

muchos procesos químicos consolidados como de alta eficiencia son totalmente antieconómicos.

La reciente creación del instituto virtual "Green Chemistry Institute" <http://www.lanl.gov/Internal/pro->

jects/green, para promocionar Química amiga del medio ambiente, al que es posible adscribirse a través de internet a la siguiente dirección: BREENJ1@westat.com, pretende agrupar el espíritu de colaboración

entre industriales, organismos públicos y académicos en ese sentido.

Rosa M.^a Claramunt Vallespí y

Dionisia Sanz del Castillo

Depto. de Química Orgánica y Biología

SEMBLANZAS DE LOS PREMIOS NOBEL, PRÍNCIPE DE ASTURIAS Y MEDALLAS FIELDS DE 1998

Efecto Hall cuántico fraccionario: un nuevo líquido cuántico

PREMIO NOBEL DE FÍSICA DE 1998

Los físicos norteamericanos ROBERT B. LAUGHLIN y DANIEL C. TSUI y el físico alemán HORST L. STÖRMER, han obtenido el Premio Nobel de Física 1998 por el descubrimiento de una nueva forma de líquido cuántico, cuyas excitaciones poseen carga eléctrica fraccionaria. Este líquido cuántico se obtiene al confinar un gas de electrones en los planos formados por las intercaras de ciertos materiales semiconducto-

res, a los que se somete a intensos campos magnéticos perpendiculares a dichos planos.

Los profesores STÖRMER Y TSUI encontraron, en 1982, la primera manifestación macroscópica de este nuevo estado de la materia al observar un *efecto Hall cuántico fraccionario*, denominado así en contraposición al *efecto Hall cuántico entero*, descubierto en 1980 por Klaus von Klitzing, y por el que obtuvo el premio Nobel de Física en 1985.

La explicación teórica del efecto Hall cuántico fraccionario no tardaría en llegar. En 1983 el Prof. Laughlin propuso una función de onda variacional para los estados de un gas bidimensional de electrones sometido a un campo magnético. El

nuevo estado cuántico correspondería al de un fluido cuyas excitaciones, cuasielectrones y cuasiagujeros, poseerían carga eléctrica fraccionaria. La comprobación experimental de la fragmentación de la carga eléctrica en este efecto ha sido realizada por diferentes grupos de investigación a lo largo de los últimos años y ha supuesto la confirmación definitiva del modelo de Laughlin.

EL EFECTO HALL CUÁNTICO

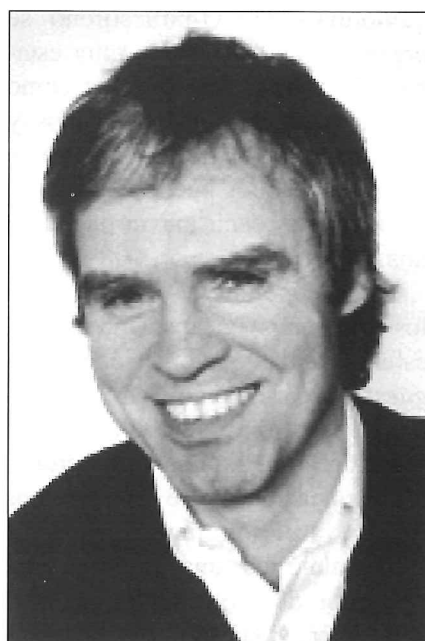
Se puede construir un sistema de electrones aproximadamente bidimensional confinándolos en la intercara entre dos semiconductores. Un sistema de este tipo es el fabricado a



Robert B. Laughlin.



Daniel C. Tsui.



Horst L. Störmer.

partir de los semiconductores arseniuro de galio (AsGa) y arseniuro de galio aluminio (AsGaAl), que crecen formando capas. El exceso de electrones provenientes de las impurezas queda confinado en la intercara debido a la diferente composición química de cada semiconductor y al acoplamiento con las vibraciones de la red. A medida que nos acercamos al cero absoluto, el efecto de las vibraciones térmicas se debilita y los electrones se mueven cada vez con mayor libertad en la intercara. La medida de sus propiedades eléctricas de transporte ha permitido conocer las características del efecto Hall cuántico.

