.2.4	Aplicación: potencial de KS cuadrado . . . . .	87
6.2.5	Conclusiones . . . . .	94
6.3	Discontinuidades en la estructura electrónica de pozos cuánticos: intercambio versus correlación	
	S.Rigamonti y C.R. Proetto, Phys. Rev. Lett. <b>98</b> , 066806 (2007) . . . . .	95
6.3.1	Resultados numéricos y descripción de la transición $1S \rightarrow 2S$ . . . . .	96
6.3.2	Cálculo analítico de la discontinuidad de $V_{xc}(z)$ en la transición $1S \rightarrow 2S$ . . . . .	97
6.3.3	Evidencia experimental . . . . .	101
6.3.4	Observaciones y conclusión . . . . .	102
<b>7</b>	<b>Conclusiones generales</b>	<b>103</b>
7.1	Introducción . . . . .	103
7.2	Intercambio exacto . . . . .	103
7.3	Correlación parcialmente exacta . . . . .	104
7.4	Trabajo futuro . . . . .	105

---

<b>Apéndices</b>	<b>107</b>
<b>A Comportamiento asintótico de <math>u_{c,1}^{intra}(z)</math> y <math>u_{x,1}(z)</math></b>	<b>109</b>
<b>B Integrales útiles</b>	<b>113</b>
<b>C Material suplementario para el capítulo 5</b>	<b>117</b>
C.1 Ecuación diferencial para los corrimientos . . . . .	117
C.2 Expresión del potencial $V_{\mathcal{F}}(z)$ en términos de los corrimientos . . . . .	118
C.3 Límite asintótico del potencial de intercambio exacto . . . . .	120
C.3.1 Límite asintótico de los potenciales orbitales . . . . .	120
C.3.2 Límite asintótico de los corrimientos . . . . .	121
C.3.3 Límite asintótico de $V_x(z)$ . . . . .	122
C.4 Descripción del método numérico para el cálculo de $V_x(z)$ . . . . .	123
<b>Bibliografía</b>	<b>125</b>
<b>Agradecimientos</b>	<b>131</b>
<b>Publicaciones</b>	<b>133</b>