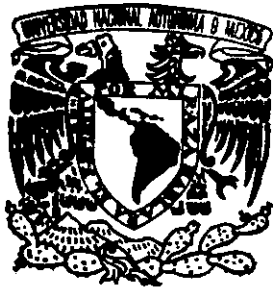


081382  
4  
24



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA  
DE MÉXICO

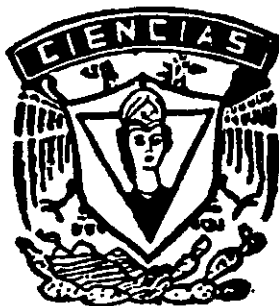
FACULTAD DE CIENCIAS

PROPIEDADES DEL GAS DE  
ELECTRONES BIDIMENSIONAL

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

P R E S E N T A

SUSANA OROZCO SEGOVIA



DIRECTORA DE TESIS:  
DRA. ROSA MARIA MENDEZ VARGAS

MEXICO. D. F.

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

27 3180  
1999

1999



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**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.



posgrado en ciencias físicas  
u n a m

ING. LEOPOLDO SILVA GUTIÉRREZ  
DIRECTOR GENERAL DE ADMINISTRACIÓN ESCOLAR  
UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
P R E S E N T E

Me permito comunicarle que el Comité Académico del Posgrado en Ciencias Físicas, ha designado como sinodales de la alumna SUSANA OROZCO SEGOVIA para dictaminar si el trabajo de investigación desarrollado como tesis titulado: "PROPIEDADES DEL GAS DE ELECTRONES BIDIMENSIONAL" dirigida por la Dra. Rosa María Méndez Vargas, tiene los méritos para obtener el grado de DOCTOR EN CIENCIAS (Física).

TITULAR: DRA. ROSA MARÍA MÉNDEZ VARGAS.- Secretario.  
TITULAR: DRA. ANA CECILIA NOGUEZ GARRIDO.- Suplente.  
TITULAR: DR. EUGENIO LEY KOO.- Vocal.  
TITULAR: DR. MANUEL DE LLANO DE LA GARZA.- Suplente.  
TITULAR: DR. SALVADOR CRUZ JIMÉNEZ.- Vocal.  
SUPLENTE: DR. EDUARDO MUÑOZ PICONE.- Presidente.  
SUPLENTE: DRA. MARÍA DE LOS ANGELES ORTÍZ FLORES.- Vocal.

A T E N T A M E N T E  
"POR MI RAZA HABLARÁ EL ESPÍRITU"  
Ciudad Universitaria, D.F., a 25 de enero de 1999  
EL COORDINADOR DEL POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

  
DR. JORGE FLORES VALDÉS



ING. LEOPOLDO SILVA GUTIÉRREZ  
DIRECTOR GENERAL DE ADMINISTRACIÓN ESCOLAR  
UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
PRESENTE

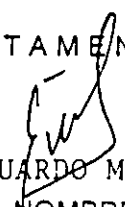
Con fecha 19 de febrero de 1999 de 1998, le informo que  
después de haber revisado el trabajo presentado por el alumno del Posgrado en  
Ciencias Físicas SUSANA OROZCO SEGOVIA

titulado: "PROPIEDADES DEL GAS DE  
ELECTRONES BIDIMENSIONAL

\_\_\_\_\_", considero  
que SI reúne los méritos necesarios para obtener el grado de DOCTORA  
S/NO

\_\_\_\_\_ en Ciencias (FISICA).

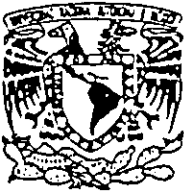
ATENTAMENTE

  
DR. EDUARDO MUÑOZ PICONE  
GRADO, NOMBRE COMPLETO Y FIRMA:

RFC: MUPE371128NVO

LUGAR DE TRABAJO: INSTITUTO DE FISICA, UNAM

FECHA: 19 de febrero de 1999



posgrado en ciencias físicas  
u n a m

ING. LEOPOLDO SILVA GUTIÉRREZ  
DIRECTOR GENERAL DE ADMINISTRACIÓN ESCOLAR  
UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
PRESENTE

Con fecha a 27 de enero de 1999 de 1998, le informo que  
después de haber revisado el trabajo presentado por el alumno del Posgrado en  
Ciencias Físicas SUSANA OROZCO SEGOVIA  
titulado: " PROPIEDADES DEL GAS DE  
ELECTRONES BIDIMENSIONAL  
", considero  
que SI reúne los méritos necesarios para obtener el grado de DOCTORA  
SI/NO  
en Ciencias ( FISICA ).

ATENTAMENTE

GRADO, NOMBRE COMPLETO Y FIRMA  
DRA. ROSA MARIA MENDEZ VARGAS

RFC:MEVR430910-PE9

LUGAR DE TRABAJO: DEPARTAMENTO DE FISICA, FACULTAD DE CIENCIAS, UNAM

FECHA: Cd. Universitaria, D.F., a 27 de enero de 1999,



posgrado en ciencias físicas  
u n a m

ING. LEOPOLDO SILVA GUTIÉRREZ  
DIRECTOR GENERAL DE ADMINISTRACIÓN ESCOLAR  
UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
PRESENTE

Con fecha 19 de febrero de 1999 de 1998, le informo que  
después de haber revisado el trabajo presentado por el alumno del Posgrado en  
Ciencias Físicas SUSANA OROICO SEGOVIA  
titulado: "PROPIEDADES DEL GAS DE  
ELECTRONES BIDIMENSIONAL

\_\_\_\_\_", considero  
que SI reúne los méritos necesarios para obtener el grado de DOCTORA  
SI/NO

\_\_\_\_ en Ciencias (FISICA).

ATENTAMENTE

DR. EUGENIO LEY KOO  
GRADO, NOMBRE COMPLETO Y FIRMA:

RFC: LEKE390320

LUGAR DE TRABAJO: INSTITUTO DE FISICA, UNAM

FECHA: 19 de febrero de 1999



posgrado en ciencias físicas  
u n a m

ING. LEOPOLDO SILVA GUTIÉRREZ  
DIRECTOR GENERAL DE ADMINISTRACIÓN ESCOLAR  
UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
PRESENTE

Con fecha 27 de enero de 1999 de 1998, le informo que  
después de haber revisado el trabajo presentado por el alumno del Posgrado en  
Ciencias Físicas SUSANA OROZCO SEGOVIA

titulado: "PROPIEDADES DEL GAS DE  
ELECTRONES BIDIMENSIONAL

", considero  
que SI reúne los méritos necesarios para obtener el grado de DOCTORA  
SI/NO

en Ciencias ( FÍSICA ).

ATENTAMENTE

*Maria de los Angeles Ortiz Flores*

GRADO, NOMBRE COMPLETO Y FIRMA:  
DRA. MARIA DE LOS ANGELES ORTIZ FLORES

RFC: OIFA431001

LUGAR DE TRABAJO: FACULTAD DE CIENCIAS, UNAM

FECHA: Cd. Universitaria, D.F., a 27 de enero de 1999



posgrado en ciencias físicas  
u n a m

ING. LEOPOLDO SILVA GUTIÉRREZ  
DIRECTOR GENERAL DE ADMINISTRACIÓN ESCOLAR  
UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
PRESENTE

Con fecha 19 de febrero de 1999 de 1998, le informo que  
después de haber revisado el trabajo presentado por el alumno del Posgrado en  
Ciencias Físicas SUSANA OROZCO SEGOVIA

titulado: " PROPIEDADES DEL GAS DE  
ELECTRONES BIDIMENSIONAL

", considero  
que SI reúne los méritos necesarios para obtener el grado de DOCTORA  
SI/NO

en Ciencias ( FISICA ).

ATENTAMENTE

DR. SALVADOR CRUZ JIMENEZ  
GRADO, NOMBRE COMPLETO Y FIRMA:

RFC: CUJS480525

LUGAR DE TRABAJO: DEPARTAMENTO DE FISICA UAM-IZTAPALAPA

FECHA: 19 de febrero de 1999





posgrado en ciencias físicas  
u n a m

ING. LEOPOLDO SILVA GUTIÉRREZ  
DIRECTOR GENERAL DE ADMINISTRACIÓN ESCOLAR  
UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
PRESENTE

Con fecha 19 de febrero de 1999 de 1998, le informo que  
después de haber revisado el trabajo presentado por el alumno del Posgrado en  
Ciencias Físicas SUSANA OROZCO SEGOVIA

titulado: "PROPIEDADES DEL GAS DE  
ELECTRONES BIDIMENSIONAL

\_\_\_\_\_", considero  
que SI reúne los méritos necesarios para obtener el grado de DOCTORA

SI/NO

\_\_\_\_ en Ciencias (FISICA).

ATENTAMENTE

DR. MANUEL DE LLANO DE LA GARZA  
GRADO, NOMBRE COMPLETO Y FIRMA:

RFC: LAGM 360214

LUGAR DE TRABAJO: INSTITUTO DE INVESTIGACIONES. EN MATERIALES, UNAM

FECHA: 19 de febrero de 1999



posgrado en ciencias físicas  
u n a m

ING. LEOPOLDO SILVA GUTIÉRREZ  
DIRECTOR GENERAL DE ADMINISTRACIÓN ESCOLAR  
UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
PRESENTE

Con fecha 19 de febrero de 1999 de 1998, le informo que  
después de haber revisado el trabajo presentado por el alumno del Posgrado en  
Ciencias Físicas SUSANA OROICO SEGOVIA

titulado: "PROPIEDADES DEL GAS DE  
ELECTRONES BIDIMENSIONAL

que SI reúne los méritos necesarios para obtener el grado de DOCTORA  
SI/NO

en Ciencias (FISICA).

ATENTAMENTE

DRA. ANA CECILIA NOGUEZ GARRIDO  
GRADO, NOMBRE COMPLETO Y FIRMA:

RFC: NOGA660717

LUGAR DE TRABAJO: INSTITUTO DE FISICA, UNAM

FECHA: 19 de febrero de 1999

# INDICE

<b>RESUMEN</b>	1
<b>INTRODUCCION</b>	2
<b>CAPITULO I</b>	
<b>Sistemas de electrones en dos dimensiones</b>	7
1 Electrones en la superficie del helio líquido	8
1.1 Los estados de superficie	9
1.2 El cristal de electrones en la superficie del helio líquido	11
2 Capas de inversión	15
2.1 Los efectos cuánticos	16
<b>CAPITULO II</b>	
<b>Modelos teóricos en dos dimensiones</b>	19
1 El gas de electrones en el modelo de jalea uniforme	20
1.1 Funciones base correlacionadas	21
1.2 Cálculos Monte-Carlo variacionales	22
1.3 Funcionales de la densidad	25
2 El modelo de jalea con funciones de Wannier	26
3 El modelo de jalea deformable	27
<b>CAPITULO III</b>	
<b>El método Hartree-Fock en el modelo de jalea deformable</b>	30
1 Teorías del campo medio (Hartree-Fock)	31
2 El gas de electrones bidimensional en el modelo de jalea deformable	34
2.1 La red cuadrada	36
2.2 La red hexagonal	38

2.3 Estrategia para el cálculo de la energía del estado base	40
2.4 La estabilidad del sistema	42
<b>CAPITULO IV</b>	
<b>Resultados</b>	44
1 La convergencia en la energía por partícula	45
1.1 La red cuadrada	47
1.2 La red hexagonal	48
1.3 Límites de convergencia	50
2 Las transiciones magnéticas	53
2.1 La red cuadrada	54
2.2 La red hexagonal	55
3 El estado base del gas de electrones bidimensional	57
4 La densidad de carga electrónica	60
5 La estabilidad de la jalea deformable	62
6 Comparación del modelo con resultados experimentales	67
<b>Conclusiones</b>	71
Agradecimientos	72
Referencias	73

# RESUMEN

En este trabajo se estudian las propiedades del gas de electrones en dos dimensiones en el modelo de jalea deformable. Los cálculos se realizaron con el método autoconsistente de Hartree-Fock. Las funciones de estado consideradas son desarrolladas en términos de orbitales con los que es posible reproducir tanto una fase fluida como una fase localizada en una red con cualquier simetría en dos dimensiones. Este método tiene la virtud de describir las propiedades del sistema en una amplia región de densidades, sin que sea necesario modificar el Hamiltoniano o la función de estado. Se analizan dos tipos de transición para las simetrías cuadrada y hexagonal: la transición entre las fases paramagnética y ferromagnética y la transición entre un estado homogéneo y un estado localizado (transición tipo Wigner). Por primera vez se estudia la simetría hexagonal con el modelo de jalea deformable. Para ambas redes se extendió la región de  $r_s$  donde podemos encontrar convergencia en la energía. Comparando las energías de las dos simetrías estudiadas se encuentra que, en el estado base el gas de electrones cristaliza en una red con simetría hexagonal, resultado que ya había sido reportado por otros autores para un sistema clásico. Se muestra que el modelo de jalea deformable es capaz de corregir la anomalía que presenta el modelo de jalea uniforme en el cálculo de la compresibilidad. El punto de fusión obtenido compite favorablemente con los resultados de otros modelos teóricos y está dentro del orden de magnitud de los resultados experimentales obtenidos en un *MOSFET* de silicio. Estos resultados muestran la importancia de considerar la respuesta del fondo a los cambios de la densidad electrónica de una manera adecuada y la utilidad de un método que nos permite determinar las propiedades del sistema en una amplia región de densidades independientemente del número de términos del desarrollo de la función de estado.

# INTRODUCCION

El estudio a nivel teórico y experimental de sistemas de electrones en menos de tres dimensiones ha tenido una considerable atención en los últimos años. Este interés ha sido motivado por el hecho de que algunas propiedades físicas de sistemas tridimensionales están relacionadas con su comportamiento a lo largo de ciertas direcciones de simetría en una o dos dimensiones. Por otro lado se han descubierto numerosas aplicaciones tecnológicas de sistemas en los que es posible manipular la dimensionalidad.

Se han detectado numerosos sistemas con propiedades físicas que corresponden a sistemas con simetrías en una o dos dimensiones. En una dimensión podemos encontrar polímeros orgánicos en los que las interacciones entre los átomos de una cadena son más intensas que entre los átomos de dos cadenas vecinas. En dos dimensiones tenemos por ejemplo, una monocapa adsorbida en una superficie sólida y sólidos anisotrópicos que pueden conducir la electricidad a lo largo de planos pero no entre planos, como el grafito. Este es el caso de los superconductores cerámicos, en los cuales la superconductividad se presenta en un plano de simetría. Existen otros dispositivos bidimensionales creados en el laboratorio que presentan propiedades físicas muy interesantes como los electrones confinados en dos dimensiones sobre la superficie del helio líquido, o entre las capas de diferentes semiconductores y en las interfases de semiconductores y aislantes.

Los procedimientos empleados en la creación de sistemas de electrones de baja dimensionalidad están ligados a la tecnología del más alto nivel usada en la fabricación de los dispositivos electrónicos utilizados hoy en día. Las capas de electrones se forman por ejemplo en las hetero-uniones del  $GaAs/(AlGa)As$ , y en las uniones metal-aislante-semiconductor ( $MIS$ ) y metal-oxido-semiconductor ( $MOS$ ). Los electrones confinados pierden un grado de libertad y se comportan como un sistema bidimen-

sional ( $2D$ ). Estas estructuras proporcionan un medio para controlar el movimiento de las cargas sobre pequeñas dimensiones, obteniéndose en los laboratorios sistemas de electrones en una y cero dimensiones (puntos cuánticos).

La investigación de las propiedades físicas de sistemas de electrones  $2D$  conocidos como capas de inversión llevó a V. Klitzing al descubrimiento del efecto Hall cuántico, por el cual recibió el premio Nobel en 1985 y a D. C. Tsui, H. L. Störmer y A. C. Gossard al descubrimiento del efecto Hall cuántico fraccional. Por la explicación teórica de este efecto R. Laughlin fue galardonado con el premio Nobel 1998 junto con D. C. Tsui y H. L. Störmer. Los efectos Hall cuántico y cuántico fraccional se descubrieron en los sistemas de electrones  $2D$  formados en la unión  $Si-SiO_2$  y en la interfase del  $GaAs/(AlGa)As$  en presencia de campos magnéticos intensos. En estos sistemas se han observado transiciones entre una fase conductora y una fase aislante. En la capa de electrones depositados sobre la superficie del helio líquido se ha detectado también una transición entre una fase fluida y una fase cristalina.

E. Wigner [1] propuso que cuando se reduce la densidad de electrones de un gas tridimensional, la interacción Coulombiana entre electrones llevaría al sistema a un estado cristalino más favorable energéticamente. La misma posibilidad fue analizada por Crandall y Williams [2] en un sistema en dos dimensiones. La cristalización de electrones fue observada por primera ocasión en un sistema clásico formado por electrones sobre la superficie del helio líquido. En las capas de inversión en el  $GaAs/(AlGa)As$  se encontró un *sólido* de electrones cuántico en presencia de un campo magnético [3]. Únicamente en la estructura MIS del silicio se ha encontrado evidencia de una transición de Wigner cuántica a campo magnético cero. La transición ocurre cuando se disminuye la densidad electrónica [4], de acuerdo a la predicción de Wigner.

La determinación del tipo de red en que cristaliza un sistema de electrones en

dos dimensiones resulta un problema interesante. En el laboratorio ha sido posible determinar con un microscopio electrónico la simetría en la que cristalizan algunos sistemas de partículas cargadas que se comportan clásicamente. Este es el caso de los cristales coloidales y de esferas de poliestireno suspendidas en agua. Se han observado distintas transiciones en un sistema  $3D$ , de una estructura cúbica centrada en el cuerpo a una cúbica centrada en la cara, dependiendo de la densidad coloidal [5]. En un coloide confinado entre un par de placas de vidrio se ha encontrado la transición de un fluido a un cristal hexagonal en dos dimensiones [6].

En sistemas como los electrones atrapados sobre de la superficie del helio líquido, la presencia de una estructura cristalina debe ser detectada mediante la medición de los efectos colectivos, como las resonancias entre las oscilaciones del cristal de electrones y las ondas de la superficie líquida del helio. C. C. Grimes y G. Adams [7] detectaron un cristal de electrones en este sistema y para explicar sus resultados experimentales supusieron que la simetría de la red era hexagonal. Por otro lado, la presencia de un cristal de electrones cuántico en una hetero-unión [8] es detectada con medidas de la conductividad.

La descripción de los sistemas de electrones en  $2D$  y sus propiedades ha sido abordada bajo los puntos de vista clásico y cuántico con diferentes modelos y aproximaciones desde mediados de los años 70's; sin embargo su estudio continúa siendo motivo de gran interés. El gas de electrones resulta un modelo simplificado, muy utilizado para calcular propiedades físicas de sistemas reales.

En este trabajo se estudia un gas de electrones cuántico bidimensional ( $GE2D$ ) en ausencia de un campo magnético. Utilizamos el modelo de jalea deformable con el método Htree-Fock ( $HF$ ) autoconsistente. Con esta técnica calculamos propiedades del estado base del sistema. Evaluamos la función de estado, la energía por partícula y



la estabilidad del sistema. Se estudia la transición de Wigner considerando dos tipos de redes bidimensionales. Resultados originales de esta investigación han sido publicados en la referencia [9] y han sido aceptados para su publicación en la referencia [10].

En el primer capítulo de la tesis se muestran los aspectos generales de los dispositivos en los que se han encontrado experimentalmente los sistemas de electrones en  $2D$ . Describiremos el sistema clásico formado por una descarga de electrones arriba de la superficie del helio líquido y el sistema cuántico formado en la interfase de un semiconductor y un aislante al cargar positivamente una placa metálica localizada del lado del aislante.

En el capítulo dos se describen algunos trabajos teóricos relacionados con nuestra investigación. En la literatura podemos encontrar una gran diversidad de modelos y aproximaciones para estudiar un sistema de electrones degenerado en  $2D$ . En este capítulo nos concretaremos a la descripción del  $GE2D$  en los modelos de jalea uniforme ( $MJU$ ) y de jalea deformable ( $MJD$ ). Ambos modelos proveen un esquema teórico que permite determinar propiedades importantes de un sistema de electrones en  $2D$  y en  $3D$  en una primera aproximación. La diferencia básica entre la jalea uniforme y la jalea deformable consiste en la condición de neutralidad local que en cada uno de estos modelos se impone sobre el sistema. En ambos modelos todas las propiedades del sistema dependen de un solo parámetro de entrada, la distancia entre partículas  $r_s$  (en unidades de radios de Bohr).