En la Figura 1 se indica esquemáticamente el experimento sobre una de estas capas bidimensionales de electrones: se hace pasar una pequeña corriente eléctrica a lo largo del eje X de la muestra y se mide la diferencia de potencial que aparece en la dirección del eje Y cuando se aplica un campo magnético según el eje Z. La acción combinada de los campos eléctrico y magnético (fuerza de Lorentz) hace que se produzca un exceso de cargas negativas (electrones) sobre la parte positiva del eje Y, y positivas (huecos) sobre la parte negativa de dicho eje. Esto hace que aparezca una diferencia de potencial V_H , denominada voltaje de Hall en honor al físico que la descubrió hace más de ciento veinte años.

Es decir, existe una diferencia de potencial V a lo largo del eje X de la muestra, responsable de la intensidad de corriente i , y otra V_H en la dirección del eje Y, responsable de la corriente i_H . Esto da lugar a dos tipos de resistencia eléctrica: la resistencia longitudinal R , que tiene el mismo significado que la resistencia eléctrica ordinaria, y que es una medida de la frecuencia de las colisiones que sufren los electrones dentro del material, y la resistencia Hall R_H , que tiene un significado diferente. Es nula cuando lo es el campo magnético, B , aplicado, y va aumentando a medida que el campo crece y se acumulan más y más acargas en los laterales de la muestra. Este proceso continúa hasta que el campo eléctrico que resulta de la separación de los portadores compensa la fuerza magnética. Un análisis clásico proporciona la siguiente expresión para R_H :

$$R_H = \frac{B}{Ne} \quad (1)$$

donde N el número de portadores por unidad de área en el plano de la muestra y e la carga del electrón. Estudiando el efecto Hall se puede conocer el valor N de la concentración de portadores. Hasta hace diez años este resultado se consideraba válido para cualquier valor del campo magnético y de la temperatura.

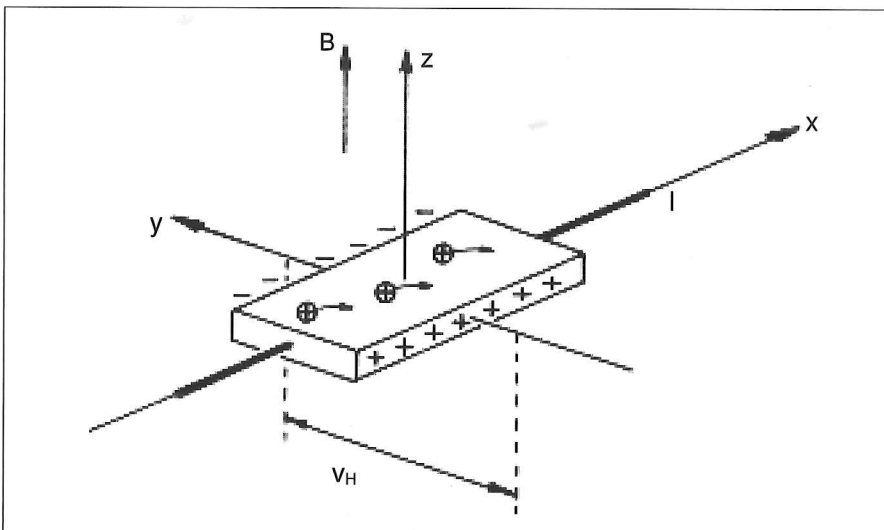


Figura 1. Una diferencia de potencial v produce una corriente i según la dirección x . Un campo magnético aplicado en la dirección z desvía las cargas en la dirección del eje y , dando lugar a un potencial v_H .

