

## Cálculos autoconsistentes con ondas de densidad de carga para gases de fermiones

R.M. Méndez-Moreno\*, S. Orozco, M.A. Ortíz y A. Ramírez\*\*

*Departamento de Física, Facultad de Ciencias,  
Universidad Nacional Autónoma de México,  
Apartado postal 70-542, 04510 México, D.F.*

(Recibido el 23 de marzo de 1988; aceptado el 4 de mayo de 1989)

**Resumen.** Se presenta un cálculo autoconsistente de Hartree-Fock a densidades altas, intermedias y bajas para gases de fermiones en el modelo de jalea deformable. Como potencial entre pares de partículas y con el objeto de cortar el largo alcance de la interacción, se propone un potencial coulombiano apantallado. Los orbitales de partícula independiente doblemente ocupados se desarrollan en términos de una base de funciones coseno, escogida de tal forma que puede presentar densidad de carga periódica a lo largo de un eje. Se calculan algunas propiedades del estado base de los sistemas, tales como la energía por partícula, la densidad de carga y el momento total. Se compara la densidad a la que aparece la cristalización de Wigner con los resultados de otros autores. Se discute también el efecto del potencial apantallado en la conducta de la densidad de estados en el nivel de Fermi.

PACS: 05.30.Fk

### 1. Introducción

En años recientes se han reportado una gran cantidad de cálculos para gases de fermiones en el modelo de jalea, con el fin de describir propiedades de sistemas de muchas partículas, tanto en astrofísica [1] como en física del estado sólido [2]. En el modelo de jalea los fermiones se mueven en un fondo uniforme, con carga de signo contrario, que garantiza la neutralidad del sistema. Una modificación al modelo anterior, conocida como jalea deformable fue introducida por Overhauser [3]. En este modelo el fondo se ha "deformado" acomodándose a la densidad de los fermiones para obtener neutralidad local de carga. En los dos modelos anteriores el fondo no contribuye a la energía cinética en el hamiltoniano del sistema [4].

La aproximación de Hartree-Fock (HF), que toma en cuenta la correlación de espín entre pares de partículas, se ha empleado con éxito en muchas áreas de la física [5,6]. En particular, aplicada a la física del estado sólido, la aproximación de HF sirve como un punto de partida adecuado y bien definido para un tratamiento

\*Trabajo apoyado parcialmente por el fondo R. J. Zevada.

\*\*Trabajo apoyado parcialmente por la DGAPA, UNAM. Actualmente en el Departamento de Sistemas Operativos y Teleproceso de la Dirección General de Cómputo Académico, UNAM

perturbativo de sistemas de muchas partículas. Por lo tanto, es interesante tener esquemas eficientes para realizar cálculos HF autoconsistentes en sistemas de muchas partículas, a densidades altas, intermedias y bajas [7]. Como es conocido, la función de onda en la aproximación de HF es el determinante de Slater de los espín orbitales. Frecuentemente se parte de orbitales de onda plana (OP); con el fin de mejorar estos cálculos, se han propuesto para los orbitales funciones tipo Overhauser o combinaciones lineales de exponenciales [4]. Una mejor proposición consiste en desarrollar los orbitales en términos de una base. Esta base puede cortarse donde se obtiene convergencia en el cálculo de alguna propiedad relevante del sistema, como la energía del estado base por partícula [5].

Los cálculos HF para sistemas de muchas partículas con interacción coulombiana tienen un problema inherente. El espectro de energías  $E(\mathbf{k})$  tiene una derivada infinita en el nivel de Fermi. Esto implica que la densidad de estados en el nivel de Fermi se hace cero. Este resultado es un hecho característico del largo alcance del potencial de Coulomb [8]. Por lo tanto, para cortar el alcance del potencial y evitar esta divergencia, es conveniente considerar un apantallamiento efectivo del potencial de interacción. La forma más sencilla de introducir un apantallamiento del largo alcance de la interacción de Coulomb es a través de un factor exponencial [9,10,11].