En el tercer capítulo mostramos el marco teórico en el que se desarrolla nuestro estudio del  $GE2D$ . Con la finalidad de encontrar la simetría cristalina más estable del sistema consideramos dos tipos posibles de simetría de una red bidimensional. Como soluciones de las ecuaciones de  $HF$  proponemos dos funciones de estado que a densidades altas convergen a ondas planas y a bajas densidades reproducen una simetría

cuadrada y una simetría hexagonal respectivamente. Para las dos simetrías calculamos la función de estado, la energía por partícula, el punto de transición al cristal de Wigner y las transiciones de fase para-ferromagnéticas. El comportamiento de la presión y de la compresibilidad son utilizados como criterios de estabilidad del sistema. Es conocido que en el modelo de jalea uniforme la compresibilidad de un  $GE2D$  se hace negativa a  $r_s > 2$ , por lo que en este modelo el fondo neutralizante homogéneo es visto como un reservorio infinito de presión positiva [11]. Con el objeto de estudiar la estabilidad de la jalea deformable evaluamos la compresibilidad del sistema a varias densidades en la fase fluida y la fase cristalina.

En el cuarto capítulo se muestran los resultados obtenidos para las simetrías cuadrada y hexagonal. Se discuten las transiciones magnéticas y de simetría (de la fase fluida a la fase localizada) para cada una de las redes. Se determina la simetría más estable del sistema en el  $MJD$  y se comparan nuestros resultados con los reportados en la literatura obtenidos en el  $MJU$ . Determinamos el orden de la transición de la fase fluida a la fase localizada, estudiando el comportamiento de la curva de energía y su primera y segunda derivada. Finalmente se compara la densidad a la que ocurre la transición a la fase localizada en nuestros cálculos con la transición de Wigner experimental. En todo el trabajo utilizamos unidades atómicas, con la energía en Rydbergs.

# CAPITULO I

## Sistemas de electrones en dos dimensiones

En la primera parte de este capítulo se describen los sistemas correspondientes a los electrones capturados arriba de la superficie de helio líquido. En la segunda parte se tratan los sistemas de electrones en las capas de inversión.

La diferencia principal entre la capa de electrones formada en la superficie del helio líquido y en los dispositivos semiconductores consiste en que el sistema sobre la superficie del helio se comporta clásicamente aún a temperaturas de unos cuantos cientos de milikelvins, mientras que el comportamiento de los electrones en los otros sistemas es fundamentalmente cuántico en la región de bajas temperaturas (menores de 4.5 K) [12, 13].

A bajas temperaturas el parámetro que determina el comportamiento del sistema es la densidad areal, esto es el número de electrones por unidad de área. La densidad a la que existe el gas de electrones en los distintos sistemas determina que el cristal de electrones tenga un comportamiento clásico sobre la superficie del helio líquido y que la fase cristalina del gas de electrones degenerado en la interfase *GaAs/(AlGa)As* solamente exista en presencia de un campo magnético aún a temperaturas cercanas a 0K. Otras condiciones tales como la masa efectiva de los electrones en el medio y la constante dieléctrica permiten que en un *MOS* existan las condiciones para que se produzca un cristal de electrones bajo el régimen cuántico en ausencia de un campo magnético [4].

# 1 Electrones en la superficie del helio líquido.

Un sistema  $2D$  formado por partículas puntuales cargadas embebidas en un fondo de carga neutralizante homogéneo ha sido estudiado con diferentes aproximaciones desde el punto de vista clásico. En este esquema la intensidad de acoplamiento generalmente está caracterizada por el parámetro de acoplamiento  $\Gamma = \frac{e^2}{rk_B T}$ . Este es el cociente entre la energía Coulombiana y la energía cinética por partícula, donde  $k_B$  es la constante de Boltzman y  $r$  es el radio de Wigner-Seitz en  $2D$  y está dado por la relación  $\pi r^2 n = 1$  en términos de la densidad de partículas  $n$ .

Teóricamente se espera que el sistema de electrones tenga un comportamiento determinado por el valor del parámetro  $\Gamma$ . La energía cinética predomina y el sistema se comporta como un gas cuando  $\Gamma < 1$ ; a densidades para las cuales  $1 < \Gamma < 100$  se espera que el movimiento de los electrones esté altamente correlacionado como en un líquido; a valores mayores de  $\Gamma$  se espera que la energía potencial Coulombiana predomine y de este modo se forme el cristal de electrones. Dentro de los límites de temperatura y densidad ( $10^5 \text{cm}^{-2} < n < 10^9 \text{cm}^{-2}$ ) de los primeros experimentos con el sistema de electrones sobre la superficie del helio líquido, se reportaron valores de  $2 \leq \Gamma \leq 200$ . Grimes y Adams [7] encontraron un valor de  $\Gamma = 137.5 \pm 15$  para la transición de un fluido a una red hexagonal en este sistema.

Experimentalmente se ha encontrado que no es posible aumentar la densidad de electrones sin que aparezcan inestabilidades en la capa de electrones. La densidad máxima que se puede conseguir en un arreglo dado depende del espesor de la película de helio,  $n < 2.4 \times 10^9 \text{cm}^{-2}$  para un volumen de helio ( una capa con un espesor  $d \gg 5000 \text{Å}$ ) y  $n < 10^{11} \text{cm}^{-2}$  para películas delgadas de helio [14]. En todo caso las fuerzas que mantienen la estabilidad del sistema tienen una relación inversa con el

espesor de la película de helio.

## 1.1 Los estados de superficie.

M. W. Cole y M. H. Cohen [15] establecieron teóricamente la existencia de estados electrónicos de superficie en condensados de He y Ne. En estos medios los átomos interaccionan repulsivamente con los electrones, sin embargo fuera del medio, la interacción se da a través de un potencial imagen atractivo, por lo que el balance de ambas fuerzas localiza a un electrón cerca de la superficie del líquido.

En estas condiciones se puede modelar la interacción entre un electrón y el medio con un potencial de la forma

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & x < 0, \\ -V_1 = -\frac{1}{4}e^2 \frac{(\epsilon - 1)}{(\epsilon + 1)d}, & 0 < x < d, \\ -\frac{1}{4}e^2 \frac{(\epsilon - 1)}{(\epsilon + 1)x}, & x > d. \end{cases}$$

donde  $x$  es la distancia del electrón a la superficie,  $d$  es una distancia del orden de una separación interatómica y  $\epsilon$  es la constante dieléctrica del material. Para  $x < 0$  en el interior de la superficie,  $V_0 \approx 1eV$  es la energía requerida para introducir un electrón al líquido. Fuera de la superficie ( $x > 0$ ), a distancias  $x < d$ , el potencial se aproxima al potencial constante  $-V_1$ . A distancias  $x > d$ ,  $V(x)$  está dado por el potencial imagen.

En la figura 1 se muestra un esquema del potencial en términos de la distancia  $x$  entre el electrón y la superficie.

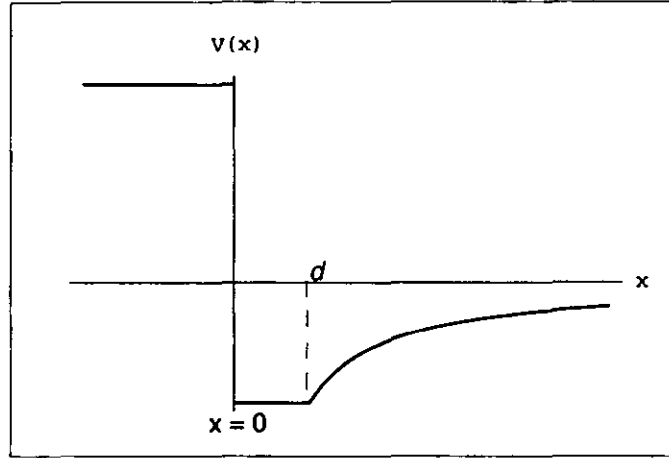


Fig 1. Modelo del potencial que experimenta un electrón sobre la superficie del helio líquido. La superficie está en  $x = 0$ .

Suponiendo que en la dirección paralela a la superficie el electrón se comporta como partícula libre la función de onda y su energía están dadas por:

$$\Psi_{\mathbf{k}_{\parallel},n}(\rho, x) = e^{i\mathbf{k}_{\parallel}\rho}\phi_n(x),$$

$$E_n(\mathbf{k}_{\parallel}) = \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_{\parallel}} + E_n$$

donde  $m_{\parallel}$  es la masa efectiva en la dirección paralela,  $\mathbf{k}$  es un eigenvector y  $\rho$  es el vector de posición en la superficie. Para  $x > d$ ,  $\phi_n(x)$  es la solución de la ecuación

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} \frac{d^2\phi_n}{dx^2} - \frac{e^2}{4x} \frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 1} \phi_n = E_n \phi_n \quad (1)$$

Tomando  $V_0 \rightarrow \infty$  y  $d \rightarrow 0$  tal que  $\phi(0) = 0$ , la solución de la ecuación (1) es la solución hidrogénica con  $l = 0$

$$E_n^{(0)} = -\frac{Z^2 m e^4}{n^2 2\hbar^2}, \quad (2)$$

en la que se ha considerado que  $m_{\perp}$  es igual a la masa  $m$  del electrón libre y  $Z = \frac{1}{4} \frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 1}$  es el valor de la carga imagen.

Los electrones forman el gas bidimensional, cuando muchos de ellos se acumulan arriba de la superficie cada uno ocupando el estado más bajo en el potencial Coulombiano de su carga imagen. El helio líquido está libre de impurezas y anisotropías por lo que provee una superficie ideal para la formación y estudio de arreglos bidimensionales de electrones.

## 1.2 El cristal de electrones en la superficie del helio líquido.

En el experimento realizado por R. S. Crandall y R. Williams [2] los electrones de una descarga tipo corona se depositaron en la superficie del helio líquido. Para mantener el sistema en equilibrio, los electrones fueron confinados en un área limitada por una placa metálica cargada positivamente localizada entre 1 y 10 mm por debajo de la superficie. La densidad electrónica está entre  $10^7$  y  $10^9 \text{cm}^{-2}$ , y el espaciamiento promedio entre electrones es de  $10^{-4} \text{cm}$ . La temperatura de Fermi dada por  $T_F = \frac{\pi \hbar^2 n}{mk_B}$  es del orden de milikelvins a densidades del orden de  $10^8 \text{cm}^{-2}$ . Cuando la energía cinética de un gas de electrones es mayor que su energía de Fermi los efectos cuánticos del sistema no son notables, por lo que el comportamiento de los electrones sobre la superficie del helio líquido es clásico a las temperaturas en las que este sistema se trabaja en el laboratorio.

Considerando el análisis realizado por Cole y Cohen el movimiento de los electrones en la dirección paralela al plano de la superficie del líquido debería ser como el de partículas libres y el movimiento en la dirección perpendicular correspondería a un estado ligado con una energía de amarre de  $0.7 \text{meV}$ , localizado cerca de la superficie en el estado base; sin embargo en este caso hay que considerar el potencial atractivo uniforme (despreciando el efecto de los bordes) producido por la placa cargada positivamente y la interacción repulsiva entre electrones. La repulsión Coulombiana fue estimada por Crandall y Williams suponiendo que el estado de mínima energía era

cristalino y los electrones se localizaban en una red hexagonal al estilo de la cristalización de Wigner en  $3D$ . En un reporte posterior estos autores [16] comprobaron esta hipótesis al mostrar que en las condiciones en que fue realizado el experimento, los datos de la movilidad electrónica eran compatibles con estados localizados en la superficie. Probaron que el campo eléctrico de la placa positiva en el interior del líquido era suficiente para localizar los electrones en la superficie, con la condición de que el movimiento en el plano correspondiera al de cargas localizadas.

El estudio de las fases de los electrones en este sistema realizado por C. C. Grimes y G. Adams [7] determinó la existencia de una transición líquido a cristal a  $\Gamma = 137.5 \pm 15$ . Para detectar la presencia del cristal de electrones ellos emplearon un dispositivo sensible a los movimientos colectivos de los electrones acoplados a las ondas en la superficie del helio (los riplones). La aparición de resonancias acopladas plasmón-riplón fue detectada al incrementar  $\Gamma$  variando la temperatura y la densidad areal  $n$ . En este estudio establecieron un diagrama de fases en el que el sistema solidifica cuando, estando a una cierta temperatura, se aumenta la densidad o cuando estando el sistema a una densidad constante se disminuye la temperatura, siendo la temperatura de fusión  $T_m$  proporcional a  $n^{1/2}$ .

El comportamiento del sistema clásico con la densidad de electrones es contrario a la predicción de Wigner donde la cristalización se obtiene cuando la densidad disminuye. Recientemente [17] se han reportado evidencias de un sistema de electrones  $2D$  sobre una película de helio depositada sobre silicio con densidades cercanas a  $10^{11} \text{cm}^{-2}$  que podría tener un comportamiento cuántico. Peeters y Platzman [18] investigaron el diagrama de fases en la búsqueda de una región del diagrama donde los efectos cuánticos fueran notables, en la región de muy bajas temperaturas donde la energía de Fermi es mayor que la energía cinética del electrón.



En el experimento tradicional, propuesto por Crandall y Williams, el electrodo metálico se coloca en el interior del volumen del helio. Las densidades electrónicas que se alcanzan en este sistema son realmente muy bajas,  $r_s$  es del orden de  $3 \times 10^3$  para  $n \approx 10^9 \text{cm}^{-2}$ . Se pueden alcanzar densidades más altas con una película de helio colocada sobre un sustrato dieléctrico. Peeters y Platzman estudiaron con argumentos cualitativos la influencia del espesor  $d$  de la película de helio y del sustrato dieléctrico con constante dieléctrica  $\epsilon$  en la intensidad de la fuerza imagen. Según estos resultados, cuando una capa de helio de unos  $100\text{\AA}$  de espesor se coloca sobre un sustrato ( zafiro o metal), hay dos posibles maneras de obtener cristalización variando la densidad del gas de electrones. Cuando el gas está muy diluido, de tal forma que la distancia media entre electrones es mayor que el espesor de la capa de helio se observa la cristalización al aumentar la densidad. La segunda posibilidad de cristalización se presenta a densidades más altas, cuando la distancia entre electrones es menor que el espesor de la película. En estas condiciones se espera que el sistema cristalice si se disminuye la densidad.

En la figura 2 se muestra el diagrama de fases para los electrones colocados sobre la superficie del helio obtenido por Peeters y Platzman. El área marcada con líneas verticales corresponde a la fase cristalina. La curva de trazo continuo representa el caso en que el espesor de la capa de helio líquido es lo suficientemente grande como para no influir en los resultados (el volumen de helio). En este diagrama se puede observar que a una densidad constante es posible la cristalización bajando la temperatura. Por otro lado a una temperatura constante diferente de cero hay dos transiciones de la fase fluida a la fase cristalina, una en la región de bajas densidades cuando se aumenta la densidad (esta fue la transición obtenida en los experimentos realizados por Grimes y Adams) y otra en la región de altas densidades cuando se disminuye la densidad, como Wigner predice. A  $T = 0$  solo la transición de Wigner es posible. En esta región del diagrama

se puede observar que la densidad de transición disminuye a  $T > 0$ , con respecto a la densidad a la que se presenta la transición a  $T = 0$ . Al disminuir el espesor de la capa de helio y colocar el substrato se produce un efecto neto sobre el diagrama de fases mostrado en la figura 2 con la curva de trazo interrumpido, consistente en inducir la cristalización tipo Wigner hacia la zona de densidades más bajas.

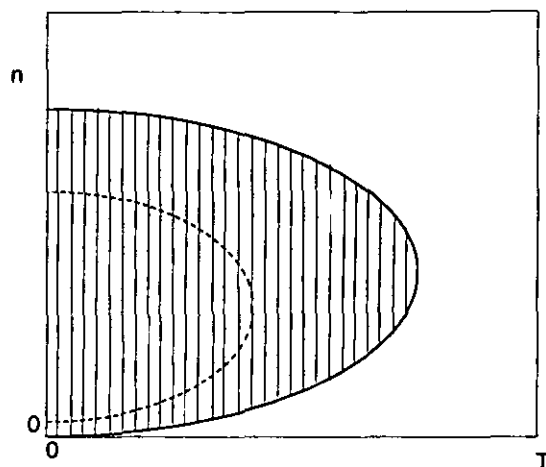


Fig 2. Diagrama de fases del sistema de electrones sobre la superficie del helio líquido el área achurada corresponde a la fase cristalina . La curva de trazo interrumpido representa el diagrama de fases cuando la capa de helio de  $100\text{\AA}$  de espesor se coloca sobre un substrato. La curva de trazo continuo corresponde al volumen de helio.

En la práctica el aumento en la densidad electrónica está limitado por la estabilidad del sistema. A densidades muy grandes la placa con carga positiva no es suficiente para evitar que los electrones se desparramen y un aumento en el campo eléctrico ocasiona que los electrones penetren la superficie del helio. En el caso en que el espesor de la capa de helio sea muy grande, la inestabilidad aumenta cuando la presión del campo eléctrico que jala los electrones hacia la superficie del líquido sobrepasa la presión de la tensión superficial, por lo que a densidades mayores de  $2.4 \times 10^9 \text{cm}^{-2}$  los sistemas son

inestables. En el caso de una película delgada, un tunelaje apreciable de los electrones hacia el sustrato metálico ocurrirá para  $d < 35\text{\AA}$ . Un cálculo realizado por X. L. Hu y A. J. Dahm [14] proporciona un límite superior para la densidad de los electrones arriba de la superficie del helio, el neón o el hidrógeno de  $2 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ . En estudios más recientes[17] se ha logrado estabilizar el sistema con densidades del orden de  $10^{11} \text{cm}^{-2}$  colocando la película de helio sobre un sustrato de  $\text{SiO}_2$ .

## 2 Capas de inversión.

Los dispositivos formados por la unión de un semiconductor y un aislante o dos semiconductores, con uno de ellos actuando como aislante fueron utilizados desde los años 60 en la fabricación de circuitos integrados. El estudio de las propiedades de transporte de los electrones en la interfase de estos sistemas permitió un gran número de aplicaciones tecnológicas y el descubrimiento de efectos como el Hall cuántico y el Hall cuántico fraccional. El efecto Hall cuántico fue descubierto por Klaus von Klitzing en 1980 [19] en la interfase del  $\text{Si}/\text{SiO}_2$  y el Hall cuántico fraccional por Tsui, Störmer y Gossard en 1981 [20] en el  $\text{GaAs}/(\text{AlGa})\text{As}$ .

En un transistor de efecto de campo de metal-óxido-silicio (*MOSFET*) la aplicación de un voltaje positivo en el electrodo metálico (gate) provoca la formación de una capa de electrones en la interfase entre el aislante y el semiconductor. La densidad electrónica se controla con el campo eléctrico aplicado. Esta capa inducida por el voltaje en el electrodo metálico es conocida como la capa de inversión y es a través de ésta que se puede generar una corriente entre los contactos del transistor (la fuente y el sumidero).

La capa de electrones en la interfase de estos sistemas se comporta dinámicamente muy aproximadamente como un sistema ideal en  $2D$ . Esto es debido a que los electrones

se pueden mover libremente en dos dimensiones espaciales, paralela a la interfase, en cambio en la tercera dimensión los niveles de energía están cuantizados. A bajas temperaturas pocos de esos niveles o solamente uno están ocupados, por lo que los electrones son dinámicamente bidimensionales [21]. A. B. Fowler [22] y colaboradores midieron la conductividad entre un par de electrodos en un *MOSFET* en presencia de un campo magnético perpendicular a la interfase. Encontraron que el período entre los máximos de la conductividad era constante, como cada período corresponde al llenado de un nivel de Landau en la sub-banda base, este comportamiento fue indicativo de que cada nivel de Landau tenía el mismo número de estados, es decir una densidad de estados independiente de la energía, como corresponde a los sistemas bidimensionales.