Las Figuras 2 y 3 presentan los resultados de las medidas de la resistencia Hall en función del campo magnético aplicado. La Figura 2 corresponde a los resultados hallados por Klaus von Klitzing y son la base del efecto Hall cuántico entero. La Figura 3 muestra los resultados hallados por Horst L. Störmer y Daniel C. Tsui y son la base del efecto Hall cuántico Fraccionario. La línea diagonal en la Figura 3 representa el resultado esperado según la teoría clásica. La línea continua que presenta mesetas corresponde a los valores de R_H y la línea oscilante, con diversos picos, corresponde a los valores de la resistencia lineal R . Estos resultados son sorprendentes. Así, mientras las oscilaciones de la resistencia longitudinal eran totalmente esperadas, su anulación en grandes intervalos del campo magnético era totalmente inesperada. Quizás aún más sorprendente sea la presencia de las mesetas de la resistencia Hall. El examen detenido de los valores en dichas mesetas muestra que pueden ser descritas mediante la expresión fundamental:

$$R_H = \frac{h/e^2}{p/q} \quad (2)$$

El valor de la resistencia de Hall sólo depende del cociente entre dos constantes fundamentales, la constante de Planck h y la carga del electrón e , dividido por el cociente de dos números enteros. Este resultado conlleva a decir que el valor de R_H es independiente de las propiedades del material utilizado¹. El subconjunto de mesetas para las cuales $p/q = 1, 2, 3, \dots$ son enteros (Fig. 2) fue descubierto por von Klitzing. Posteriormente, Störmer y Tsui encontraron el primer valor fraccionario $p/q = 1/3$. En estos momentos se sabe que ambos casos

¹ El descubrimiento del efecto Hall cuántico entero ha dado lugar a la introducción de una nueva unidad de resistencia eléctrica en el Sistema Internacional, el KLITZING:

$$1 \text{ klitzing} = \frac{h}{4e^2}$$

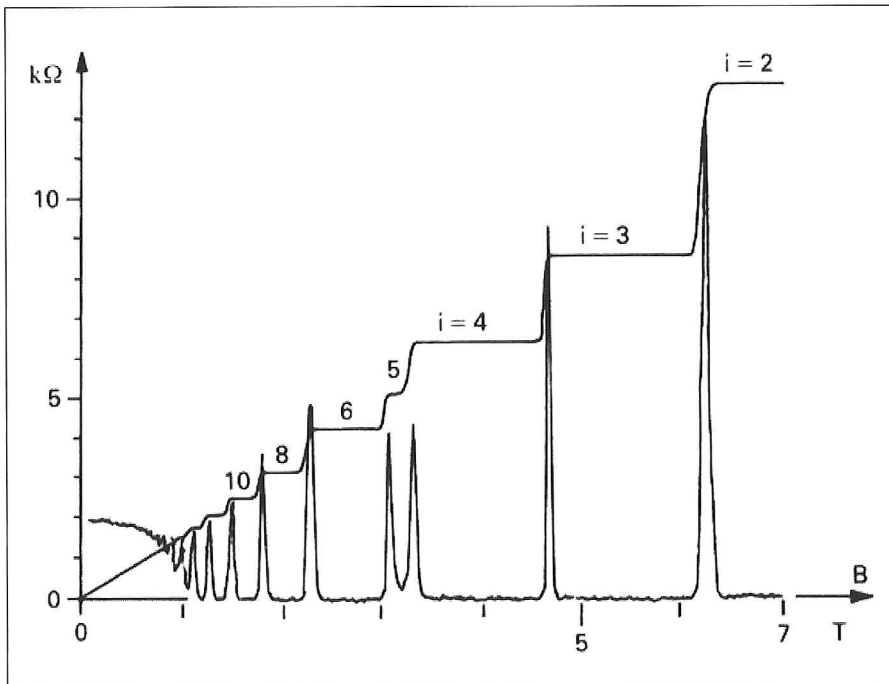


Figura 2. La resistencia Hall varía a saltos cuando cambia el campo magnético B . La curva inferior representa la variación de la resistencia óhmica, que se anula en cada salto.