A densidades bajas, es decir para valores grandes de la distancia entre partículas  $r_0$  medida en radios de Bohr,  $r_s = r_0/a_0$ , Wigner encontró para el gas de electrones que la fase cristalina es la más estable [12]. El hecho de que en estos sistemas haya soluciones localizadas más estables que la de OP (densidad homogénea) es un ejemplo de rompimiento de simetría, en donde la solución más simétrica no es la más estable, siendo una solución que presenta una simetría menor la que da una energía más baja del sistema. Desde el trabajo de Wigner se han realizado gran cantidad de cálculos con el objeto de obtener la densidad de transición al cristal de Wigner. Los resultados obtenidos varían desde  $r_s = 5$  hasta  $r_s = 700$  según el criterio de cristalización y el modelo empleado [13]. Dentro del modelo de jalea deformable la transición al cristal de Wigner se encuentra en forma natural como el valor de la distancia entre partículas  $r_s$ , donde la densidad cambia de homogénea a periódica; es decir, a densidad de partículas descritas por ondas de densidad de carga [14]. Sería interesante encontrar si este resultado se puede extender para gases de fermiones que interaccionan por medio de un potencial coulombiano apantallado. Las ondas de densidad de carga aparecen frecuentemente en la literatura; en particular, las introducidas por Overhauser [3] para describir metales alcalinos, permiten obtener densidad de carga periódica a lo largo de una dirección.

Nuestro propósito en este trabajo es estudiar propiedades del estado base de un gas de fermiones en tres dimensiones, dentro del modelo de jalea deformable. La interacción entre pares de fermiones se considera coulombiana apantallada. Se utiliza la aproximación de HF para describir este sistema a densidades bajas, intermedias y altas. Como parte orbital de la función de estado se escogió un desarrollo en términos de funciones coseno. Este desarrollo tiene la posibilidad de presentar densidad de carga homogénea, así como densidad de carga periódica a lo largo de una dirección, al igual que las ondas de densidad de carga. Se calcula la expresión para el espectro de energías de una partícula  $E(\mathbf{k})$ . A partir de esta ecuación e integrando sobre

$\mathbf{k}$ , se puede evaluar la energía del estado base por partícula como función de  $r_s$ . La densidad de transición al cristal de Wigner se obtiene considerando ésta como el valor de  $r_s$  donde la solución autoconsistente cambia de onda plana a onda de densidad de carga. Los resultados obtenidos para la energía del estado base se comparan con otros reportados en la literatura para gases de fermiones (en particular para gases de electrones), en tres dimensiones, que presentan la misma simetría. También se calcula la densidad de partículas del sistema y se muestran resultados numéricos para distintos valores de  $r_s$ . Se calcula el momento total del sistema para cualquier valor del parámetro de densidad  $r_s$  y se compara con el obtenido por otros autores. El gradiente de  $E(\mathbf{k})$  está relacionado con la densidad de estados en el nivel de Fermi. Se calcula éste y se discute el efecto del apantallamiento de la interacción para remover la divergencia que aparece en el nivel de Fermi.

## 2. El modelo

La condición que define al modelo de jalea deformable es [4]

$$\langle \widehat{V}_D \rangle + \langle \widehat{V}_{pf} \rangle + \langle \widehat{V}_{ff} \rangle = 0,$$

donde  $V_D$  es el término directo de la interacción de los fermiones,  $V_{pf}$  y  $V_{ff}$  son la interacción de los fermiones con el fondo y del fondo con él mismo, respectivamente. Este resultado se obtiene si todos los potenciales en el hamiltoniano tienen la misma dependencia funcional en  $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| = r_{ij}$ . Sin embargo, el resultado es independiente de la forma explícita de los potenciales y de la función de estado, siempre que se satisfaga el teorema de Hellman-Feynman [15]. En la aproximación de HF esta ecuación indica que en el modelo de jalea deformable el fondo se ha "deformado", acomodándose a la densidad de los fermiones, de tal manera que se obtiene neutralidad local, lo cual disminuye la energía total del sistema. En este modelo el fondo no contribuye a la energía cinética del hamiltoniano del sistema [16].

El potencial de interacción entre pares de partículas que se escoge es el coulombiano apantallado  $V(r_{ij}) = e^2 \exp(-\mu r_{ij})/r_{ij}$ , cuando el factor de pantalla  $\mu$  se hace cero, tenemos la interacción de Coulomb (gas de electrones). Esta selección del potencial nos permite cortar el largo alcance de la interacción coulombiana y evitar las divergencias que aparecen en el gas de electrones cuando se utiliza el método de HF [8].

La función de estado en la aproximación de HF es el determinante de Slater de los espín-orbitales. Siguiendo la proposición de Bloch, para la parte orbital se escoge una función de la forma

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}).$$

Ya que estamos interesados en describir un sistema que pueda presentar densidad de carga periódica, la función  $u_{\mathbf{k}}$  debe reflejar este hecho. Siguiendo la sugerencia

de Wigner y Seitz [17], se tomó  $u_0(\mathbf{r})$  como una primera aproximación, es decir, la función  $u_{\mathbf{k}}$  para  $k = 0$ :  $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_0(\mathbf{r})$ .