## 2.1 Los efectos cuánticos.

Los electrones en la capa de inversión están en un pozo cuántico creado por el campo eléctrico y la interfase. En la aproximación de electrones independientes, los estados electrónicos serán de la forma  $\Psi(x, y)Z_n(z)$ . Donde  $Z_n$  satisface la ecuación de Schrödinger,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_z} \frac{d^2}{dz^2} + V_T(z)\right]Z_n(z) = E_n Z_n(z). \quad (3)$$

$V_T(z)$  es aproximadamente un potencial lineal con una barrera infinita en la interfase representando la brecha del aislante, de éste resulta una serie de niveles de energía  $E_n$  con eigenestados  $Z_n(z)$ . La energía total del electrón es la suma de la energía  $E_n$  y la energía con eigenestados  $\Psi(x, y)$ .

En ausencia de campo magnético y densidades electrónicas por arriba de  $10^{12} \text{cm}^{-2}$  es decir,  $r_s \approx 1$  se puede desprestigiar la interacción Coulombiana entre electrones y considerar que en el plano  $x - y$  los electrones tiene un comportamiento casi libre. Por

lo que los niveles de energía toman la forma:

$$E = E_n + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m^*}, \quad (4)$$

$k_x$  y  $k_y$  son las componentes del vector de onda paralelas a la interfase y  $m^*$  es la masa efectiva del electrón. Cada valor de  $E_n$  es el fondo de un nivel continuo bidimensional llamado sub-banda, siendo  $n$  el índice de la sub-banda. La densidad de estados por unidad de área por unidad de energía es

$$D(E) = \frac{2g_v}{(2\pi)^2} 2\pi k \frac{dk}{dE}, \quad (5)$$

donde  $g_v$  es un factor de degeneración que da el número de bandas equivalentes y donde se ha incluido el factor 2 para la degeneración de espín. En este caso la densidad de estados es una serie de funciones escalón de altura constante  $\frac{m}{\pi\hbar^2}$ .

La posibilidad de obtener un cristal de Wigner cuántico hace particularmente interesante estos sistemas. La cristalización de Wigner fue observada en presencia de un campo magnético en 1988 en el  $GaAs/(AlGa)As$  [3] y a campo magnético cero en la interfase de un metal-aislante-semiconductor ( $MIS$ ) de silicio [4].

En una heterounión de  $GaAs/(AlGa)As$  la masa efectiva del electrón  $m^*$  es  $0.067m_e$ , por lo que a una densidad de  $10^{11}cm^{-2}$  la temperatura de Fermi es del orden de  $10^3K$  y el sistema es de naturaleza cuántica a la temperatura del laboratorio. Se ha mostrado en el estudio de fases del gas de electrones que en este material que no es posible obtener cristalización de Wigner en ausencia de un campo magnético, aún a  $T \approx 0$  [13, 23]. Según los estudios realizados, esta transición es posible bajo dos situaciones límite; por un lado cuando el campo magnético aplicado es tan intenso como para que el tamaño de la órbita ciclotrónica se colapse en un punto y entonces los electrones se comporten como partículas puntuales y por otro lado cuando la densidad del sistema

sea lo suficientemente baja como para que la energía cinética sea pequeña con respecto a la energía potencial del sistema como para ser despreciable y entonces los electrones formen el cristal. Sin embargo la densidad electrónica mínima en las heterouniones es  $n > 10^{10} \text{cm}^{-2}$ , la cual es dos órdenes de magnitud mayor que la densidad crítica estimada para la formación del cristal de Wigner.

Diversos autores hacen una distinción entre la cristalización de Wigner y la fase localizada del sistema de electrones en presencia de un campo magnético [24]; ya que el origen de ambos fenómenos es distinto. En el primer caso la cristalización de electrones se presenta al disminuir la densidad electrónica. En el segundo caso los electrones se localizan por el efecto del campo magnético. Por lo que resulta de especial interés investigar un sistema en que se dé una transición en el mismo sentido de la predicción de Wigner.

En la estructura *MIS* del silicio la densidad requerida para la cristalización de Wigner es del orden de la densidad electrónica en este sistema por lo que la cristalización puede presentarse aún a campo magnético cero [23]. Evidencias de una fase localizada han sido obtenidas en diversos experimentos [4, 25] y más recientemente se encontró una transición conductor-aislante a una densidad de  $n_c = 8.5 \times 10^{10}$  [26], aislante para  $n < n_c$  y conductor para  $n > n_c$ . En este dispositivo la masa efectiva  $m^* = 0.2m_e$ , para una densidad típica de  $10^{11} \text{cm}^{-2}$  la temperatura de Fermi es  $T_F = \frac{\pi \hbar^2 n}{2m^* k_B} \approx 100K$ . El sistema se comporta cuánticamente a las temperaturas en las que se ha trabajado en el laboratorio ( $\approx 1K$ ), por lo que todo parece indicar que en el *MOSFET* se puede encontrar el cristal de Wigner.

# CAPITULO II

## Modelos teóricos en dos dimensiones

En este capítulo se discuten algunos de los trabajos teóricos relacionados con nuestra investigación. En el régimen cuántico se encuentran en la literatura una gran diversidad de modelos y aproximaciones para estudiar un sistema de electrones degenerado. A densidades altas este sistema se aproxima al gas de electrones ideal, mientras que a bajas densidades el estado más estable corresponde a un cristal de electrones.

El estado base de los electrones en un sólido se ha estudiado utilizando el modelo de jalea en el cual los electrones se mueven en un fondo de carga positiva. Con esta aproximación teórica se han podido describir propiedades importantes de un sistema de electrones en  $2D$  y en  $3D$ . En los últimos 10 años se produjo un gran interés por el estudio teórico del gas de electrones en  $2D$  impulsado por el descubrimiento en los laboratorios de sistemas de electrones de baja dimensionalidad.

En el modelo de jalea uniforme ( $MJU$ ) los electrones interactúan entre sí a través de fuerzas Coulombianas. La neutralidad la proporciona un fondo inerte de densidad uniforme. Con este modelo se ha estudiado el sistema de electrones en  $2D$  bajo varias aproximaciones: funciones base correlacionadas [27], cálculos Monte-Carlo con función de Green [28, 29] y funcionales de la densidad [30, 31]. Un modelo diferente es el de jalea deformable ( $MJD$ ), en éste el fondo se deforma estáticamente para garantizar la neutralidad local de carga. Con este modelo se han estudiado las propiedades del gas de electrones  $2D$  utilizando potenciales de deformación en la jalea [32] y la aproximación

Hartree-Fock [33, 34]. En un modelo similar se determina la energía del estado base con funciones de Wannier calculadas con principios variacionales [35], los autores cancelan la contribución del fondo con el término de Coulomb como se hace en el modelo de jalea deformable.

Los cálculos en ambos modelos requieren un solo parámetro de entrada, la distancia entre partículas  $r_s$  (en unidades de radios de Bohr). Por lo que todas las propiedades dependen solamente de  $r_s$ . En el sistema  $2D$  se han hecho diferentes predicciones del valor de  $r_s$  al cual se presenta una transición de la fase fluida a una fase cristalina en un estado no magnético. En el  $MJU$  el cristal de Wigner como una onda de densidad de carga fue obtenido por Sander, Rose y Shore [30] para  $r_s > 17$ , Tanatar y Ceperley [29] predijeron la cristalización de Wigner a  $r_s > 37$  y Nihearendu Choudhury y Swapan K. Ghosh [31] observaron la cristalización a  $r_s = 31$ . En el  $MJD$  R. M. Méndez-Moreno, M. Moreno y M. A. Ortíz [34] obtuvieron un estado corrugado con simetría cuadrada para valores de  $r_s > 4.8$ . En un modelo similar al  $MJD$  Iyakutti y Rajeswara Palanichami [35] obtuvieron un límite superior en  $r_s > 8$  para la densidad de transición.

En la siguiente sección veremos algunas de las aproximaciones utilizadas para estudiar el sistema de electrones en ( $2D$ ) con el modelo de jalea uniforme.

## 1 El gas de electrones en el modelo de jalea uniforme.

Consideremos  $\mathcal{N}$  partículas cargadas de masa  $m$  y carga  $-e$ , confinadas en un fondo neutralizante de área  $A$  que obedecen la estadística de Fermi-Dirac. En el límite de  $\mathcal{N} \rightarrow \infty$  y  $A \rightarrow \infty$ , manteniendo la densidad de partículas  $\sigma = \frac{\mathcal{N}}{A}$  constante, el



hamiltoniano del sistema está dado por:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}, \quad (6)$$

donde

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} \nabla_i^2 \quad (7)$$

y

$$\hat{V} = \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{be} + \hat{V}_{bb} \quad (8)$$

son respectivamente los operadores de energía cinética y energía potencial. El término potencial tiene la contribución de las interacciones electrón-electrón  $\hat{V}_{ee}$ , electrón-fondo  $\hat{V}_{be}$  y fondo-fondo  $\hat{V}_{bb}$ . Las formas explícitas de  $\hat{V}_{be}$  y  $\hat{V}_{bb}$  estarán condicionadas por el hecho de que la densidad del fondo es constante.

## 1.1 Funciones base correlacionadas

Hock-Kee Sim, R. Tao y F. Y. Wu [27] consideraron un potencial de la forma:

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} \sum_{j=1, j \neq i}^{\mathcal{N}} v(r_{ij}) - \frac{1}{2} \sigma^2 \int \int v(r_{12}) dr_1 dr_2, \quad (9)$$

donde  $v(r) = \frac{e^2}{r}$  es la interacción Coulombiana entre dos partículas separadas una distancia  $r$  y el último término representa la interacción debida a la presencia del fondo neutralizante homogéneo. En este término se han sumado la interacción del gas de electrones con el fondo de carga positiva y la interacción del fondo consigo mismo. Siendo  $\sigma$  la densidad de partículas del gas de electrones y del fondo neutralizante una constante.

Hock-Kee Sim, Tao y Wu evaluaron la energía del estado base en la fase fluida de un gas de partículas cargadas utilizando el método variacional con funciones base correla-

cionadas y analizaron la posibilidad de un gas de electrones parcialmente polarizado. Estudiaron el sistema de fermiones para densidades  $r_s < 20$ , encontrando que el gas de electrones debe ser paramagnético en toda esta región de densidades, a diferencia del resultado de Ceperley que predice un gas ferromagnético a bajas densidades [28] para  $13 < r_s < 33$ . Las energías calculadas están ligeramente por arriba de las obtenidas por D. Ceperley.

En este tipo de cálculos usualmente se determina el estado base del sistema comparando las energías obtenidas con diferentes soluciones. En el potencial de jalea uniforme Eq(9) la densidad del fondo y del gas de electrones se ha considerado homogénea, por lo que los autores solamente analizan la fase fluida del sistema. En otros cálculos en los que se estudian las fases fluida y cristalina del sistema se proponen dos tipos de soluciones relacionadas con cada una de las fases.

## 1.2 Cálculos Monte Carlo Variacionales

D. Ceperley [28] encontró la transición de un fluido ferromagnético a un cristal paramagnético a una  $r_s \approx 33$  utilizando el método Monte Carlo variacional (*VMC*) en el modelo de jalea uniforme. El Hamiltoniano del sistema de  $\mathcal{N}$  electrones interactuantes en términos de  $r_s = \frac{a}{a_0}$  con  $a = \frac{1}{\sqrt{\pi\sigma}}$  y  $\sigma = \frac{\mathcal{N}}{A}$  es:

$$\hat{H} = -\frac{1}{r_s^2} \sum_{1 \leq i \leq \mathcal{N}} \nabla_i^2 + \frac{2}{r_s} \sum_{1 \leq i < j \leq \mathcal{N}} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + const. \quad (10)$$

En este Hamiltoniano toda la interacción con el fondo uniforme es considerada constante.

En un cálculo posterior, más preciso Tanatar y Ceperley [29] utilizaron el mismo modelo para evaluar la energía del estado base del gas de electrones en  $2D$  para-

magnético y totalmente polarizado en la fase fluida y la energía de la fase cristalina. Entre otras propiedades predijeron la cristalización de Wigner a una  $r_s \approx 37$ . El método utilizado en este cálculo está basado en *VMC* y funciones de Green Monte Carlo (*GFMC*). La función de onda de prueba es el producto de dos funciones,

$$\psi(R) = D(R) \exp \left( - \sum_{1 \leq i < j \leq N} u(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \right), \quad (11)$$

donde  $D(R)$  es el determinante de orbitales de una sola partícula. En la fase fluida los orbitales seleccionados son ondas planas, mientras que en la fase cristalina los orbitales en  $D(R)$  son Gaussianas centradas en los sitios de una red hexagonal. La función exponencial contiene el pseudopotencial  $u(r)$  que correlaciona los electrones y es característico en cada una de las fases. Para determinar las propiedades del estado base, encuentran la configuración de equilibrio de una muestra generada por caminantes al azar en dos dimensiones.

Estos autores consideran una corrección que disminuye la dependencia de sus resultados con el número de partículas. La corrección es distinta para la fases fluida y cristalina. En ambos casos, se realiza un ajuste de la influencia del número de partículas en las energías cinética y potencial basado en estimaciones obtenidas en otros cálculos, por ejemplo la diferencia en la energía cinéticas de un gas de electrones libres infinito y un gas de electrones libres finito con condiciones a la frontera periódicas.

La ecuación de estado obtenida para la fase fluida con este método y el Hamiltoniano de jalea uniforme  $E_c(10)$  es:

$$E(r_s, \xi) = E_{HF}(r_s, \xi) + E_c(r_s, \xi), \quad (12)$$

donde  $\xi$  es el parámetro de polarización y es igual a cero cuando el fluido es para-

magnético y uno cuando el fluido está totalmente polarizado.  $E_{HF}$  es la energía Hartree-Fock obtenida con ondas planas y  $E_c$  es la energía de correlación obtenida a partir del ajuste de los datos Monte Carlo con aproximantes de Padé, y es:

$$E_c(r_s, \xi) = a_0 \frac{1 + a_1 x}{1 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3}, \quad (13)$$

donde  $x = r_s^{\frac{1}{2}}$  y las  $a_i$  son funciones de  $\xi$

En la fase cristalina la energía tiene la forma

$$E(r_s) = \frac{-2.2122}{r_s} + \frac{1.63}{r_s^{\frac{3}{2}}} + \frac{0.05}{r_s^2} + \dots \quad (14)$$

El primero de los términos corresponde a la energía obtenida por Bonsall y Maradudin para la red hexagonal [36], los siguientes términos son la energía de punto cero de una red armónica y el primero de los términos anarmónicos. Ambos son calculados a partir de los resultados Montecarlo.

El estado base del gas de electrones a una  $r_s$  dada, corresponde entonces a la fase de menor energía. Tanatar y Ceperley encuentran una transición entre la fase fluida normal y la fase cristalina en  $r_s = 37$ . A diferencia del primer cálculo realizado por Ceperley donde encuentra una transición de fase de un fluido paramagnético a un fluido ferromagnético para una  $r_s \approx 13$ , en este cálculo no reportan ninguna transición entre las fases paramagnética y ferromagnética. La compresibilidad de este sistema es negativa para  $r_s > 2.03$ , por lo que Tanatar y Ceperley le atribuyen la estabilidad del sistema al fondo.

### 1.3 Funcionales de la densidad

La teoría de funcionales de la densidad ha sido utilizada por diversos autores, [30, 31] para estudiar la cristalización de Wigner en un gas de electrones en  $2D$  en el modelo de jalea uniforme. Según la teoría, la energía de un sistema de muchas partículas a temperatura cero es una funcional de la densidad electrónica  $\rho(\mathbf{r})$ , y es un mínimo a la densidad verdadera, para este sistema la energía tiene la forma:

$$E[\rho] = T[\rho] + \frac{1}{2} \int d^2 r \int d^2 r' [\rho(\mathbf{r}) - \rho_0] \times \frac{[\rho(\mathbf{r}') - \rho_0]}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + E_{xc}[\rho], \quad (15)$$

donde  $T[\rho]$  y  $E_{xc}[\rho] = \int \rho(\mathbf{r}) \epsilon_{xc}(\rho(\mathbf{r})) d^2 r$  son las funcionales de la energía cinética y de la energía de intercambio y correlación, respectivamente y  $\rho_0$  es la densidad del fondo homogéneo. Las formas aproximadas de estas funcionales se obtienen de la aproximación de la densidad local, es decir sólo dependen de  $\rho(\mathbf{r})$ . El término central de la expresión contiene las interacciones electrón-electrón, electrón-fondo y fondo-fondo.

Sander, Rose y Shore [30] proponen un estado inhomogeneo tipo onda de densidad de carga (*ODC*) al estilo de Overhauser [37] donde la densidad electrónica toma la forma:

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho_0 + \rho_1 \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}). \quad (16)$$

En esta expresión  $\mathbf{q}$  es el vector de onda de la *ODC* y  $\rho_1$  es su amplitud. El caso  $\rho_1 = 0$  representa la fase fluida. A valores grandes de  $\rho_0$  no hay formación de la *ODC* por lo que  $\rho_1 = 0$  en la ecuación (16). A densidades mas bajas se formará la onda de densidad de carga a alguna  $\rho_0 = \rho_c$ . La magnitud de  $\rho_1$  en el punto de transición determinará el orden de la transición. Según el criterio de estos autores, un cambio suave en la densidad de carga será característico de una transición de segundo orden.

Esto es, la transición es de segundo orden si  $\rho_1$  es pequeña (próxima a cero) para algún valor cercano de  $\rho_0 = \rho_c - \delta$  del punto de transición. Si el cambio de  $\rho_1$  es discontinuo entonces la transición es de primer orden. Estos autores suponen que la transición es de segundo orden y encuentran el punto de transición a *ODC* en  $r_s = 17$ . Es necesario recalcar que para describir la situación en que la densidad electrónica es baja y los electrones tienden a localizarse en una red, Sander, Rose y Shore escogen la función  $\epsilon_{xc}(\rho(\mathbf{r}))$  que cancela las energías de intercambio y correlación de los electrones aislados.

N. Choudhury y S. K. Ghosh [31] utilizan la teoría de las funcionales de la densidad para calcular la energía del sistema con dos densidades electrónicas diferentes. La primera de ellas es igual a la de Sander, Rose y Shore y la segunda es una superposición de distribuciones Gaussianas centradas en cada punto de una red hexagonal. En este cálculo el término de intercambio es calculado con el método de la aproximación local y el término de correlación corresponde al calculado por Tanatar y Ceperley. Una comparación entre las energías de las fases fluida y cristalina determina la densidad a la que ocurre la transición. Con las dos densidades propuestas obtienen valores de la  $r_s$  de transición ( $r_s = 31$  y  $r_s = 32$ ) muy cercanos al obtenido por Tanatar y Ceperley.

## 2 El modelo de jalea con funciones de Wannier

Iyakutti y Palanichamy [35] estudian el estado base del gas de electrones inmerso en la jalea de carga positiva, utilizando funciones de Wannier desarrolladas en términos de orbitales Gaussianas para representar una estructura cristalina cuadrada centrada en la cara (la cual se reduce a una red cuadrada).

$$W(\mathbf{m}, \mathbf{r}) = \sum_i \phi_i(\mathbf{m}, \mathbf{r}) c_i,$$

donde  $\mathbf{m}$  y  $\mathbf{r}$  son vectores y  $c_i$  son los coeficientes de la expansión. Calculan la energía del cristal variacionalmente a partir de la funcional

$$\epsilon = \int W^*(\mathbf{m}, \mathbf{r}) H_{ef} W(\mathbf{m}, \mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

donde  $H_{ef}$  es un Hamiltoniano Hartree-Fock efectivo que contiene el término de energía cinética y el término de intercambio. Este Hamiltoniano proviene de la cancelación entre el término directo y la contribución del fondo positivo. Es conocido que estos términos se cancelan cuando la solución de la ecuaciones  $HF$  son ondas planas y la densidad de carga electrónica es homogénea [38]. Si la función de onda ahora reproduce una estructura cristalina, estos términos no se cancelan a menos que también se modifique la densidad del fondo, como veremos más adelante en el modelo de jalea deformable. En el  $MJD$  el fondo se deforma estáticamente para garantizar la neutralidad local de carga.

Para determinar el valor de  $r_s$  de la transición a la fase localizada comparan la energía del cristal con la energía de la fase fluida. Con este método encuentran que las energías de la fase cristalina son menores que las de la fase fluida a partir de  $r_s \approx 8$ .