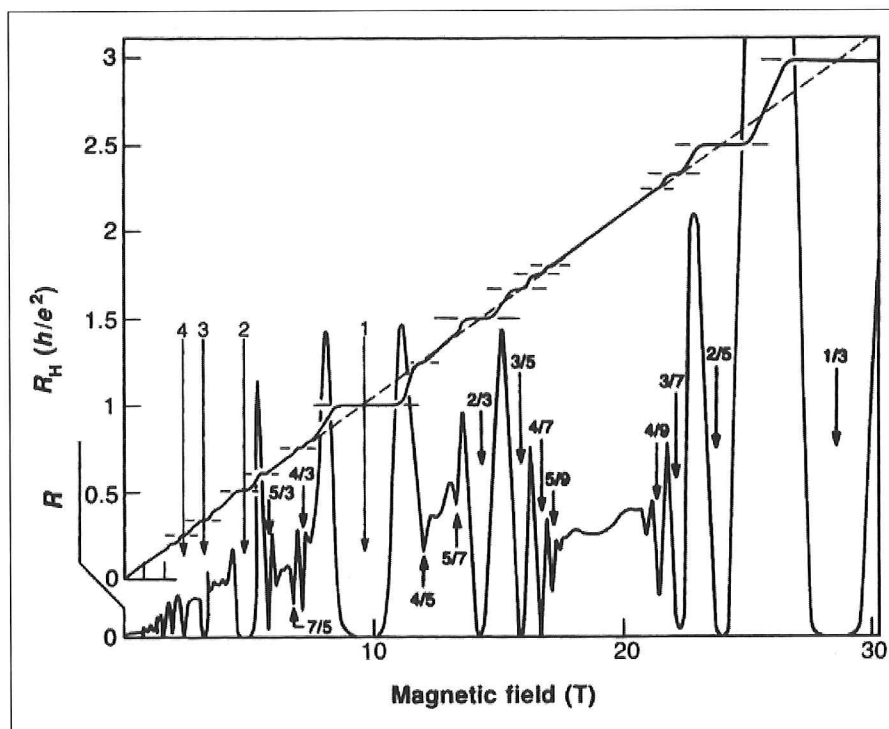


Figura 3. Valores de la resistencia Hall R_H y la resistencia longitudinal R de un gas bidimensional de electrones en función del campo magnético aplicado. La línea diagonal discontinua corresponde a los valores esperados según la teoría clásica. La línea diagonal continua (que varía a saltos), corresponde a los valores experimentales. Cada meseta tiene asociada un valor mínimo de R .

reflejan situaciones físicas muy diferentes. El caso entero puede ser entendido en términos del comportamiento de los electrones individuales en un campo magnético. Sin embargo, los valores fraccionarios

de p/q son mucho más misteriosos, poniendo de manifiesto una nueva física, totalmente distinta que estudiaría el comportamiento colectivo de los electrones. Analicemos por separado ambos casos.

EFEECTO HALL CUÁNTICO ENTERO

El modelo sobre este efecto es conocido desde hace más de 50 años. Se trata de la cuantización de los movimientos de las cargas eléctricas en presencia de un campo magnético. Clásicamente un electrón se mueve describiendo una órbita circular en el plano perpendicular al campo magnético. La mecánica cuántica impone valores cuantizados del radio de las órbitas, al igual que sucede con los valores discretos de las órbitas de Bohr en el caso atómico. Como en el átomo de Bohr, estos valores cuantizados corresponden a niveles discretos de la energía, llamados *niveles de Landau*. Los niveles de Landau están separados por unos gaps de energía proporcionales a la intensidad del campo magnético B , y solo se manifiestan en capas bidimensionales de electrones.

Cada nivel de Landau puede albergar un gran número de electrones por unidad de área de la muestra, todos ellos con la misma energía. Este número, denominado degeneración D de Landau, vale $D = (eh) B$ (es decir, $2,4 \times 10^{11}$ electrones por cm^2 para un campo de 10 T), y aumenta al aumentar la intensidad del campo magnético B^2 . Este resultado es muy importante pues, como vemos, es independiente de las características de la muestra. Dividiendo el número de total electrones N por la degeneración D llegamos a la definición del factor de ocupación de los niveles de Landau $\nu = N/D$. Esta cantidad refleja cuántos niveles están ocupados. Para campos magnéticos muy elevados D se hace mayor que N y todos los electrones ocuparán el nivel de Landau más bajo, siendo $\nu < 1$. Al disminuir la intensidad del campo magnético disminuye el valor del gap de energía entre los niveles de Landau, pero además también dis-

² Lo contrario le sucede al radio de las órbitas, que para $B = 10$ T es del orden de 80 Å.

minuye su degeneración D . Así, cuando el campo magnético alcanza el valor B_1 , el nivel de Landau más bajo se encuentra completamente lleno, es decir, $D = eB_1/h = N$. Cuando el valor del campo magnético sigue disminuyendo y alcanza el valor B_2 , $D = eB_2/h = N/2$, los dos niveles de Landau inferiores se encuentran completamente llenos y el factor de ocupación es $\nu = 2$. En general, cuando el campo magnético alcanza el valor

$$B_j = \frac{Nj}{e} \quad (3)$$

siendo j un número entero

siendo j un número entero, los j niveles de Landau inferiores están ocupados y todos los niveles superiores vacíos. Teniendo en cuenta la ecuación (1) y la definición de D , podemos expresar R_H en función de factor de ocupación:

$$R_H = \frac{B}{Ne} = \left(\frac{h}{e^2}\right) \frac{1}{\nu} \quad (4)$$

Cuando el campo magnético alcanza el valor B_j , el factor de ocupación será igual al valor entero j :

$$R_H = \frac{h}{je^2} \quad (5)$$

Estos son los valores de las mesetas de R_H mostrados en la Figura 2. Se puede entender la anulación de la resistencia R para estos valores del campo magnético, pues la resistencia se anula cuando los electrones no puedan ser dispersados a otros niveles de energía. En el caso de los campos B_j , para alcanzar otros niveles de Landau los electrones deben superar unos elevados gaps de energía. De ahí que a bajas temperaturas no se puedan alcanzar estos niveles y la dispersión de los electrones no pueda tener lugar.

El modelo que hemos expuesto para explicar el efecto Hall cuántico

entero conlleva un fallo importante: sólo es válido para determinados valores del campo magnético. En cambio, como muestran las Figuras 2 y 3, ¿cómo puede R_H permanecer constante para grandes rangos de B ? Esta es una cuestión fundamental para una comprensión completa del fenómeno. La clave se encontró al considerar la influencia de los defectos residuales presentes en el material. Estas imperfecciones capturan algunos electrones de la capa impidiendo su participación en los procesos de conducción. Las variaciones en la intensidad del campo magnético respecto al valor B_j van a hacer variar el número de electrones atrapados pero no el de los niveles de Landau ocupados. Es decir, no cambia ni la resistencia R ni la R_H , que sólo reflejan las corrientes de los electrones que no están atrapados. Campos magnéticos mucho más elevados hacen variar fuertemente la capacidad de las trampas, dando lugar a la variación del número de niveles de Landau ocupados, por lo que varían también los valores de R y de R_H . Así pues, nos enfrentamos al siguiente hecho paradójico: la existencia de las mesetas en la curva de R_H es debida a las imperfecciones presentes en el material, mientras que su valor en dichas mesetas es una constante universal independiente de las características del material. En resumidas cuentas, en muestras perfectas, libres de defectos, no existirían las mesetas y R_H presentaría la línea recta prevista por la teoría clásica.

EFECTO HALL CUÁNTICO FRACCIONARIO

Un par de años después del descubrimiento del efecto Hall cuántico entero, Horst L. Störmer y Daniel C. Tsui, que dirigían un grupo de investigación en los Laboratorios Bell en Murray Hill (New Jersey, USA), estaban estudiando el efecto Hall en muestras

semiconductoras de AsGa de gran pureza. En ellas, los electrones podían moverse grandes distancias sin sufrir colisiones con las impurezas. Estas muestras habían sido realizadas por A.C. Gossard. Este movimiento cuasi libre de los electrones tenía lugar a muy bajas temperaturas, inferiores a 1 K. Además, estaban utilizando campos magnéticos muy elevados que podían llegar hasta los 20 T, es decir, un millón de veces superiores al campo magnético terrestre. En sus experimentos descubrieron para campos magnéticos elevados mesetas de R_H con valores de ocupación fraccionarios. En su primera publicación demostraban la existencia de una meseta con un valor de ocupación $\nu = 1/3$ (Figura 3).