### 3 El modelo de jalea deformable.

En el modelo de jalea uniforme el fondo neutralizante permanece homogéneo, aún cuando el gas de electrones haya cristalizado; por el contrario, en el modelo de jalea deformable el fondo de carga positiva se deforma estáticamente, garantizando la neutralidad local de carga [39]. Previamente Overhauser [37] consideró un fondo no uniforme en el estudio de las ondas de densidad de carga. Overhauser encontró que a densidades altas el sistema es homogéneo, mientras que a bajas densidades las solu-

ciones tipo *ODC* son más estables que las ondas planas.

La posibilidad de que el fondo se deforme implica que su densidad  $\sigma$  es una función de  $\mathbf{r}$ , por lo que los términos  $\hat{V}_{bb}$  y  $\hat{V}_{be}$  de la ecuación (8) deben ser modificados. El primero es la interacción del fondo consigo mismo y está dado por:

$$\hat{V}_{bb} = \frac{1}{2} \int \int \sigma(\mathbf{r}_1) v(\mathbf{r}_{12}) \sigma(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \quad (17)$$

El segundo término es

$$\hat{V}_{be} = - \sum_i^{\mathcal{N}} \int \sigma(\mathbf{r}) v(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) d\mathbf{r}. \quad (18)$$

y corresponde a la interacción entre las partículas y el fondo. En forma general podemos escribir el Hamiltoniano del sistema como:

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{V}_{bb} + \hat{V}_{be}, \quad (19)$$

donde hemos incluido en  $\hat{H}_e$  los términos del Hamiltoniano que dependen únicamente de los electrones.

La energía del sistema  $\langle \hat{H} \rangle$  depende de la distribución del fondo. Se optimiza la energía tomando  $\frac{\partial E}{\partial \sigma(\mathbf{r})} = 0$ . De donde se tiene que:

$$\int \sigma(\mathbf{x}) v(\mathbf{x} - \mathbf{r}) d\mathbf{x} = \sum_i^{\mathcal{N}} \langle \psi | v(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}) | \psi \rangle. \quad (20)$$

En la aproximación de partícula independiente

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}!}} \det[\varphi_{n_i}], \quad (21)$$

donde los espín-orbitales  $\varphi_{n_i}(\mathbf{r}_i) = |n_i\rangle$  están ortonormalizados. Con esta aproximación y la condición (20) el valor esperado del Hamiltoniano (ecuación (19)) se reduce a

$$E = \langle \hat{T} \rangle + \langle \hat{V}_{ex} \rangle. \quad (22)$$



donde  $\langle \hat{T} \rangle$  es la energía cinética y  $\langle \hat{V}_{ex} \rangle = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^{\mathcal{N}} \langle \mathbf{n}_i \mathbf{n}_j | v(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) | \mathbf{n}_j \mathbf{n}_i \rangle$  es el término de intercambio y

$$\langle \hat{V}_d \rangle + \langle \hat{V}_{bc} \rangle + \langle \hat{V}_{bb} \rangle = 0, \quad (23)$$

donde  $\langle \hat{V}_d \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^{\mathcal{N}} \langle \mathbf{n}_i \mathbf{n}_j | v(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) | \mathbf{n}_i \mathbf{n}_j \rangle$  es la contribución a la energía del término directo de la interacción electrón-electrón. La ecuación (23) se ha tomado como la condición que define el modelo de jalea deformable.

La suposición más directa acerca de la densidad del fondo, que satisface la ecuación (20) es que  $\sigma(\mathbf{r})$  esté acoplada a la densidad electrónica, esto es:

$$\sigma(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{i}}^{\mathcal{N}} \varphi_{\mathbf{n}_{\mathbf{i}}}^*(\mathbf{r}) \varphi_{\mathbf{n}_{\mathbf{i}}}(\mathbf{r}). \quad (24)$$

Como mencionamos en la sección anterior, Iyakutti y Palanichamy estudian el estado base del gas de electrones inmerso en la jalea de carga positiva utilizando un Hamiltoniano Hartree-Fock efectivo que contiene únicamente el término de energía cinética y el término de intercambio. El valor esperado de este Hamiltoniano efectivo es la expresión (22). Como vimos, esta situación es el resultado de que el fondo neutralizante de la red cuadrada centrada en la cara sea la jalea deformable.

## CAPITULO III

### El método Hartree-Fock autoconsistente en el modelo de jalea deformable

L. Bonsall y A. Maradudin [36] determinaron con un cálculo clásico la energía de interacción de un electrón en un cristal bidimensional para cada una de las cinco redes de Bravais en dos dimensiones, y encontraron que la energía es mínima en una red hexagonal.

En el sistema cuántico en  $2D$  se han hecho diferentes predicciones del valor de  $r_s$  al cual se presenta una transición de la fase fluida a la fase cristalina. En la mayoría de estos cálculos se determina el punto de transición comparando las energías entre ambas fases. Para el cálculo de la energía de la fase cristalina se han considerado redes cuadradas, cuadradas centradas en la cara y hexagonales. Por lo general, los métodos utilizados no describen de manera unificada el sistema en toda la región de densidades, ya que para reproducir las distintas fases del sistema se utilizan Hamiltonianos o funciones de estado diferentes. Por el contrario con el método Hartree-Fock autoconsistente en el modelo de jalea deformable es posible describir las propiedades del sistema en una extensa región de densidades, altas, intermedias y bajas sin modificar el Hamiltoniano o la función de estado.

Podemos destacar las diferentes predicciones del punto de transición de la fase fluida a la fase cristalina realizadas con dos modelos básicamente diferentes, el  $MJU$  y el  $MJD$ . En ambos modelos los cálculos que hemos considerado tienen la hipótesis

de Wigner como punto de partida, es decir que la cristalización del gas de electrones se presenta al disminuir la densidad del sistema a un valor crítico. En el modelo de jalea uniforme podemos mencionar: con funciones de Green y el método Monte Carlo [29] la cristalización en una red hexagonal se encontró en  $r_s \approx 37$ ; con funcionales de la densidad [31] se observó la cristalización a una red hexagonal en  $r_s = 31$  y la transición a ondas de densidad de carga [30] en  $r_s = 17$ . En el modelo de jalea deformable: con funciones de Wannier [35] se obtuvo un límite superior para la densidad de transición a una red cuadrada centrada en la cara en  $r_s \approx 8$  y con el método Hartree-Fock autoconsistente [34] se obtuvo un estado corrugado con simetría cuadrada para valores de  $r_s > 4.8$ . Otras predicciones han sido realizadas considerando los defectos puntuales como el origen de la transición de Wigner en  $2D$  [40]. La disponibilidad de resultados experimentales para sistemas de electrones en  $2D$  nos brinda la posibilidad de contrastar con los resultados de estos modelos teóricos.

En este capítulo se muestran nuestros cálculos para el estado base de un gas de electrones en  $2D$  en el modelo de jalea deformable y con el método  $HF$  autoconsistente. Para determinar el estado base del sistema consideramos funciones de estado que reproducen las simetrías cuadrada y hexagonal y que incluyen la solución trivial de onda plana como una solución posible. En el siguiente capítulo se mostrarán los resultados de los cálculos y compararemos con otros modelos teóricos y con los resultados experimentales.

## 1 Teorías del campo medio (Hartree-Fock)

El método de  $HF$  se basa en un principio variacional utilizado para encontrar el valor esperado más bajo del Hamiltoniano con una aproximación de partícula independiente,

en la que cada una de las  $\mathcal{N}$  partículas ocupa un estado de una sola partícula. El potencial considerado proviene de la interacción promedio de una partícula con todas las demás. El método plantea la necesidad de resolver de manera autoconsistente un sistema de ecuaciones acopladas, provenientes de minimizar la energía. El sistema de fermiones obedece el principio de exclusión de Pauli, por lo que la estadística de Fermi-Dirac introduce una correlación de espín entre pares de partículas. La función de onda que se utiliza como solución a las ecuaciones de  $HF$  incorpora la antisimetría propia de un sistema de fermiones y se escribe como el determinante de los estados de una sola partícula.

Supongamos que cada partícula está en un estado  $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ , donde el índice  $\mathbf{k}$  designa los estados de una sola partícula y  $\mathbf{x}$  corresponde a las coordenadas de espacio y espín. La función de onda del sistema está dada por:

$$\psi = \frac{1}{\mathcal{N}!} \det[\varphi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{x}_i)]. \quad (25)$$

siendo  $\varphi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{x}_i)$  orbitales desconocidos ortonormales. El hamiltoniano  $H$  del sistema está dado por la suma de operadores de uno y dos cuerpos

$$\hat{H} = \sum_i^{\mathcal{N}} \hat{T}_i + \sum_{i < j}^{\mathcal{N}} \hat{v}_{ij}. \quad (26)$$

Etiquetando los  $\mathcal{N}$  estados  $k_i = 1, 2, \dots, \mathcal{N}$  tenemos que el valor esperado del Hamiltoniano es

$$E = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \sum_{k_1=1}^{\mathcal{N}} \langle \varphi_{k_1} | T_1 | \varphi_{k_1} \rangle + \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2}^{\mathcal{N}} \langle \varphi_{k_1} \varphi_{k_2} | v_{12} | \varphi_{k_1} \varphi_{k_2} - \varphi_{k_2} \varphi_{k_1} \rangle$$

La extremal de la funcional  $E(\varphi_k^*, \varphi_k)$  de los orbitales  $\varphi_k$  ortonormales se obtiene de

$$\frac{\partial}{\partial \varphi_l^*} [E(\varphi_k^*, \varphi_k) - \sum_{k_1 k_2} \lambda_{k_1 k_2} \langle \varphi_{k_1} | \varphi_{k_2} \rangle] = 0.$$

donde  $\lambda_{k_1 k_2}$  son multiplicadores de Lagrange. Este procedimiento nos lleva a que

$$\begin{aligned} \hat{T}_1 \varphi_l(\mathbf{r}_1) + \sum_{k_2} \int d\mathbf{r}_2 \varphi_{k_2}^*(\mathbf{r}_2) v_{12} \varphi_{k_2}(\mathbf{r}_2) \varphi_l(\mathbf{r}_1) - \\ \sum_{k_2} \int d\mathbf{r}_2 \varphi_{k_2}^*(\mathbf{r}_2) v_{12} \varphi_l(\mathbf{r}_2) \varphi_{k_2}(\mathbf{r}_1) - \sum_{k_2} \lambda_{l k_2} \varphi_{k_2}(\mathbf{r}_1) = 0. \end{aligned} \quad (27)$$

Multiplicando (27) por  $\varphi_k^*(\mathbf{r}_1)$  e integrando sobre  $\mathbf{r}_1$  y diagonalizando la ecuación matricial resultante podemos obtener un conjunto de  $\mathcal{N}$  ecuaciones no lineales integro-diferenciales, las ecuaciones de Hartree-Fock [41].

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2} \nabla_1^2 \varphi_{k_1}(\mathbf{r}_1) + \left[ \sum_{k_2} \int d\mathbf{r}_2 \varphi_{k_2}^*(\mathbf{r}_2) v_{12} \varphi_{k_2}(\mathbf{r}_2) \right] \varphi_{k_1}(\mathbf{r}_1) \\ - \sum_{k_2} \int d\mathbf{r}_2 \varphi_{k_2}^*(\mathbf{r}_2) v_{12} \varphi_{k_1}(\mathbf{r}_2) \varphi_{k_2}(\mathbf{r}_1) = \epsilon_{k_1} \varphi_{k_1}(\mathbf{r}_1). \end{aligned}$$

Para  $\mathcal{N}$  partículas, cada una en un estado  $k_i$ , que se encuentran en el campo medio producido por todas las demás partículas. En el primer término se ha escrito el operador de energía cinética como  $-\frac{1}{2} \nabla_1^2$ . El segundo término de la expresión es el llamado término directo y el siguiente es el término de intercambio. La energía Hartree-Fock (el valor esperado de  $\hat{H}$ ) se calcula con los orbitales  $\varphi_k(\mathbf{r})$  que satisfacen las ecuaciones de HF.

Las ondas planas (OP)  $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{A}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  son una solución trivial de las ecuaciones HF. Algunas soluciones no triviales implican la solución del sistema por aproximaciones sucesivas con un proceso autoconsistente. Esto es, se calculan los elementos de matriz con una función de onda inicial, los cuales son utilizados para calcular una nueva función de onda. El procedimiento se repite hasta que se alcanza la precisión

requerida en el cálculo de la función de onda y la energía, cuando los resultados de dos iteraciones sucesivas difieren a lo más, en un orden de magnitud de  $10^{-5}$ .

## 2 El gas de electrones bidimensional en el modelo de jalea deformable

El hamiltoniano completo de  $\mathcal{N}$  electrones inmersos en un fondo neutralizante encerrados en una caja de área  $A$  (en el límite termodinámico  $\mathcal{N}$ ,  $A \rightarrow \infty$  y  $\frac{\mathcal{N}}{A} = \text{constante}$ ) está dado por la ecuación (19). Cuando el estado del sistema corresponde al de onda plana, el medio que neutraliza la carga electrónica tiene una densidad uniforme. Utilizando un potencial apantallado  $\frac{e^{-\mu|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}$  y tomando después  $\mu = 0$ , las contribuciones a la energía de la interacción fondo-fondo y fondo-electrón son términos constantes que se cancelan con el término directo de la interacción electrón-electrón, del mismo modo ocurre en el caso  $3D$  [38]. Por lo que únicamente el término de intercambio y la energía cinética contribuyen a la energía por partícula del gas de electrones, ésta es:

$$\frac{E}{\mathcal{N}} = \frac{e^2}{2a_0} \left[ \frac{1}{r_s^2} - \frac{8\sqrt{2}}{3\pi} \frac{1}{r_s} \right] \quad (28)$$

Cuando las funciones de onda no son ondas planas, las condiciones de neutralidad local entre la densidad de carga electrónica y un fondo no uniforme  $\sigma(\mathbf{r})$  implican la dependencia de las interacciones fondo-fondo, fondo-electrón con respecto a  $\sigma(\mathbf{r})$ , por lo que la cancelación de  $\langle V_d \rangle + \langle V_{be} \rangle + \langle V_{bb} \rangle$  no es directa, a menos que se haga una hipótesis acerca del comportamiento del fondo neutralizante como en el modelo de jalea deformable.

En el modelo de jalea deformable y en la aproximación  $HF$  autoconsistente hemos

realizado diversos cálculos para el gas de electrones en  $3D$  reproduciendo diferentes simetrías de cristalización. Este método tiene la capacidad de describir el sistema, de una manera unificada y no perturbativa, en todo el rango de densidades metálicas y bajas, incluyendo la región de densidad intermedia. Como veremos más adelante, con respecto al  $MJU$ , el  $MJD$  implica un cierto tipo de correlación estática, adicional a la correlación de espín que está implícita en la aproximación  $HF$ .

En este trabajo estudiamos las propiedades del estado base del gas de electrones en dos dimensiones a campo magnético cero, consideraremos dos tipos distintos de simetría, la cuadrada y la hexagonal en las fases paramagnética y ferromagnética. Las funciones de estado consideradas son desarrolladas en términos de orbitales consistentes en ondas planas moduladas por un factor. Con estos orbitales se reproduce una simetría dada y se incluye la solución trivial de onda plana como una solución posible.

La forma general de la ecuación de estado esta dada por:

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{A}} \sum_{\mathbf{s}_l} C_{\mathbf{s}_l} \phi(\mathbf{r}, q_0 \mathbf{s}_l) \quad (29)$$

En esta expresión  $\mathbf{k} = k_x \hat{i} + k_y \hat{j}$  y  $\mathbf{r} = x \hat{i} + y \hat{j}$ .  $A$  es el área donde se consideran condiciones periódicas, las condiciones de ortonormalidad para cada uno de los orbitales implican que  $q_0 = 2k_F$ , donde  $k_F$  es el momento de Fermi. Los coeficientes  $C_{\mathbf{s}_l}$  se consideran independientes de  $\mathbf{k}$ . La función de estado se obtiene cuando los coeficientes  $C_{\mathbf{s}_l}$  se determinan autoconsistentemente resolviendo las ecuaciones de Hartree-Fock con las condiciones de ortonormalidad. El vector  $\mathbf{s}_l = s_{lx} \hat{i} + s_{ly} \hat{j}$  determina la estructura cristalina y el índice  $l$  recorre todos los sitios de la red. El primer término de la expansión  $s_x = s_y = 0$  corresponde a la solución de onda plana ( $OP$ ). A densidades grandes las  $OP$  se obtienen como solución autoconsistente del estado base  $HF$  y el fondo neutralizante permanece uniforme como en el modelo de  $MJU$ . A densidades

intermedias se encuentra un estado base corrugado el cual, a bajas densidades, se aproxima al de un cristal de Wigner con la simetría considerada.

Existen dos redes asociadas con cualquier estructura cristalina, la red cristalina directa y la red recíproca. Los vectores de la red directa tienen unidades de [*longitud*] y los de la red recíproca unidades de [ $\frac{1}{longitud}$ ]. El vector  $q_0\mathbf{s}_l = q_0s_{lx}\hat{i} + q_0s_{ly}\hat{j}$  está en la red recíproca. Con este vector se determina la estructura cristalina al recorrer el índice  $l$  todos los sitios de la red. En nuestra simulación, con los valores permitidos de  $s_l$  se van llenando capas sucesivas de esos puntos de la red en el espacio de momentos. La red cristalina del espacio de configuración es a su vez recíproca de la red que construimos en el espacio de momentos.

Todas las propiedades del sistema están en función del parámetro de entrada  $r_s$ . Sin embargo el cálculo de las propiedades del sistema depende del número de términos en el desarrollo (29), por lo que debemos de alcanzar la convergencia con un número mínimo de términos en el desarrollo, tal que nuestros resultados no cambien si se calculan con una función de estado que tenga un número mayor de términos. Todos estos cálculos requieren del trabajo de computadoras con una gran capacidad. Con el objeto de economizar los cálculos las dimensiones de las matrices involucradas son disminuidas introduciendo las propiedades de simetría del sistema en el estado base. El precio de la reducción implica un aumento en la complejidad de los elementos de matriz.

## 2.1 La red cuadrada.

La forma explícita de la ecuación (29) que a muy bajas densidades reproduce un cristal de Wigner con simetría cuadrada es



$$\Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{A}} \sum_{n_x=-N}^N \sum_{n_y=-N}^N C_{n_x, n_y} e^{iq_0 n_x x} e^{iq_0 n_y y} \quad (30)$$

El número de términos para la función de estado es  $(2N + 1)^2$ . Debido a que en el estado base los coeficientes en la expansión anterior satisfacen la propiedad  $C_{n_x, n_y} = C_{-n_x, n_y} = C_{n_x, -n_y} = C_{-n_x, -n_y}$ , la expansión de la función de estado puede ser escrita de la siguiente manera:

$$\Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{A}} \sum_{n_x=0}^N \sum_{n_y=0}^N C'_{n_x, n_y} \cos(q_0 n_x x) \cos(q_0 n_y y), \quad (31)$$

reduciéndose así el número de términos a  $(N + 1)^2$ . La suma sobre los valores negativos de los índices no es necesaria con el uso de las nuevas funciones. Si ahora se introduce la equivalencia de las direcciones  $x$  y  $y$  la última expresión puede ser simplificada.

$$\Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{A}} \sum_{n_x=0}^N \sum_{n_y=0}^{n_x} C''_{n_x, n_y} \mathbf{P}_{n_x, n_y} \cos(q_0 n_x x) \cos(q_0 n_y y), \quad (32)$$

donde  $\mathbf{P}_{n_x, n_y}$  es un operador que suma todas las permutaciones de los subíndices  $n_x$  y  $n_y$ . El número de términos en la expansión para la función de estado es ahora  $\frac{(N+1)(N+2)}{2}$ , el cual está considerablemente reducido con respecto de la primera expansión. La reducción en el tamaño de las matrices para una  $N$  dada permite incrementar el valor del límite superior en la ecuación (32) y ampliar la región de  $r_s$  donde podemos encontrar convergencia.