El descubrimiento de este efecto Hall anómalo cogió por sorpresa a la comunidad científica. Ningún modelo o teoría había previsto la existencia de valores fraccionarios para el factor de ocupación de los niveles de Landau, ni las sorprendentes propiedades que descubrieron Störmer y Tsui. Propiedades que, a diferencia del efecto Hall cuántico entero, no podían ser explicadas ignorando la interacción entre los electrones. Además, como señalaban Störmer y Tsui, los argumentos utilizados en dicho modelo no eran aplicables aquí, pues conducirían a admitir la existencia de cuasipartículas con carga fraccionaria, por ejemplo, con carga $e/3$ en el caso $\nu = 1/3$.

El efecto Hall cuántico fraccionario se pone de manifiesto cuando la intensidad del campo magnético es suficientemente elevada. Asociados al campo magnético están los cuantos de flujo ϕ_0 . Éstos son las imágenes cuánticas correspondientes a las líneas de campo que describe la teoría clásica. De la misma forma que una densidad uniforme de carga es el resultado de un conjunto discreto de electrones, un campo magnético uniforme proviene de un conjunto discreto de cuantos de flujo, $\phi_0 = h/e = 4,1 \times 10^{-15} \text{ T m}^2$.

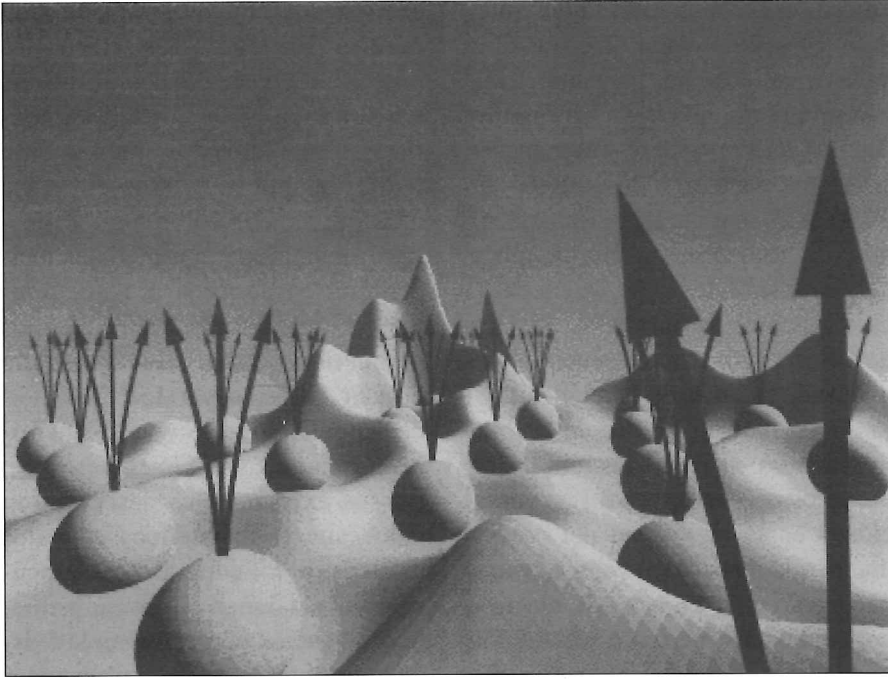


Figura 4. Simulación gráfica de onda de Laughlin para el caso $\nu=113$, realizada por T. Duff. Las esferas representan electrones atrapados momentáneamente en un plano bidimensional. Las flechas, cuantos de flujo magnético que rodean a los electrones. Las colinas representan la distribución de carga de un electrón que se mueve en presencia de un campo magnético aplicado y el potencial debido a los otros electrones.

Esta magnitud es bastante pequeña. El campo magnético terrestre, de $0,3 \times 10^{-4}$ T, equivale, aproximadamente, a 10^6 cuantos de flujo por cm^2 . La observación del efecto Hall cuántico fraccionario requiere aplicar sobre la muestra densidades de flujo magnético muy elevadas.