$N$	$(2N + 1)^2$	$(N + 1)^2$	$\frac{(N+1)(N+2)}{2}$
4	81	25	15
8	289	81	45
16	1089	289	153

Tabla I. Reducción del número de términos en el desarrollo para la red cuadrada

En la tabla I se muestra el número de términos en cada uno de los desarrollos para distintos valores de  $N$

## 2.2 La red hexagonal

La función de onda que a muy bajas densidades reproduce un cristal de Wigner con simetría hexagonal es:

$$\Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{A}} \left[ C_{0,0} + \sum_{n=1}^N \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=0}^5 C_{n,l,m} e^{i q_0 \mathbf{S}_{n,l,m} \cdot \mathbf{r}} \right] \quad (33)$$

En esta expresión  $\mathbf{k}$  y  $\mathbf{r}$  son vectores en dos dimensiones y  $\mathbf{S}_{n,l,m} = S_{x_{n,l,m}} \hat{i} + S_{y_{n,l,m}} \hat{j}$  es un vector que reproduce la simetría hexagonal. El número de términos del desarrollo es de  $3N(N+1)$ . Si se introduce la simetría de rotación del sistema se tiene que  $C_{n,l,m} = C_{n,l,m'}$  y entonces podemos escribir la función anterior como

$$\Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{A}} \left[ C_{0,0} + \sum_{n=1}^N \sum_{l=0}^{n-1} C'_{n,l} \mathbf{R}_6 e^{i q_0 \mathbf{S}_{n,l} \cdot \mathbf{r}} \right] \quad (34)$$

donde  $\mathbf{R}_6$  es un operador de rotación de orden 6 actuando sobre el vector  $\mathbf{S}_{n,l}$ . El número de coeficientes a evaluar se reduce ahora a  $\frac{N(N+1)}{2}$ . Existe una simetría adicional que refleja la estructura cristalina encima de la línea media de un sextante tal que  $C'_{n,l} = C'_{n,l'}$  siendo la función de estado

$$\Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{A}} \left[ C_{0,0} + \sum_{n=1}^N \sum_{l=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} C''_{n,l} R(n,l) \mathbf{R}_6 e^{i q_0 \mathbf{S}_{n,l} \cdot \mathbf{r}} \right] \quad (35)$$

Siendo  $R(n,l)$  un operador que refleja el vector  $\mathbf{S}_{n,l}$  únicamente cuando  $n > 2$  y  $l \neq 0$  y si  $l \neq \frac{n}{2}$  cuando  $n$  es par. El número de coeficientes a determinar para una  $N$  dada es  $(\frac{N}{2} + 1)^2$  si  $N$  es par y  $\frac{(N+1)(N+3)}{4}$  si  $N$  es impar. Nótese que introducir todas las simetrías de la red en esta función implica imponer condiciones más complicadas sobre

los índices de la suma. En la tabla II se muestra el número de términos en cada uno de los desarrollos correspondientes a la función del estado base de la red hexagonal.

$N$	$3N(N + 1)$	$\frac{N(N+1)}{2}$	$(\frac{N}{2} + 1)^2$	$\frac{(N+1)(N+3)}{4}$
4	60	10	9	
9	270	45		30
16	816	136	81	

Tabla II Reducción del número de términos en el desarrollo para la red hexagonal

En la figura 3 se muestra la simetría de la red hexagonal. Los hexágonos centrados en el punto  $o$  corresponden a valores sucesivos del índice  $n$  de la ecuación (33) a partir de  $n = 1$ , los 6 lados de cada hexágono corresponden a los distintos valores del índice  $m$  en la misma ecuación. Los sitios de la red colocados sobre cada lado de un hexágono son generados por los valores posibles del índice  $l$ . La función (34) considera una rotación de orden 6 del vector  $S_{n,l}$  y la función (35) toma en cuenta una reflexión sobre la línea  $or$ .

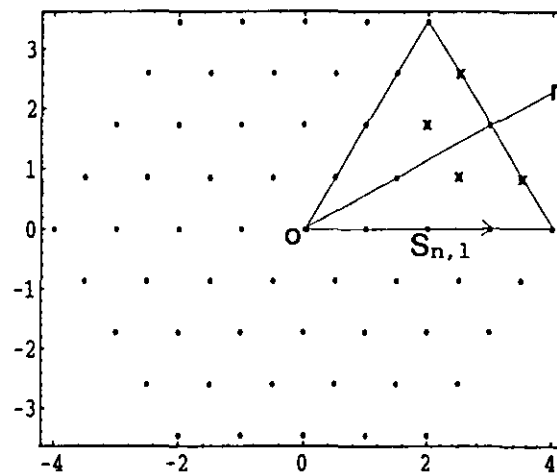


Fig 3. Simetría de la red hexagonal, el vector  $S_{n,l}$  se muestra para  $n = 3$  y  $l = 0$ . Los puntos que refleja el operador  $R(n,l)$  a través de la línea  $or$  están marcados con una  $\times$ .

## 2.3 Estrategia para el cálculo de la energía del estado base

Para las simetrías cuadrada y hexagonal las ecuaciones  $HF$  a resolver son

$$\sum_{\mathbf{s}_3} [\langle \mathbf{s}_1 \mathbf{k}_1 | T_1 | \mathbf{s}_3 \mathbf{k}_1 \rangle - \sum_{\mathbf{s}_2} \sum_{\mathbf{s}_4} \langle \mathbf{s}_1 \mathbf{k}_1 \mathbf{s}_2 \mathbf{k}_2 | v_{12} | \mathbf{s}_4 \mathbf{k}_2 \mathbf{s}_3 \mathbf{k}_1 \rangle C_{\mathbf{s}_2}^* C_{\mathbf{s}_4}^* ] C_{\mathbf{s}_3} = \epsilon_{\mathbf{s}_1} C_{\mathbf{s}_1}, \quad (36)$$

donde la  $\sum_{\mathbf{s}}$  representa aquí las sumas implícitas en cada una de las simetrías y  $\mathbf{s}$  es un vector bidimensional que caracteriza cada una de ellas. El cálculo de la energía por partícula requiere de la evaluación de términos de la forma

$$\frac{T}{\mathcal{N}} = \frac{1}{r_s^2} \sum_{\mathbf{s}} (1 + 8s^2), \quad (37)$$

para el valor esperado de la energía cinética por partícula, y

$$\frac{V}{\mathcal{N}} = -\frac{K}{r_s} \sum_{\mathbf{s}_1} \sum_{\mathbf{s}_2} \sum_{\mathbf{s}_3} \sum_{\mathbf{s}_4} C_{\mathbf{s}_1}^* C_{\mathbf{s}_2}^* C_{\mathbf{s}_3} C_{\mathbf{s}_4} \mathbf{I}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_4) \times \mathbf{F}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, \mathbf{s}_3, \mathbf{s}_4), \quad (38)$$

para el término de intercambio del potencial Coulombiano de dos cuerpos.  $\mathcal{N}$  es el número de partículas. La función  $\mathbf{I}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_4)$  es la integral del potencial de Coulomb y fue calculada numéricamente.  $\mathbf{F}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, \mathbf{s}_3, \mathbf{s}_4)$  es la suma de funciones  $\delta$  de Kronecker de las componentes de las cuatro  $\mathbf{s}'_i$ . En cada uno de los casos estudiados los coeficientes  $C_{\mathbf{s}}$  son determinados autoconsistentemente con una aproximación de  $10^{-5}$  con respecto a la iteración anterior.

Para determinar el carácter magnético del estado base del sistema se evalúan y se comparan las energías de los estados paramagnético y ferromagnético. Las funciones de estado paramagnéticas de los sistemas con simetrías cuadrada y hexagonal son determinantes de Slater con las funciones de estado (32) y (34) respectivamente. En este caso cada estado de un electrón tiene una ocupación doble con espines antiparalelos. En el estado ferromagnético cada orbital tiene una ocupación sencilla, y todos los espines tienen la misma orientación. La energía se calcula sumando sobre los estados ocupados.

En nuestra aproximación el espacio de momentos es cubierto con discos de Fermi, que en el caso paramagnético tienen un radio  $k_F$  y en el caso ferromagnético tienen un radio  $\sqrt{2}k_F$ .

Otras propiedades dependientes del parámetro de densidad  $r_s$  pueden ser evaluadas una vez determinados los coeficientes del desarrollo y la energía por partícula. La densidad de carga normalizada a la densidad de ondas planas está dada por

$$\frac{\rho}{\rho_0} = (\Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}))^2 \quad (39)$$

Como se verá más adelante la densidad de carga a densidades altas es uniforme, como la densidad de ondas planas y se observa como un plano extendido en el espacio; a densidades bajas se localiza, observándose un pico de densidad de carga en cada sitio de la red. Tanto la altura como la anchura del pico son funciones del parámetro  $r_s$ .

En nuestra aproximación los orbitales ocupados de  $\mathcal{N}$  electrones llenan un disco de Fermi de radio  $k_F$ , siendo  $k_F^2 = \frac{2\pi\mathcal{N}}{A}$ . Cada electrón está contenido en un círculo de área  $\pi r_s^2$ , de donde obtenemos la relación  $k_F = \frac{\sqrt{2}}{r_s}$ . En nuestro cálculo esta aproximación inducirá una ocupación fraccional por pico en el estado corrugado. Podemos estimar una corrección en nuestros cálculos en la región de bajas densidades, donde la energía es proporcional al momento de Fermi, dada por  $(\sqrt{a} - \sqrt{a_{disco}})/\sqrt{a}$ , donde  $a$  es el área de la celda que contiene una partícula. La corrección será del orden de  $1 - \sqrt{\pi}/2$  en el sistema con simetría cuadrada, donde el área de la celda unitaria es  $4r_s^2$ . La corrección será de  $1 - \sqrt{\pi/(2 \times 3^{\frac{1}{2}})}$  para el sistema con simetría hexagonal, donde la celda unitaria es un rombo de área  $2\sqrt{3}r_s^2$ .

En la figura 4 mostramos la red con simetría hexagonal en el espacio  $\mathbf{k}$ . Los vectores primitivos  $\mathbf{a}$  y  $\mathbf{b}$  generan la celda unitaria. Los vectores  $\mathbf{A}$  y  $\mathbf{B}$  están en las direcciones de los vectores de la red recíproca, la cual también es hexagonal. La magnitud de los

vectores de la red recíproca es  $\frac{4\pi}{\sqrt{3}q_0} \approx 2.56r_s$ . La red recíproca de la red cuadrada también es cuadrada y el parámetro de la red es  $\frac{2\pi}{q_0} \approx 2.23r_s$ .

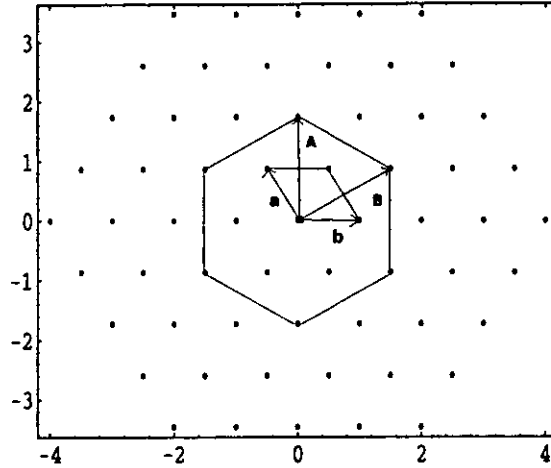


Fig 4. La red hexagonal en el espacio de momentos, los vectores primitivos son **a** y **b**. **A** y **B** están en las direcciones de los vectores de la red recíproca. La escala está en unidades de  $q_0$ .

## 2.4 La estabilidad del sistema

El comportamiento de la presión y la compresibilidad son utilizados como criterios para estudiar la estabilidad de un sistema. Es conocido que con el *MJU* se obtienen compresibilidades negativas para  $r_s > 2$ . Tradicionalmente no se considera que el sistema sea inestable ya que se le atribuyen al fondo propiedades adicionales que compensan el sistema, de este modo el fondo es visto como un reservior de presión positiva [11]. Sin embargo otros autores [42] consideran esto como una anomalía y han creado el modelo de la jalea estabilizadora con el que se han obtenido compresibilidades positivas a densidades metálicas en  $3D$ .

La energía por partícula depende únicamente del parámetro  $r_s$  el cual determina la

densidad electrónica. En el *MJD* este parámetro también determina la densidad del fondo. Por lo que resulta interesante comparar la compresibilidad del sistema calculada en el *MJD* con la calculada con el *MJU*.

En nuestra aproximación teórica la energía debe ser independiente de  $N$ . La convergencia en la energía se alcanza aumentando el valor del límite superior en la suma de la ecuaciones (32) y (34). Una vez que la convergencia se ha obtenido, la estabilidad del sistema puede ser determinada a partir de la ecuación de estado  $E(r_s)$ . La presión del sistema, la cual es una cantidad escalar depende de la primera derivada de la energía y en dos dimensiones se define como  $p = -\frac{1}{2\pi r_s} \frac{dE}{dr_s}$  y la compresibilidad inversa está dada por [29]

$$\frac{\kappa_0}{\kappa} = \frac{r_s^4}{8} \left( \frac{d^2 E}{dr_s^2} - \frac{1}{r_s} \frac{dE}{dr_s} \right) \quad (40)$$

Aquí,  $\kappa_0 = \frac{\pi r_s^4}{2} (\mathcal{N} a_0^2)$  es la compresibilidad de un gas de electrones no interactuante.  $\mathcal{N}$  es el número de partículas y  $a_0$  es el radio de Bohr.

# CAPITULO IV

## Resultados

En un trabajo anterior [34] se determinaron las transiciones magnéticas y de simetría de un *GE2D* considerando una simetría cuadrada con el método *HF* autoconsistente en el *MJD*. En este trabajo se alcanzó una buena convergencia en la energía hasta densidades  $r_s \approx 28$  para la fase paramagnética y  $r_s \approx 50$  para la fase ferromagnética. Con la precisión alcanzada en este cálculo no fue posible establecer claramente la existencia de un mínimo en la curva de energía. En este trabajo utilizamos la misma técnica para analizar cuidadosamente la convergencia de la energía como función del número de términos del desarrollo a densidades intermedias y bajas y para explorar la región de densidades donde se presume la existencia de un mínimo en el sistema con simetría cuadrada. Por otro lado calculamos por primera vez la función de estado y la energía por partícula del *GE2D* considerando una simetría hexagonal. Para ambas simetrías los coeficientes de los desarrollos fueron calculados autoconsistentemente con una precisión de  $10^{-5}$  con respecto de la última iteración. Las integrales del potencial de Coulomb en la ecuación (38) fueron calculadas numéricamente.

El criterio utilizado para fijar una precisión de  $10^{-5}$  en nuestro cálculo está basado en que las diferencias entre un resultado obtenido con esta precisión y el obtenido con una precisión mayor no son observables gráficamente, en cambio el número de iteraciones necesarios para alcanzar la autoconsistencia con una precisión mayor puede crecer considerablemente.



Las energías del estado ferromagnético son obtenidas a partir de las energías de la fase paramagnética mediante el escalamiento de  $r_s$  por  $\sqrt{2}$ . Comparando las curvas de energía de los estados paramagnético y ferromagnético se obtienen las transiciones magnéticas del sistema para cada una de las simetrías estudiadas. A continuación mostraremos los resultados obtenidos con ambas simetrías.

## **1 La convergencia en la energía por partícula.**

En numerosos cálculos realizados con redes en 1, 2 y 3D los resultados dependen del número de vecinos tomados en cuenta, en nuestro cálculo los resultados dependen del número de sitios de la red considerados; sin embargo podemos establecer un límite, con la precisión que requerimos, para el cual las propiedades del sistema son independientes del número de sitios tomados en cuenta al calcularlas. Como veremos más adelante el número límite de sitios depende del parámetro de densidad  $r_s$ , de tal forma que a densidades altas la convergencia en la energía se alcanza con un número pequeño de sitios; pero a bajas densidades, para alcanzar la convergencia en la energía, se requiere un gran número de términos en la función de estado, lo cual implica un enorme gasto computacional.

La primera acción que podemos llevar a cabo para reducir el costo computacional es considerar las simetrías de las redes. Estas simetrías fueron discutidas para cada una de las redes en el capítulo III. Como se recordará, el número de términos del desarrollo de la función de estado se reduce al introducir las simetrías. El número de términos está en función del límite superior,  $N$ , en las sumas de las funciones dadas por la ec(30) y la ec(33) para la red cuadrada y la red hexagonal respectivamente.

En la Tabla III mostramos comparativamente la reducción en el número de términos

en el desarrollo para la función de estado que se consigue al introducir las simetrías propias de la red cuadrada y de la red hexagonal. Como se puede ver en la tabla III, para cualquier valor de  $N$  la función de estado de la simetría cuadrada excede de la hexagonal en  $N + 1$  elementos. Por lo que las dimensiones de las matrices de la simetría cuadrada para un valor de  $N$  son siempre mayores que las matrices involucradas en la simetría hexagonal, por ejemplo 300 y 276 para  $N = 23$ . Sin embargo la construcción de la función de estado hexagonal es más complicada en cuanto se refiere al programa de cálculo.

simetría	dimensión	reducción
cuadrada	$(2N + 1)^2$	$(N + 1)(N + 2)/2$
hexagonal	$3N(N + 1)$	$N(N + 1)/2$

Tabla III. Reducción del número de términos en las funciones de estado.

En cada uno de los casos el número de sitios de la red considerados corresponde a la dimensión original, esto es  $(2N + 1)^2$  para la red cuadrada y  $3N(N + 1)$  para la red hexagonal. Las funciones de estado reducidas reproducen el mismo número de sitios de la red. En la tabla IV comparamos el número de sitios tomados en cuenta en cada una de las simetrías para diferentes valores de  $N$ . La diferencia en el número de sitios tomados en cuenta en la red cuadrada, con respecto a la red hexagonal, es de  $N^2 + N + 1$  para una  $N$  dada. Como veremos más adelante esta situación se verá reflejada en la convergencia de la energía en cada una de las redes.

simetría	dimensión	$N = 4$	$N = 12$	$N = 20$
cuadrada	$(2N + 1)^2$	81	625	1681
hexagonal	$3N(N + 1)$	60	468	1260

Tabla IV. Numero de sitios considerados en cada una de las redes en función de  $N$ .

En las siguientes subsecciones se discutirán por separado los comportamientos de la convergencia en la energía del sistema con la simetría cuadrada y del sistema con la simetría hexagonal, por último volveremos a comparar ambos sistemas.

### 1.1 La red cuadrada

Con el objeto de tener una solución independiente del número de términos del desarrollo se realizaron cálculos con  $N$  hasta 28 en la ecuación (32) para la red cuadrada [9]. El comportamiento de la energía por partícula (en Rydbergs) del estado paramagnético se muestra para diferentes valores de  $N$  en las figura 5, desde  $N = 0$  en la parte superior, hasta  $N = 28$ . La curva correspondiente a  $N = 0$  es la solución de  $OP$ . Para valores de  $r_s < 4.8$  todas las curvas con  $N \neq 0$  coinciden con la curva de onda plana, esto es porque en esta región de densidades, la solución  $HF$  autoconsistente converge a la solución  $OP$  y todos los coeficientes del desarrollo son cero excepto el correspondiente al término de onda plana. Los siguientes términos del desarrollo comienzan a contribuir a la función de estado a un valor de  $r_s = 4.8$ , en este punto se presenta la transición de la fase fluida a la fase corrugada con simetría cuadrada. En el punto de transición la convergencia se alcanzó con  $N = 4$ , las diferencias en la energía obtenidas con valores mayores de  $N$  son menores al ancho de una línea y las curvas se superponen. En la figura 5 se puede observar que para alcanzar la convergencia se requiere un mayor número de términos en el desarrollo a medida que  $r_s$  aumenta, de tal forma que la

convergencia se obtuvo en  $r_s \approx 40$  con  $N = 24$ . Con  $N = 28$  se consiguió una buena convergencia en la energía del estado paramagnético para valores de  $r_s$  hasta 44.