El modelo capaz de describir este fenómeno debería considerar la repulsión coulombiana entre los electrones, su interacción con los iones de la red cristalina y con los cuantos del flujo magnético. Desde el punto de vista teórico el problema consiste en la resolución del Hamiltoniano de interacción:

$$H = \sum_{j=1}^{N_e} \frac{1}{2\mu} \left(\mathbf{p}_j - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + V(r_j) + \sum_{j < k} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|} \quad (6)$$

donde $V(r_j)$, es el potencial generado por el resto de los iones de la red. La resolución exacta de los niveles de energía del Hamiltoniano (6) estaba en 1982, y sigue estándolo en la actualidad, fuera del alcance de los ordenadores más potentes, salvo para el caso de unos pocos electro-

nes. El profesor Laughlin propuso una explicación teórica genial y completamente inesperada. Mostró que los electrones se condensan en un nuevo tipo de fluido cuántico, y proporcionó de forma explícita la función de onda multielectrónica que describe el estado fundamental de este líquido cuántico de electrones en interacción:

$$\Psi_m(z_1, z_2, \dots, z_{N_e}) = \prod_{l \leq j < k \leq N_e} (z_j - z_k)^m \exp\left(-\frac{1}{4}|z_l|^2\right) \quad (7)$$

donde la posición del j -ésimo electrón se describe mediante el número complejo $z_j = (x_j + iy_j)$, siendo (x_j, y_j) las coordenadas cartesianas. El único parámetro variacional que figura en (7) es el entero m . Laughlin demostró que m es un entero impar e igual al inverso del factor de ocupación $1/\nu$; el estado fundamental hallado por Störmer y Tsui corresponde a $m = 3$.

Laughlin llegó a estos resultados partiendo de principios generales tales como la antisimetría de la función de onda por el carácter fer-

miónico de los electrones. Al mismo tiempo, tomando la norma de la función de onda (7) estableció una atractiva analogía entre el efecto Hall cuántico fraccionario y un plasma clásico de electrones de carga m , que se repelen con un potencial logarítmico y que están inmersos en un fondo de carga positiva. La energía potencial del plasma se minimiza y es estable cuando $m = 1/\nu$. Por otra parte, numerosos estudios utilizando el método de Monte Carlo han demostrado que el estado fundamental del plasma es un líquido para $m < 70$ y un sólido cristalino para $m > 70$. En este último caso se obtiene un cristal donde las cargas están congeladas en los vértices de una red triangular. Esto explica la calificación de "líquido" del estado de Laughlin para valores bajos de m .

Bertrand Halperin ha elaborado una sugerente interpretación de la función de onda de Laughlin que permite entender las excepcionales propiedades de las excitaciones del efecto Hall cuántico fraccionario. Así, la densidad de ceros de la función de onda multielectrónica (7) debe ser igual a la densidad de cuantos elementales de flujo magnético en el campo magnético exterior. Un cuanto de flujo ϕ_0 es la mínima cantidad de flujo magnético transportada por un vórtice. Un campo B que atraviesa una superficie de área A está formado, a nivel microscópico, por un número $N_\phi = BA/\phi$ de estos vórtices. A la luz de estas consideraciones, es posible identificar la degeneración de los niveles de Landau con la densidad de vórtices ($D = N_\phi$). Por lo tanto, el factor de ocupación será:

$$\nu = \frac{N_e}{N_\phi} = \frac{\text{Número de electrones}}{\text{Número de vórtices}} \quad (8)$$

Se puede demostrar que para $\nu = 1/m$ se forma un estado ligado de un electrón y m vórtices, que se comporta de forma colectiva como

un bosón. En la Figura 4 mostramos una simulación por ordenador, realizada por Tom Duff, de la función de Laughlin para el caso $\nu = 1/3$, en el cual cada electrón está ligado a 3 vórtices.

Las excitaciones del estado de Laughlin se pueden ver como la creación de vórtices extra en ese condensado. Si extraemos un electrón del mismo, los m vórtices que estaban ligados a él se desligan entre sí, vagando por el material en forma de cuasiagujeros de carga efectiva $-e/m$. Similarmente, si se añade un electrón al líquido, éste se rompe en m cuasipartículas de carga e/m . La fragmentación de la carga ha sido observada experimentalmente por V. Goldman, B. Shu, M. Heiblum, G. Glatti y otros.