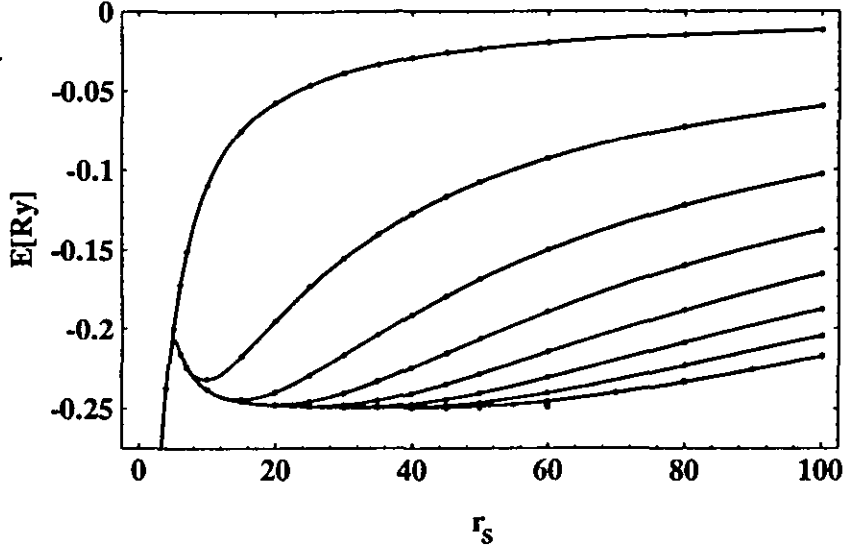


Fig 5. Energía como función de  $r_s$  para el sistema con simetría cuadrada. Las curvas corresponden a  $N = 0, 4, 8, 12, 16, 20, 24$  y  $28$  de arriba hacia abajo.

Una familia de curvas similar a la que acabamos de analizar se obtuvo para el estado ferromagnético, en este caso la transición de la fase fluida a la fase corugada con simetría cuadrada se obtuvo en  $r_{sc} = 6.8$ . La región de convergencia en la energía se extiende para el estado ferromagnético hasta  $r_s \approx 62$ .

## 1.2 La red hexagonal

La función de estado de partícula independiente y la energía por partícula en función de  $r_s$  para la simetría hexagonal se determinaron utilizando las ecuaciones (34), (37) y (38) con  $N$  hasta 23. En la figura 6 se muestra la energía por partícula del sistema paramagnético como función de  $r_s$  para diferentes valores de  $N$ , desde  $N = 0$ , hasta

$N = 23$ . En la parte superior se muestra el resultado de ondas planas. Para valores de  $r_s < 3.8$  todas las curvas con  $N \neq 0$  coinciden con la curva de ondas planas, a estas densidades la solución autoconsistente del *MJD* converge a la solución de ondas planas. En  $r_s = 3.8$  el sistema presenta una transición de simetría de la fase fluida a la fase corrugada con simetría hexagonal.

En la figura 6 puede observarse que se requiere un menor número de términos en el desarrollo en la función de estado para alcanzar la convergencia en la energía a densidades altas ( $r_s$  pequeñas), de tal forma que la convergencia en el punto de transición se alcanza con  $N = 5$ . Esto es, a la densidad de transición basta tomar en cuenta 90 sitios de la red hexagonal para describir las propiedades de la red completa. Con  $N = 23$  obtuvimos convergencia hasta  $r_s \approx 32$ . El límite de convergencia está dado por el punto donde la curva de energía obtenida con esta  $N$  se separa de la curva calculada con  $N = 22$ .

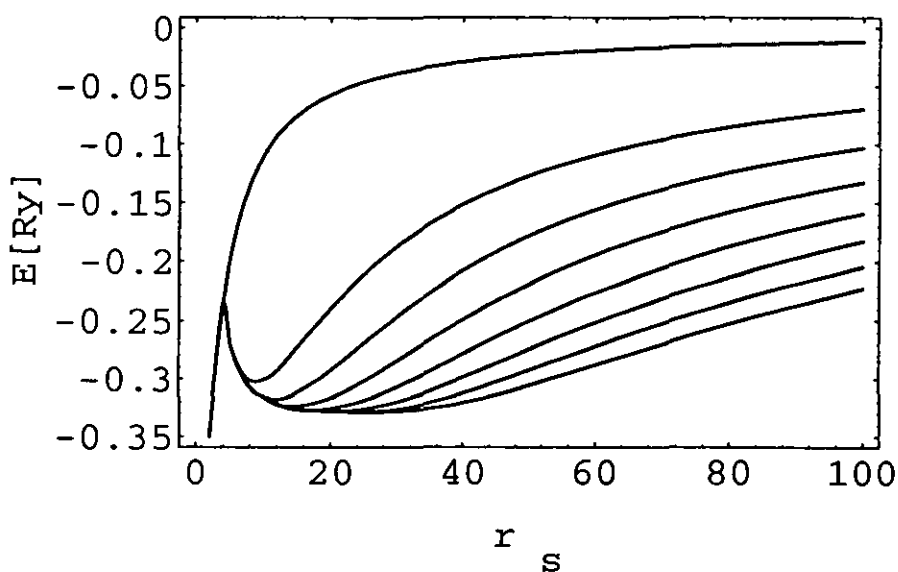


Fig 6. Energía como función de  $r_s$  para el sistema con simetría hexagonal. Las curvas corresponden a  $N = 0, 5, 8, 11, 14, 17, 20, 23$  de arriba hacia abajo.

Para el estado ferromagnético obtuvimos una familia similar de curvas de la energía por partícula en función de  $r_s$ . En este caso la transición de la fase fluida a la fase corrugada con simetría hexagonal se obtuvo a  $r_{sc} = 5.4$ . La región de convergencia se extiende hasta  $r_s \approx 45$ .

En las figuras 5 y 6 se puede observar que a  $r_s$  menores a la de transición la solución autoconsistente en el modelo de jalea deformable coincide con la solución de onda plana. Esto es, todos los coeficientes del desarrollo en las ecuaciones (32) y (34) son cero excepto el primero. En esta región de densidades el fondo neutralizante del *MJD* es homogéneo como el fondo neutralizante del *MJU* y hay una distribución uniforme de la carga. A  $r_s = r_{sc}$  se observa la transición de la fase fluida a una fase corrugada, donde comienza una distribución periódica de la carga. A bajas densidades la carga está fuertemente localizada como en un cristal de Wigner.

### 1.3 Límites de convergencia

Con el propósito de comparar la convergencia en la energía para ambas soluciones mostramos en la figura 7 las curvas de energía por partícula en la fase paramagnética para los sistemas con simetría cuadrada (curva continua) y hexagonal (curva a trazos). Los valores de  $N$  son 0, 4, 8, 12, 16 y 20 de arriba hacia abajo. La solución de onda plana  $N = 0$  es la misma para ambas simetrías. La convergencia en la energía se vuelve más lenta cuando  $r_s$  aumenta y la diferencia en las energías calculadas con dos valores sucesivos de  $N$  crece con  $r_s$ . En la figura 7 se puede observar que la convergencia es aún más lenta para la red hexagonal, esto es porque la función de la red hexagonal reproduce un número menor de sitios de la estructura cristalina que la función de la red cuadrada para un mismo valor de  $N$ , como se mostró en la Tabla IV.

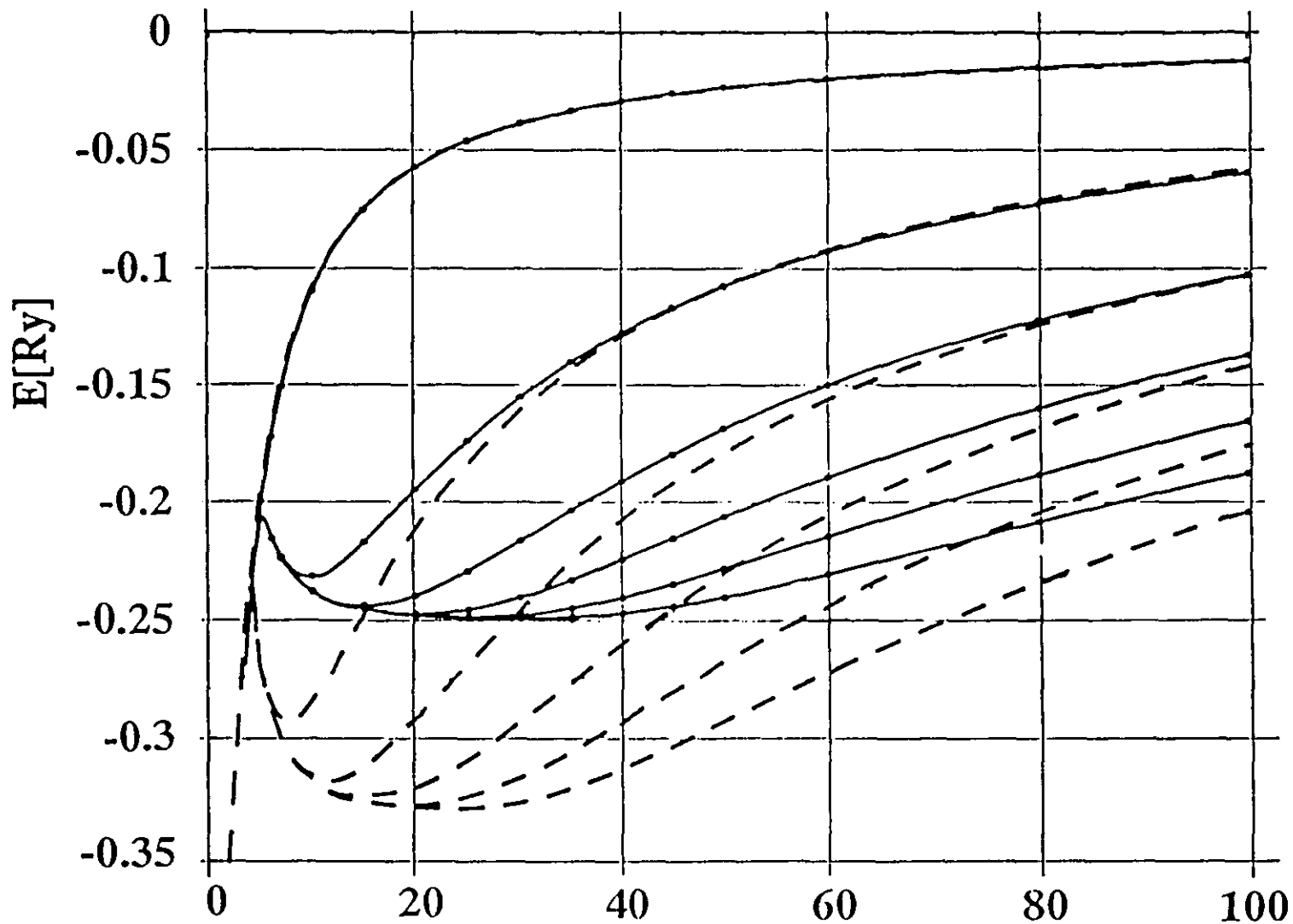


Fig. 7. Energía por partícula en función de  $r$ , para los sistemas con simetría cuadrada (trazo continuo) y hexagonal (trazo interrumpido). Los valores de  $N$  son 0, 4, 8, 12, 16 y 20, de arriba hacia abajo.

A bajas densidades es más notable que la convergencia en la energía para la red hexagonal es más lenta que para la red cuadrada, debido a esto, podemos observar que en las curvas con  $N = 4$ , la energía de la red cuadrada está ligeramente por abajo que la energía de la red hexagonal. Con excepción de esta curva, después del punto de transición las curvas de la red hexagonal están por debajo de las curvas de la red cuadrada.

Los valores límites de  $r_s$  hasta los cuales se alcanzó convergencia en la energía son  $r_s \approx 44$  y  $r_s \approx 62$  con  $N = 28$  para las fases paramagnética y ferromagnética de la red cuadrada respectivamente; para las mismas fases en la red hexagonal son  $r_s \approx 32$  y  $r_s \approx 45$  con  $N = 23$ . Un hecho interesante que puede ser notado en la gráfica 7 es la existencia de un mínimo, muy definido, en las curvas con  $N = 4$ ; sin embargo este punto se hace menos notable a medida que, con  $N$  mayores, se extiende la región de convergencia. En cada simetría, el mínimo se observa en una región donde la curva de energía es muy plana, donde el valor de la energía es de  $\approx -0.25Ry$  para la red cuadrada y de  $\approx -0.33Ry$  para la red hexagonal. A medida que  $N$  crece esta zona abarca un intervalo de  $r_s$  más grande, de tal manera que la región de presión  $\approx 0$  se extiende a valores de  $r_s$  muy cercanos a los límites de convergencia.

En la tabla V se muestran los valores mínimos de  $N$  con los cuales se obtiene convergencia a diferentes valores de  $r_s$  y en el punto de transición  $r_{sc}$  para los sistemas con simetría cuadrada y hexagonal. Se muestran también el número de sitios de la red que se reproducen en cada una de las simetrías con este límite. En la tabla se observa que el número de sitios con los que se alcanza la convergencia es similar en ambas simetrías.



$r_s$	$r_{sc}$	10	20	30
N cuadrada	4	6	13	18
sitios de la red	81	169	729	1369
N hexagonal	5	7	15	21
sitios de la red	90	168	720	1386

Tabla V. Valores límites de  $N$  y el número de sitios correspondientes para diferentes valores de  $r_s$ . Con el número de sitios indicado se obtiene convergencia en la energía;  $r_{sc}$  es el punto de transición (4.8 y 3.8 para las redes cuadrada y hexagonal respectivamente).

Para dar conclusiones definitivas del comportamiento de la curva de energía en la región del mínimo aparente y a densidades más bajas en lugar de continuar con el procedimiento de aumentar el número de términos en la función de estado, con el consecuente aumento en el gasto computacional, escogimos un camino alternativo que será descrito más adelante.

En la siguiente sección estudiaremos primero el estado base del sistema con cada una de las simetrías. Para determinar las transiciones magnéticas del sistema trabajaremos en cada una de las simetrías con la mejor solución obtenida ( $N = 28$  para la red cuadrada y  $N = 23$  para la red hexagonal). Con el objeto de determinar el estado base del gas de electrones en cada una de las simetrías compararemos las curvas de energía de las fases paramagnética y ferromagnética.

## 2 Las transiciones magnéticas

Es conocido [34, 43] que a muy altas densidades ( $r_s \approx 2$ ) en la aproximación  $HF$  hay una transición de onda plana paramagnética ( $OPP$ ) a onda plana ferromagnética

(*OPF*), por lo que este resultado predice que el gas de electrones  $2D$  a densidades  $r_s < 2$  es un gas paramagnético y a densidades  $r_s > 2$  es un gas ferromagnético. Como se recordará, en el capítulo II vimos que en el *MJU* Ceperley [28] reporta la existencia de un gas ferromagnético a densidades  $13 < r_s < 33$ . Posteriormente este resultado es corregido por un cálculo más preciso realizado con el mismo método [29]. En este trabajo, las energías calculadas para las fases paramagnética y ferromagnética son muy próximas, por lo que no es posible distinguir las transiciones magnéticas del sistema. En la referencia [27] del *MJU* tampoco se reportan transiciones magnéticas en el gas de electrones  $2D$ . En esta sección discutiremos las transiciones magnéticas del gas de electrones en el *MJD*. Mostraremos primero los resultados obtenidos para el sistema con simetría cuadrada.

## 2.1 La red cuadrada

En la figura 8 se muestran las energías por partícula de los estados paramagnético (curva continua) y ferromagnético (curva interrumpida) obtenidas con  $N = 28$ . En ambas curvas, como vimos anteriormente el punto donde hay un cambio discontinuo de la pendiente es el punto donde la densidad de carga electrónica cambia de homogénea a localizada. El estado más estable, a cualquier densidad  $r_s$ , es el que tiene la menor energía. En la figura podemos observar que una transición magnética y de simetría ocurre de una *OPF* a una fase localizada paramagnética a  $r_s \approx 6.6$ . En este punto la densidad de carga electrónica se localiza en una red cuadrada. A bajas densidades se produce una transición magnética de la fase localizada paramagnética a la fase localizada ferromagnética a  $r_s \approx 42$ . La transición magnética a alta densidad en  $r_s \approx 2$

de *OPP* a *OPF* no se muestra en la figura.

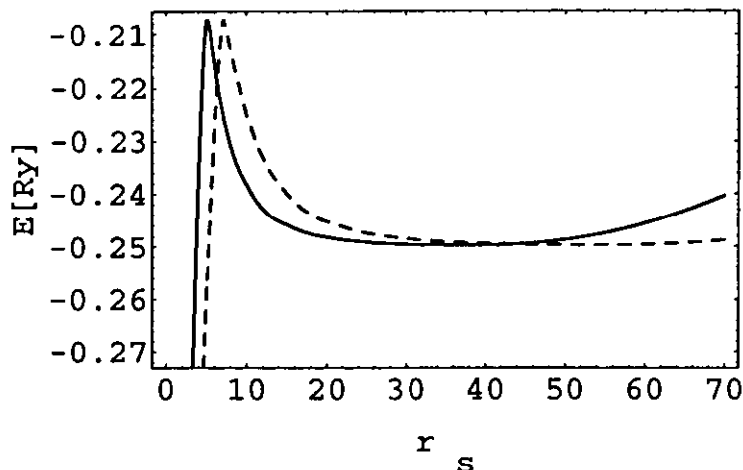


Fig. 8. Energía por partícula de los estados paramagnético (curva continua) y ferromagnético (curva interrumpida) del sistema con simetría cuadrada. Se observa una transición magnética y de simetría en  $r_{st1} \approx 6.6$ , y una transición magnética en  $r_{st2} \approx 42$ .

El estado base *HF* de este sistema en el modelo de jalea deformable desde  $r_s \approx 2$  hasta  $r_{st1} \approx 6.6$  corresponde a una *OPF*. En este punto ocurre una transición magnética y de simetría y para valores de  $r_{st1} < r_s < r_{st2}$  el estado base del sistema es paramagnético localizado. A  $r_{st2} \approx 42$  el gas de electrones presenta una transición magnética a un estado ferromagnético localizado por lo que a bajas densidades el estado base del sistema con simetría cuadrada es ferromagnético.

## 2.2 La red hexagonal

En la figura 9 tenemos las curvas de las energías por partícula en el estado paramagnético (trazo continuo) y el estado ferromagnético (trazo interrumpido) para el sistema con simetría hexagonal obtenidas con  $N = 23$ . La transición a altas densidades de *OPF* a la fase paramagnética localizada en una red hexagonal ocurre a

$r_s \approx 4.8$ . A bajas densidades la transición de la fase localizada paramagnética a la fase localizada ferromagnética ocurre a  $r_s \approx 29$ . Este valor de  $r_s$  está dentro de los límites de convergencia de nuestra solución.

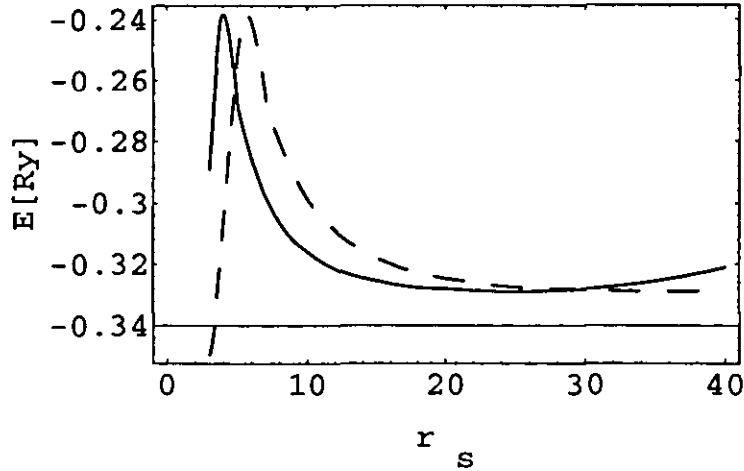


Fig. 9. Energía por partícula de los estados paramagnético (curva continua) y ferromagnético (curva interrumpida) del sistema con simetría hexagonal. Se observa una transición magnética y de simetría en  $r_s \approx 4.8$  y una transición magnética en  $r_s \approx 29$ .

El estado base del sistema de  $r_s \approx 2$  hasta  $r_{st1} \approx 4.8$  es un fluido ferromagnético. En este punto el sistema presenta una transición magnética y de simetría. El estado base de sistema para densidades  $r_{st1} < r_s < r_{st2}$  es paramagnético localizado en una red hexagonal. En  $r_{st2} \approx 29$  el sistema presenta una transición magnética a un estado ferromagnético localizado.

Para ambas redes se encontraron varias transiciones magnéticas. En la fase fluida del sistema, una transición de un estado paramagnético a un estado ferromagnético. La segunda transición es una transición magnética y de simetría, de una fase homogénea ferromagnética a una fase localizada paramagnética. Finalmente en la fase localizada del *GE2D*, el sistema cambia de un estado paramagnético a un estado ferromagnético.

Este resultado del *MJD* contrasta con el resultado del *MJU*, en el que no se reportan transiciones magnéticas en el *GE2D*. A bajas densidades el estado base del sistema es un cristal de Wigner en la fase ferromagnética. Se encontró un resultado similar para una red cúbica simple para el *GE3D* [33] con el modelo de jalea deformable.

### 3 El estado base del gas de electrones bidimensional

Con el objeto de obtener la simetría cristalina del estado base, comparamos las energías por partícula como función de  $r_s$  de las simetrías cuadrada y hexagonal. En la figura 10 se muestran las energías en el estado paramagnético de los sistemas con simetría cuadrada (curva interrumpida) y hexagonal (curva continua) calculadas con  $N = 22$  ( 2025 y 1518 sitios). En esta figura podemos observar que la energía del estado base hexagonal es menor que la energía de la simetría cuadrada en toda la región de densidades.

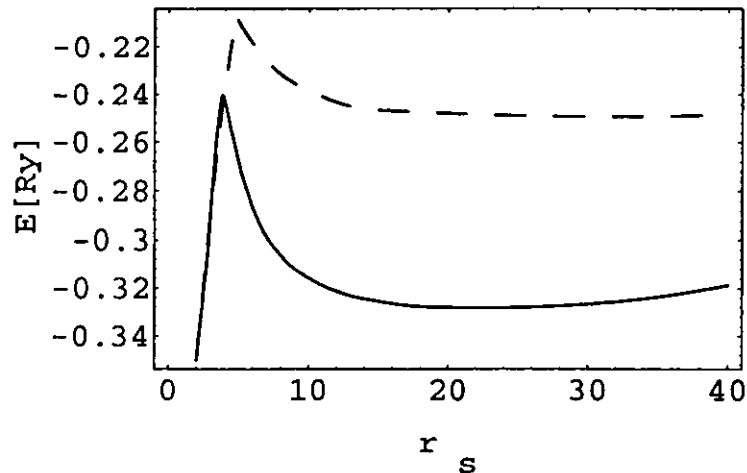


Fig. 10. Energía del estado base paramagnético en función de  $r_s$ . Las curvas interrumpida y continua corresponden a las simetrías cuadrada y hexagonal respectivamente.

La energía de la red hexagonal obtenida con  $N = 22$  es más baja que la energía de la red cuadrada obtenida con  $N = 28$  inclusive. Por lo que el sistema más estable corresponde a la red hexagonal. Este resultado coincide con el resultado del sistema clásico estudiado por Bonsall y Maradudin [36]. Una conclusión equivalente podemos obtener al comparar las curvas del estado ferromagnético para ambas simetrías.

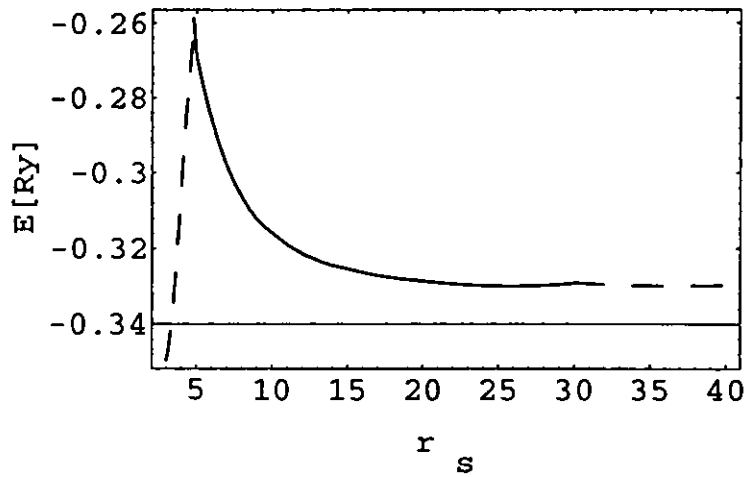


Fig. 11. Energía del estado base del  $GE2D$ . Las secciones de la curva donde el trazo está interrumpido corresponden a fases ferromagnéticas del sistema y la sección de trazo continuo corresponde a una fase paramagnética. La simetría de la fase localizada es hexagonal.

En la figura 11 mostramos la energía por partícula del estado base del gas de electrones. Las curvas con trazo interrumpido corresponden a la fase ferromagnética y la curva de trazo continuo corresponde a la fase paramagnética. El sistema presenta una transición de simetría en  $r_{st1} = 4.8$ , donde la densidad de carga cambia de homogénea a localizada en una red hexagonal. También presenta tres transiciones magnéticas. La primera ocurre a muy altas densidades en  $r_{st} = 2$ , en este punto hay un cambio de un fluido paramagnético a un fluido ferromagnético, esta transición no se muestra en la figura. En  $r_{st1} = 4.8$  el sistema cambia de un estado ferromagnético a un estado

paramagnético y por último ocurre una transición hacia un estado ferromagnético en  $r_{st2} = 29$ .

Con el propósito de comparar nuestro resultado para el estado base del *GE2D* mostramos en la figura 12 en la región  $r_s < 20$  las energías por partícula obtenidas por distintos autores. La curva de trazo interrumpido muy fino, seguida de un trazo continuo más marcado corresponde a la energía del estado base del *GE2D* en el *MJD*. La curva de trazo interrumpido y la curva de trazo continuo más suave corresponden a las energías de un fluido paramagnético obtenidas en el *MJU* con el método Monte-Carlo [29] y con funciones base correlacionadas [27] respectivamente. Los puntos corresponden a la energía de una red cuadrada centrada en la cara (*CCC*) [35].

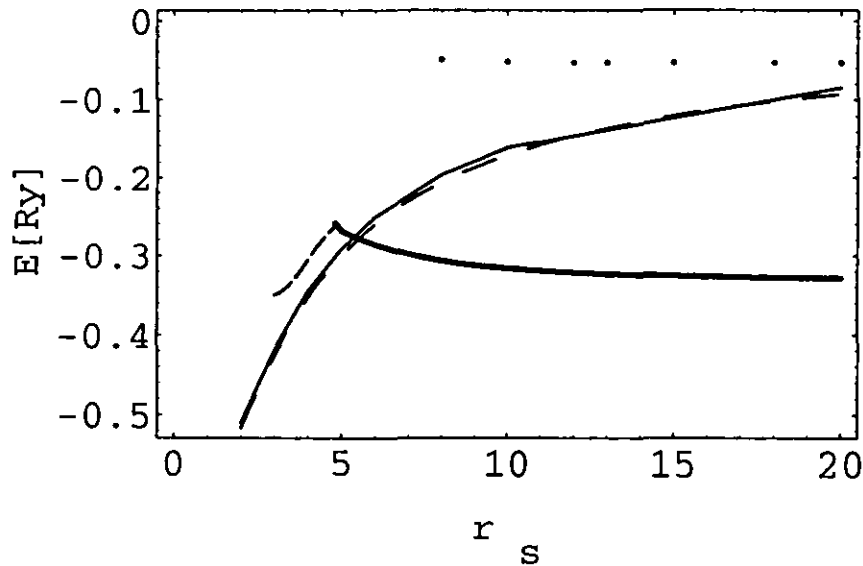


Fig. 12. Energías por partícula del estado base del *GE2D*. Las curvas de trazo interrumpido largo y trazo continuo corresponden a un fluido en las referencias [29] y [27] en el *MJU*, la curva de trazo interrumpido corto seguido de un trazo continuo grueso corresponde al estado base en el *MJD* y los puntos a una red *CCC* [35].

En el *MJU* se predice una fase fluida paramagnética en la región de densidades

que se muestra en la figura 12. Con el método Monte-Carlo se obtiene una transición del fluido a una red hexagonal en  $r_s \approx 37$ . A altas densidades, donde se espera que las correlaciones sean importantes, las curvas obtenidas con el *MJU*, en cálculos que incluyen correlaciones, están  $\approx 0.04Ry$  abajo de la obtenida con el modelo de jalea deformable. A  $r_s > 5$ , en plena fase localizada, esta relación cambia notablemente.

## 4 La densidad de carga electrónica

Conociendo los valores de los coeficientes de la función de estado del sistema, se puede calcular con la ecuación (39) la densidad de carga o densidad electrónica, normalizada a la densidad de onda plana, para cualquier distancia entre partículas. Consideremos los cambios en la densidad de carga cuando en el sistema ocurre una transición de simetría. La densidad de carga tiene una distribución uniforme a  $r_s < r_{sc}$  y en el punto de transición comienza a notarse la corrugación.

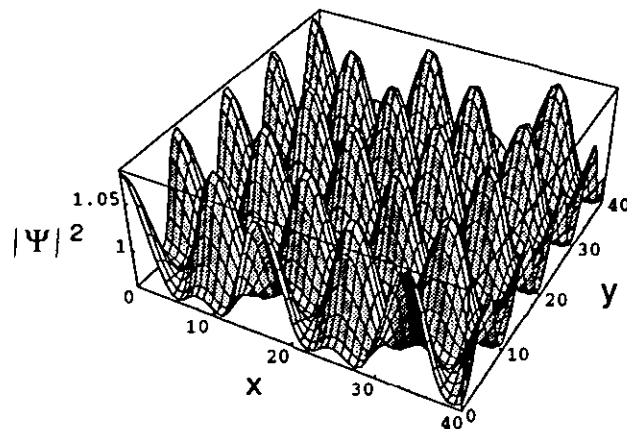


Fig. 13a. Densidad de carga centrada en una red hexagonal para el punto de transición.

En la figura 13a se muestra la densidad de carga del sistema con simetría hexagonal



a la densidad de transición,  $r_{sc} = 3.8$  para el estado paramagnético y  $r_{sc} = 5.4$  para el estado ferromagnético. En esta figura podemos observar que la densidad pasa de ser homogénea a una densidad corrugada con simetría hexagonal.

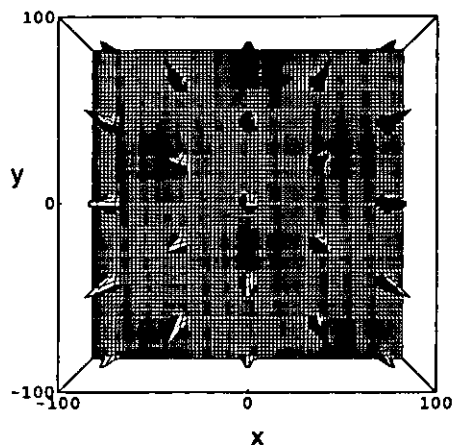


Fig. 13b. Densidad de carga en  $r_s = 20$  para la fase paramagnética hexagonal y  $r_s = 28.2$  para la fase ferromagnética hexagonal.

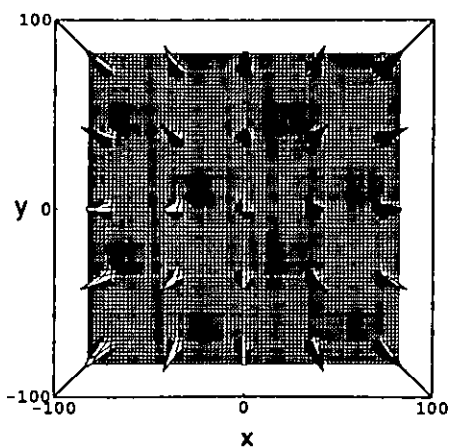


Fig. 13c. Densidad de carga en  $r_s = 20$  para la fase paramagnética cuadrada y  $r_s = 28.2$  para la fase ferromagnética cuadrada.

Las figuras 13b y 13c son vistas superiores de la densidad de carga en  $r_s = 20$  para

la fases paramagnética y  $r_s = 28.2$  para la fase ferromagnética de los sistemas con simetrías hexagonal y cuadrada respectivamente. Nótese que la densidad electrónica para estos valores de  $r_s$  está muy localizada de acuerdo a la hipótesis de Wigner, en contraste con la densidad electrónica a  $r_s$  más pequeñas donde la localización es del tipo de ondas de densidad de carga. En ambas figuras puede notarse claramente la estructura de la red. El período de la densidad de carga a lo largo de un eje de corrugación es de  $L = 2.56r_s$  para la red hexagonal y de  $L = 2.23r_s$  para la simetría cuadrada.

## 5 La estabilidad de la jalea deformable

Para estudiar la estabilidad del sistema es necesario alcanzar la convergencia en la energía en un amplia región de densidades. Una forma de extender la región de convergencia es incrementar el número de términos del desarrollo de la función de estado; pero como hemos visto, la convergencia se vuelve más lenta a medida que  $r_s$  incrementa, por lo que en lugar de continuar con este procedimiento, analizamos el comportamiento límite realizando una extrapolación en  $N$  a muy bajas densidades, evitando de este modo elevar el costo computacional. Se puede determinar la calidad del ajuste en términos de  $\chi^2$ , calculada a partir de las diferencias entre la energía extrapolada y la energía calculada a distintos valores de  $r_s$ .

Para la expansión usada en el sistema con la simetría cuadrada con  $N = 28$  se obtuvo una buena convergencia en la energía del estado paramagnético para valores de  $r_s$  hasta 44. Un hecho interesante de la curva con  $N = 28$  es que revela la existencia de un mínimo en la región de bajas densidades a  $r_s \approx 43$ . En el caso ferromagnético la región de convergencia se extiende hasta  $r_s \approx 62$  y el mínimo aparente se encuentra en

$r_s \approx 61$ . Con una extrapolación podemos determinar si la región, de presión nula, donde se encuentra este mínimo se prolonga hasta densidades muy bajas. La forma funcional de la dependencia de la energía con  $N$  [9] para el sistema con simetría cuadrada a  $r_s$  fija está dada por

$$E(N) = E(N_0) \exp \left( \int_{N_0}^N \exp(p_r(x)) dx \right) \quad (41)$$

donde  $p_r$  es un polinomio de grado  $r$  con coeficientes ajustables. Esta forma corresponde al mejor ajuste [44] para el rango de valores de  $N$ , desde 0 hasta 28 con una  $r = 3$ . Esta forma funcional fue utilizada para extrapolar a grandes valores de  $N$ . Los valores de  $\chi^2$  para este ajuste varían entre  $10^{-7}$  para  $r_s$  pequeñas y  $10^{-5}$  para  $r_s \geq 60$ .

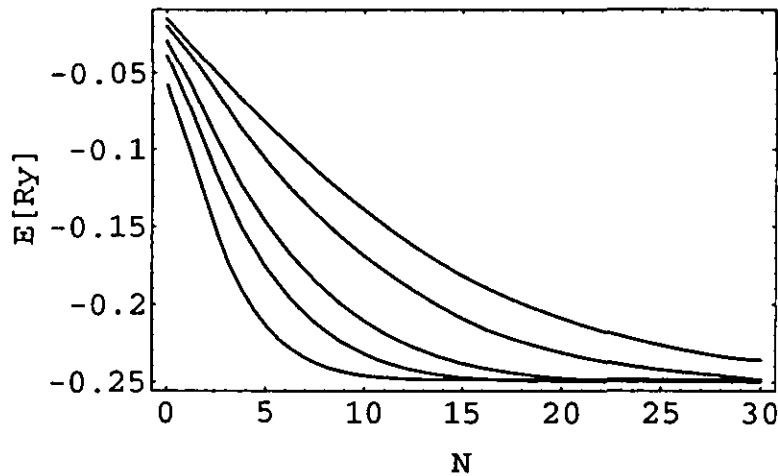


Fig. 14. Ajuste de la energía por partícula como función de  $N$ . Las curvas corresponden a  $r_s = 20, 30, 40, 60$  y  $80$ . La curva más arriba corresponde a la  $r_s$  más grande.

El resultado de la extrapolación se muestra en la figura 14 para la fase paramagnética para diferentes valores de  $r_s$ . Comenzando de arriba hacia abajo tenemos las curvas para  $r_s = 80, 60, 40, 30$  y  $20$ . La extrapolación confirma la existencia de un mínimo en la fase paramagnética en la región  $38 < r_s < 48$ . La energía extrapolada

es muy cercana a  $-0.25$  Ry en el mínimo. Para la fase ferromagnética se obtiene un resultado equivalente en la región  $54 < r_s < 68$ .

En la figura 15 se muestran las energías por partícula de los estados paramagnético (trazo interrumpido) y ferromagnético (trazo continuo) para la simetría cuadrada. La curva de trazo interrumpido más corto representa la energía paramagnética extrapolada y la curva de trazo más largo es la energía paramagnética obtenida con  $N = 28$ . Las dos curvas se separan para  $r_s \geq 44$ . La curva continua de trazo menos grueso representa la energía de la fase ferromagnética extrapolada. Esta curva se separa de la curva de la energía ferromagnética con  $N = 28$  a  $r_s \geq 65$ . En la figura se puede observar que en la fase ferromagnética la región de presión 0 se extiende hasta  $r_s \approx 61$ . La extrapolación nos muestra que a muy bajas densidades el estado base es un cristal de Wigner en la fase ferromagnética.

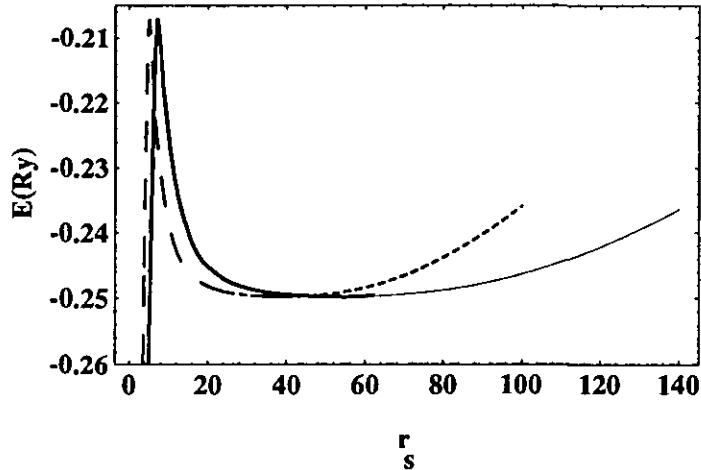


Fig. 15. La energía por partícula del estado base del sistema con simetría cuadrada. Las curvas continuas corresponden a la fase ferromagnética y las curvas de trazo interrumpido a la fase paramagnética. Las curvas de trazo suave y de trazo corto corresponden a las curvas extrapoladas de las fases ferromagnética y paramagnética respectivamente.

A partir de la ecuación de estado  $E(r_s)$  calculamos el orden de la transición de la fase fluida a la fase localizada y la compresibilidad del sistema. El orden de la transición se determina a partir del comportamiento de la curva de energía por partícula en el punto de transición y del comportamiento en este punto de la primera y la segunda derivada de la energía. En las figuras 16a y 16b se muestran la primera y la segunda derivada de la energía.

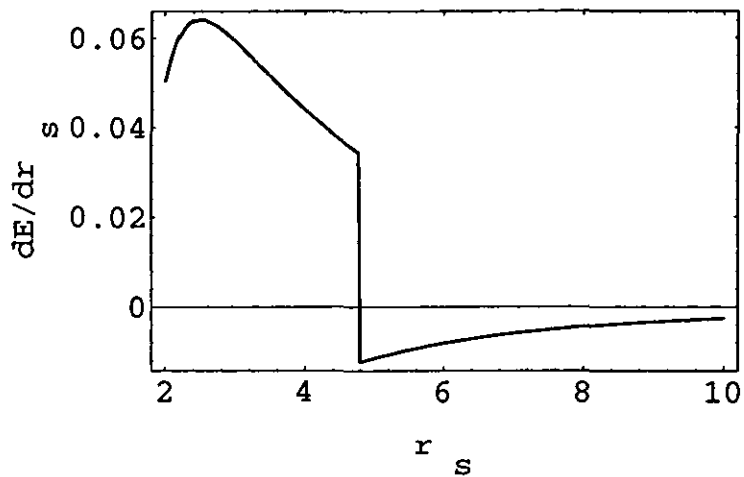


Fig. 16a. Primera derivada de la energía.