REFERENCIAS

- [1] K. von Klitzing, G. Dorda and M. Pepper, *Phy. Rev. Lett.* **45**, 494 (1980).
- [2] D. C. Tsui, H. L. Stormer and A. C. Gossard, *Phys. Rev. Letters* **48**, 1559 (1982).
- [3] R. B. Laughlin, *Phys. Rev. Letters*, **50**, 1395 (1983).
- [4] J. P. Eisenstein and H. L. Stormer, *Science* **248**, 1510 (1990).
- [5] A. H. MacDonald, *Science*, pp. 977-987 (1995).

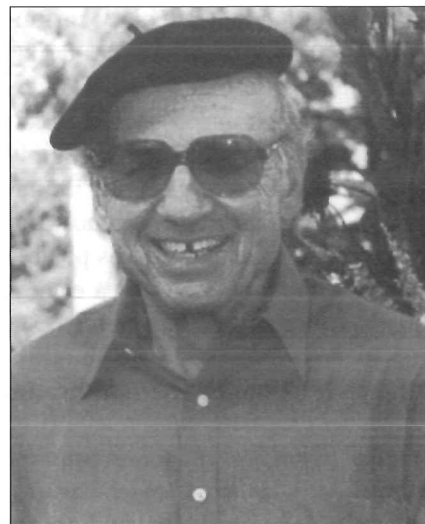
Miguel Giménez Murria
Depto. de Física de los Materiales

Premios Nobel de Química 1998

La Real Academia de Ciencias Sueca ha elegido a JOHN POPLÉ y WALTER KOHN como Premios Nobel de Química de 1998. Kohn, Profesor de Física en la University of California (Santa Bárbara), ha sido elegido por su "desarrollo de la teoría del funcional de la densidad", mientras que a Pople, Profesor de Química en la Northwestern University, se le cita por haber "desarrollado enteramente los métodos



John Pople.



Walter Kohn.

químico-cuánticos en uso en varias ramas de la química". Aunque ambos han contribuido separadamente, la Academia considera que Kohn y Pople son "dos de las figuras más prominentes ... en el enorme desarrollo teórico y computacional" que ha revolucionado la química (y no solamente la química cuántica) en los últimos años. Actualmente es posible utilizar los cálculos mediante computador para suplementar las técnicas experimentales, siendo posible hacer análisis detallados de la estructura y de las propiedades de la materia. La química cuántica se utiliza hoy en día en prácticamente todas las ramas de la química, contribuyendo muy eficazmente a aumentar nuestro conocimiento y a desarrollar nuevos campos de investigación, tales como el diseño de nuevos medicamentos o la síntesis de sustancias químicas. Este Premio reconoce así el valor predictivo de la denominada Química Cuántica, síntesis de disciplinas como la Química-Física, la Matemática y la Computación.

Los dos premiados han seguido una carrera científica muy distinta, aunque con un interés común en los sistemas de muchos electrones. Kohn, un físico teórico, se ha centrado en sistemas de física de la materia condensada. De hecho, los físicos del área han utilizado extensamente su *teoría del funcional de la densidad* para estudiar las estructuras electrónicas desde que fue for-

mulada a mediados de los años 60. Y más recientemente, la comunidad de químicos la ha aplicado en el cálculo de la estructura molecular. Y es ahí donde Pople, Doctor en Matemáticas, ha concentrado gran parte de su trabajo: la estructura electrónica de las moléculas. Desde los años 60, Pople y sus colaboradores han creado programas de computador basados en la aproximación Hatree-Fock para el cálculo de moléculas complejas: ese trabajo ha supuesto un esfuerzo de varias décadas de innovación y continua mejora, y en los años 90 han incorporado en su seno las aproximaciones que permite el formalismo del funcional de la densidad. Se calcula que hoy en día la mitad de los cálculos de la estructura electrónica en química se hacen usando dicho formalismo.

LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER

Si bien la aplicación de la mecánica cuántica en física fue prácticamente inmediata, su utilización en química tardó mucho más tiempo. La razón estriba en que no hay manera práctica de simplificar las relaciones matemáticas de la mecánica cuántica para sistemas tan complejos como las moléculas.

El punto de partida de cualquier cálculo de un sistema de N electrones es la ecuación de Schrödinger; en principio con ella podemos eva-