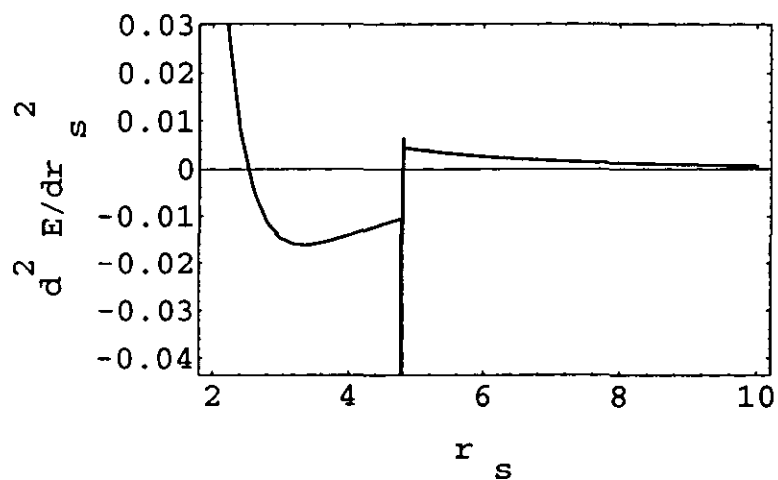


Fig. 16b. Segunda derivada de la energía.

El criterio termodinámico para determinar el orden de las transiciones está basado en el comportamiento de la energía libre de Gibbs con respecto a la temperatura. En nuestro caso podemos utilizar un criterio semejante para determinar el orden de la transición de simetría, estudiando la variación de la energía con respecto del parámetro de densidad  $r_s$ .

Como se ha podido observar en las curvas de la energía, en el punto de transición de simetría ( $r_{sc} = 4.8$  para la red cuadrada) la energía por partícula tiene el mismo valor en la fase fluida y en la fase localizada. En el punto de transición la primera derivada presenta un cambio discontinuo finito, como en las transiciones de primer orden, de acuerdo a la clasificación de Eherenfest [45]. El comportamiento de las curvas de la simetría hexagonal es análogo. Nuestro resultado contradice a la referencia [30], en el sentido de que en ese trabajo se supone que la transición a la fase corrugada en el *GE2D* es de segundo orden.

En la literatura se han reportado valores negativos para la compresibilidad del gas de electrones en el *MJU*, por este hecho se ha asociado la jalea uniforme a un reservoir de presión positiva. No obstante también se han reportado valores positivos de la compresibilidad a densidades metálicas en un sistema en *3D* con el modelo de la jalea estabilizada [42], en el cual se considera la repulsión electrostática entre las cargas de la jalea y la interacción entre los electrones y un seudopotencial que estabiliza la jalea. En este trabajo calculamos la compresibilidad de la jalea deformable con la ecuación (40) a partir de la ecuación de estado paramagnética  $E(r_s)$  del sistema con simetría cuadrada.

La compresibilidad inversa en función de  $r_s$  se muestra en la figura 17. En la figura podemos observar que la compresibilidad es negativa para  $2.2 < r_s < 4.8$ . Este es el resultado correspondiente a la solución de ondas planas, que como vimos es la

solución autoconsistente en el *MJD* en esta región de densidades. La anomalía en la compresibilidad es corregida en el modelo de jalea deformable después del punto de transición. Este resultado contrasta con la compresibilidad obtenida en el *MJU* la cual es negativa para  $r_s > 2.03$  [29].

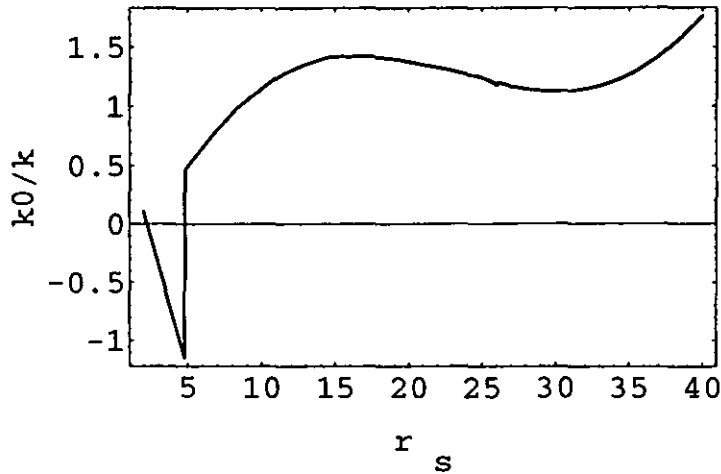


Fig. 17. La compresibilidad  $\kappa_0/\kappa$  en el *MJD* como función de  $r_s$ . La anomalía de la compresibilidad en el *MJU* es rectificada para  $r_s > 4.8$  i.e. después del punto de transición.

## 6 Comparación del modelo con resultados experimentales

Una característica notable que tiene el estudio de los sistemas de electrones en dos dimensiones es que en los laboratorios ha sido posible la construcción de estos sistemas tanto en el régimen clásico como en el régimen cuántico. Esta condición brinda la posibilidad de contrastar los resultados de los modelos teóricos con los resultados experimentales. Con el propósito de comparar los resultados teóricos con los datos experimentales presentaremos en dos tablas separadas datos experimentales disponibles

y los cálculos teóricos de las densidades críticas a las que se presenta la transición de Wigner. En la la tabla VI se muestran los distintos sistemas experimentales en los que se ha detectado un cristal de electrones a campo magnético cero. La densidad del gas de electrones y la temperatura a la cual se trabaja con el sistema determinan el comportamiento clásico o cuántico. En la segunda columna se muestra el intervalo de densidad o la densidad promedio con la que se trabaja el sistema en el laboratorio. En la última columna están las referencias de donde fueron tomados los datos. Las densidades están dadas en partículas por  $cm^{-2}$ .

sistema	densidad	transición	T K	régimen	ref.
helio	$10^5 - 10^9$	$3 \times 10^8$	.35 - .65	clásico	[7]
helio- $SiO_2$	$10^{11}$	$.13 \times 10^{11}$	1.2	cuántico	[17]
silicio	$3 \times 10^{11}$	$\approx 10^{11}$	.05	cuántico	[46]
<i>silicio</i> - 2	$1 \times 10^{11}$	$1 \times 10^{11}$	.025 - .05	cuántico	[25]
<i>silicio</i> - 5	$1 \times 10^{11}$	$.8 \times 10^{11}$	.025 - .05	cuántico	[25]

Tabla VI. Sistemas experimentales en los que se ha reportado un cristal de electrones a campo magnético cero.

La comparación de la jalea deformable con el experimento no es directa ya que en las situaciones reales descritas en el capítulo I y los sistemas descritos en la tabla VI, la carga electrónica está separada espacialmente del fondo. En el gas de electrones que se forma en la interfase de un semiconductor y un aislante, la carga que neutraliza el sistema permanece en el semiconductor en forma de huecos; por otro lado la carga que neutraliza a los electrones sobre la superficie del helio líquido está depositada en una placa metálica que se encuentra sumergida en el helio, mientras que en nuestro



modelo el gas de electrones está inmerso en el fondo de carga positiva; sin embargo uno puede esperar que en los sistemas reales el fondo neutralizante sobre el cual la carga electrónica está colocada reaccione al comportamiento de la densidad de carga [9]. En todo caso la jalea deformable podría simular este comportamiento más adecuadamente que el modelo de jalea uniforme.

Para comparar el punto de transición con los resultados experimentales obtenidos a campo magnético cero en un *MOSFET* de silicio, es necesario llevar nuestro modelo más allá de la aproximación Hartree Fock. La corrección consiste en reescalar la energía y el radio de Bohr en términos de la masa efectiva del electrón y la constante dieléctrica para este material. Este escalamiento es  $E_B^* = (\frac{m^*}{\epsilon m})E_B$  con  $E_B = \frac{e^2}{2a_0}$  y  $a_0^* = (\frac{\epsilon m}{m^*})a_0$  donde  $a_0 = \frac{\hbar^2}{m e^2}$ . Usando estas ecuaciones relacionamos los resultados obtenidos en este trabajo para la transición de la fase homogénea ferromagnética a la fase paramagnética localizada con los datos experimentales para las muestras más puras de silicio. Tomando los valores conocidos para el silicio de  $m^* = 0.2m$  y  $\epsilon = 7.8$  podemos calcular la densidad de transición de la fase fluida a la fase localizada con un parámetro de red  $a = 2.56r_{sc}a_0^*$  para la simetría hexagonal y  $a = 2.23r_{sc}a_0^*$  para la simetría cuadrada.

En la tabla VII mostramos las densidades de transición para el *GE2D* en número de partículas por  $cm^2$  obtenidas con diferentes modelos. Las predicciones de  $r_{sc}$  fueron realizadas en el *MJU* con cálculos Monte-Carlo variacional y funcionales de la densidad (*FD*); cálculos variacionales con funciones de Wannier y en este trabajo con el *MJD*. Los tipos de redes considerados son: hexagonal y cuadrada. Las densidades de transición fueron calculadas haciendo el escalamiento con la masa efectiva y la constante dieléctrica del silicio.

simetría	Monte-Carlo	$FD$	Wannier	$HF - MJD$
hexagonal	$5.5 \times 10^9$	$7.3 \times 10^9$		$1.9 \times 10^{11}$
cuadrada			$1.1 \times 10^{11}$	$1.4 \times 10^{11}$
Referencia	[29]	[31]	[35]	[9]

Tabla VII. Densidad a la que se presenta la transición a la fase localizada, obtenidas con el  $MJU$  y el  $MJD$  para las redes cuadrada y hexagonal. Todas las densidades se dan en número de partículas por  $cm^2$ .

Como puede observarse en las tablas VI y VII, las densidades de transición calculadas con el modelo de jalea deformable están dentro del orden de magnitud de los resultados experimentales del  $GE2D$  en un  $MOSFET$  de silicio  $n = 8 \times 10^{10} cm^{-2}$  para las muestras más ordenadas de  $Si - 5$  y  $n \approx 10^{11} cm^{-2}$  para el  $Si - 2$  [25]. Este es un excelente resultado para el modelo de jalea deformable. Nótese que las densidades de transición experimentales son menores que las densidades de transición calculadas en este trabajo ( $1.9 \times 10^{11}$  para la red hexagonal y  $1.4 \times 10^{11}$  para la red cuadrada a  $T = 0$ ), lo cual es consistente con el diagrama de fases de Peeters y Platzman [18] mostrado en la figura 2 del capítulo I, donde se puede apreciar que la cristalización de Wigner a  $T = 0$  ocurre a una densidad mayor que la cristalización a  $T \neq 0$ .

## Conclusiones

Hemos visto que al considerar en el *MJD* la respuesta del fondo a los cambios de la densidad electrónica, este modelo introduce efectos de correlación estática producidos por la deformación de la jalea que permiten corregir resultados anómalos atribuibles al *MJU*. En relación con otros métodos que utilizan Hamiltonianos diferentes o funciones de estado distintas en cada una de las fases del sistema, el método que hemos utilizado tiene la virtud de describir de una manera unificada el sistema en una extensa región de densidades, con la ventaja adicional de que en el desarrollo de la función de estado es posible describir cualquier tipo de simetría de una red en  $2D$ . Por otro lado con nuestros cálculos podemos establecer el número mínimo de sitios de la red que es necesario considerar para determinar las propiedades del sistema a una  $r_s$ , dada independientemente del número de términos en el desarrollo de la función de estado.

La transición del estado homogéneo al estado localizado se presenta de una manera muy natural en el cálculo autoconsistente. En la curva de energía por partícula como función de la densidad este cambio se manifiesta con una discontinuidad en la primera derivada en el punto de transición, que de acuerdo a la clasificación de Ehrenfest caracteriza a las transiciones de primer orden. En las superficies de la densidad de carga la transición se presenta como una corrugación que inicia suavemente en el punto de transición, localizándose a bajas densidades como en un cristal tipo Wigner. De la comparación de las energías por partícula para las simetrías cuadrada y hexagonal podemos concluir que la simetría del estado base del gas de electrones después del punto de transición es hexagonal. En nuestro cálculo las energías por partícula de las fases paramagnética y ferromagnética están claramente diferenciadas, por lo que observamos la existencia de varias transiciones magnéticas, a diferencia del resultado

obtenido con el *MJU*, en el que no es posible distinguir transiciones magnéticas en el *GE2D*.

La inclusión de parámetros característicos de sistemas reales en nuestro modelo, nos permite comparar con resultados experimentales. Con esta modificación obtuvimos un valor para la densidad de transición que compite favorablemente con los resultados obtenidos con otros modelos y está dentro del mismo orden de magnitud que las densidades de transición experimentales. Este resultado apoya la idea original de Wigner de que es la competencia entre la energía cinética y la energía potencial la que determina la cristalización del gas de electrones. En un cálculo futuro se podrían determinar los efectos de las correlaciones y la temperatura en las propiedades del sistema, siguiendo la misma técnica empleada en este trabajo.

## **Agradecimientos**

Se agradece el apoyo brindado por el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología, proyectos números 5-4330*PE* and 3097*P-E*. Todos los cálculos se realizaron en una Power Challenge de la Facultad de Ciencias, Galileo del Instituto de Física y la Berenice de 8 procesadores de la Dirección General de Servicios de Cómputo Académico, por lo que también se agradece el apoyo del Instituto de Física y de la Dirección General de Servicios de Cómputo Académico de la UNAM.

obtenido con el *MJU*, en el que no es posible distinguir transiciones magnéticas en el *GE2D*.

La inclusión de parámetros característicos de sistemas reales en nuestro modelo, nos permite comparar con resultados experimentales. Con esta modificación obtuvimos un valor para la densidad de transición que compite favorablemente con los resultados obtenidos con otros modelos y está dentro del mismo orden de magnitud que las densidades de transición experimentales. Este resultado apoya la idea original de Wigner de que es la competencia entre la energía cinética y la energía potencial la que determina la cristalización del gas de electrones. En un cálculo futuro se podrían determinar los efectos de las correlaciones y la temperatura en las propiedades del sistema, siguiendo la misma técnica empleada en este trabajo.

## **Agradecimientos**

Se agradece el apoyo brindado por el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología, proyectos números 5-4330*PE* and 3097*P-E*. Todos los cálculos se realizaron en una Power Challenge de la Facultad de Ciencias, Galileo del Instituto de Física y la Berenice de 8 procesadores de la Dirección General de Servicios de Cómputo Académico, por lo que también se agradece el apoyo del Instituto de Física y de la Dirección General de Servicios de Cómputo Académico de la UNAM.

## References

- [1] E. Wigner, *Trans. Far. Soc.* **34**, 678 (1938).
- [2] R. S. Crandall and G. Adams. *Phys. Lett.* **34A**, 404 (1971).
- [3] E. Y. Andrei, G. Deville, D. C. Glattli, and F. I. B. Williams, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 2765 (1988).
- [4] V. M. Pudalov, M. D'Iorio and J. W. Campbell, *Physica B* **194 - 196**, 1289 (1994); M. D'Iorio, V. M. Pudalov, S. V. Kravchenko and J. W. Campbell, *Surf. Sci.* **305**, 115 (1994); M. D'Iorio, V. M. Pudalov and S. G. Semenchinsky, *Phys. Lett.* **150A**, 422 (1990).
- [5] P. Pieranski, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 900 (1983).
- [6] D. H. Van Winkle and C. A. Murray, *Phys. Rev. A* **34**, 562 (1986).
- [7] C. C. Grimes and G. Adams, *Phys. Rev. Lett.* **12**, 795 (1979).
- [8] A. Khurana, *Phys. Today*, **24**, 17 (1990).
- [9] M. Moreno, R. M. Méndez-Moreno and S. Orozco, *J. Phys.: Condens. Matter* **10**, 821 (1998).
- [10] S. Orozco, R. M. Méndez-Moreno and M. Moreno *J. of Molecular Structure Theochem*, Proceedings of the International Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression, **24 th** International Congress, (1998).
- [11] S. Ichimaru, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 1017 (1982).
- [12] T. Ando, A. B. Fowler and F. Stern, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 437 (1982).

- [13] D. C. Glattli, G. Deville, V. Duburco, et al, *Surf. Sci.* **229**, 344 (1990).
- [14] X. L. Hu and A. J. Dahm, *Phys. Rev. B* **42**, 2010 (1990).
- [15] M. W. Cole and M. H. Cohen, *Phys. Rev. Lett.* **23**, 1238 (1969).
- [16] R. S. Crandall and R. Williams, *Phys. Rev. A* **5**, 2183 (1972).
- [17] T. Gunzler, B. Bitnar, G. Mistura, S. Nesper, P. Leider, *Surf. Sci.* **361 - 362**, 831 (1996).
- [18] F. M. Peeters and P. M. Platzman, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 2021 (1983).
- [19] K. V. Klitzing, G. Dorda and M. Pepper, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 494 (1980).
- [20] D. C. Tsui, H. L. Stormer and A. C. Gossard, *Phys. Rev. Lett.* **48**, 1559 (1982).
- [21] N. G. Einspruch and W. R. Frensley, *Heterostructures and Quantum Devices*, Academic Press, 1994.
- [22] A. B. Fowler, F. F. Fang, W. E. Howard, and P. J. Stiles, *Phys. Rev. Lett.* **32**, 901(1966).
- [23] V. M. Pudalov, *Sov. Phys. Usp.* **34**, 542 (1991).
- [24] S. T. Chui and K. Esfarjani, *Phys. Rev. B* **44**, 11498 (1991); R. Price, P. M. Platzman, S. He and X. Zhu, *Surf. Sci.* **305**, 126 (1994).
- [25] V. M. Pudalov, M. D'Iorio, S. V. Kravchenko and J. W. Campbell, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1866 (1993).
- [26] J. E. Furneaux, S. V. Kravchenko, W. Mason, V. M. Pudalov and M. D. Iorio, *Surf. Sci.* **361 - 362**, 949 (1996).

- [27] Hock-Kee Sim, R. Tao and F. Y. Wu, *Phys. Rev.* **B34** 7123 (1986).
- [28] D. Ceperley, *Phys. Rev. B* **18**, 3126 (1978).
- [29] B. Tanatar and D. M. Ceperley, *Phys. Rev.* **B39** 5005 (1989).
- [30] L. M. Sander, H. Rose, and H. B. Shore, *Phys. Rev. B* **21**, 2739 (1980).
- [31] Niharendu Choudhury and Swapan K. Ghosh, *Phys. Rev.* **B51** 2588 (1995).
- [32] In-Keun Oh, J. Mahanty and M. P. Das, *J. Phys.:Condens. Matter.* **6**, 4897 (1994).
- [33] R. M. Méndez-Moreno, M. A. Ortíz and M. Moreno, *Phys. Rev. A* **40**, 2211 (1989).
- [34] R. M. Méndez-Moreno, M. Moreno and M. A. Ortíz , *Phys. Rev. A* **44**, 2370 (1991).
- [35] K. Iyakutty and R. Rajeswara Palanichamy, *Int. J. of Quantun Chem.* **51**, 329 (1994).
- [36] L. Bonsall and A. A. Maradudin , *Phys. Rev. B* **15**, 1959 (1977).
- [37] A. W. Overhauser, *Phys. Rev.* **167**, 691 (1968).
- [38] A.L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* McGraw-Hill, New York, 1971; G. Senatore and N.H. March, *Rev. Mod. Phys.* **66** 445 (1994).
- [39] R. Barrera, M. Grether, M. de Llano, S. Peltier and A. Plastino, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **12**, L715 (1979).
- [40] A. F. Baranov, L. A. Maksimov and A. V. Mikheyenkov, *Phys. Lett. A* **201**, 81 (1995); S. T.Chui and B. Tanatar, *Phys. Rev. B* **55**, 9330 (1997).



- [41] M. de Llano, *Mecánica Cuántica*, Facultad de Ciencias 1996.
- [42] J. P. Perdew, H. Q. Tran and E. D. Smith, *Phys. Rev. B* **42**,11627 (1990); Kazimierz F. Wojciechowsky and Henryk Bogdanów, *Phys. Rev. B* **50** 14580 (1994).
- [43] M. A. Ortíz, R. M. Méndez-Moreno, M. Moreno and S. Orozco, *Phys. Rev. B* **54**, 1423 (1996).
- [44] S. Wolfram, *Mathematica* 2nd edn. Addidon-Wesley 1991.
- [45] R. Gilmore, *Catastrophe Theory for Scientists and Engineers* John Wiley & Sons, New York, 1981.
- [46] S. V. Kravchenko, J. A. A. J. Perenboom and V. M. Pudalov, *Surf. Sci.***263**, 55 (1992).