Para los orbitales se propone un desarrollo en una base de la siguiente forma

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \equiv |n, \mathbf{k}\rangle = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{V}} \sum_{n=0}^{\mathcal{N}} C_n \cos(n\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{r}), \quad (1)$$

donde  $V$  es el volumen en el cual se imponen condiciones de periodicidad,  $\mathbf{k} = ik_x + jk_y + kk_z$  y  $\mathbf{r} = ix + jy + kz$ . La suma corre desde  $n = 0$  hasta un valor positivo  $\mathcal{N}$ . La  $\mathbf{q}_0$  es constante y se determina de tal forma que se satisfagan las ecuaciones de HF para estados ocupados y la energía sea un mínimo. Los coeficientes del desarrollo  $C_n$ , se obtienen resolviendo autoconsistentemente las ecuaciones de HF del sistema

$$\sum_{n_3} \left\{ \langle n_1 \mathbf{k}_1 | \hat{T} | n_3 \mathbf{k}_1 \rangle - \sum_{n_2} \sum_{n_4} \langle n_1 \mathbf{k}_1, n_2 \mathbf{k}_2 | \hat{V} | n_4 \mathbf{k}_2, n_3 \mathbf{k}_1 \rangle C_{n_2}^* C_{n_4}^* \right\} C_{n_3} = \epsilon_{n_1} C_{n_1}, \quad (2)$$

donde se impuso la restricción de que los espín-orbitales sean ortonormales, es decir,

$$\int \varphi_{\mathbf{k},\lambda}^*(\mathbf{r}) \varphi_{\mathbf{k}',\lambda'}(\mathbf{r}) d^3r = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \delta_{\lambda,\lambda'}, \quad (3)$$

donde  $\lambda$  es un índice que caracteriza al espín.

Con los orbitales de la Ec. (1), el sistema puede tener densidad de carga periódica a lo largo de la dirección de  $\mathbf{q}_0$ . Esta característica la presentan también las ondas de densidad de carga propuestas por Overhauser en la Ref. [18], para el cálculo del espectro de energía de los electrones de conducción de los metales alcalinos sodio y potasio [19]; así como los orbitales de la Ref. [4], Ecs. (5a-5c), donde se presenta un cálculo HF variacional para obtener la energía del estado base del gas de electrones.

La expresión para la densidad de partículas  $\rho$  obtenida con esta función se compara con el resultado de onda plana  $\rho_0$

$$\frac{\rho}{\rho_0} = \left\{ \sum_{n=0}^{\mathcal{N}} C_n \cos(nq_0 r_{q_0}) \right\}^2, \quad (4)$$

donde  $r_{q_0}$  es la proyección de  $\mathbf{r}$  en la dirección de  $\mathbf{q}_0$ . A partir de la Ec. (4) se observa claramente que la densidad es periódica a lo largo de la dirección de  $\mathbf{q}_0$ .

La ecuación correspondiente al espectro de energías en el modelo de jalea deformable tiene una expresión muy sencilla. Sólo contribuyen a él los términos pro-





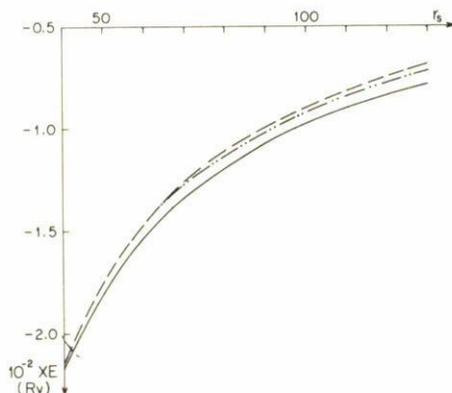


FIGURA 2. Energía por partícula para el estado base, en el caso coulombiano, en términos de  $r_s$ . La curva discontinua muestra los resultados de onda plana. La curva continua presenta los resultados obtenidos con la función propuesta en la Ec. (1). La curva ———— corresponde a los resultados obtenidos con la función de la Ref. [4] que presenta igual simetría que la nuestra.

la función de estado determinada autoconsistentemente es una onda de densidad de carga. Un hecho interesante se observa en la Fig. 1. El sistema más ligado es el correspondiente a  $\mu = 0$ ; sin embargo, la diferencia relativa respecto a la energía de onda plana aumenta con el factor de pantalla. Esta conducta es más pronunciada a densidades bajas. Desde este punto de vista la descripción con ondas de densidad de carga es más adecuada para las interacciones con menor alcance.

Los valores de la energía dependen de  $\mathcal{N}$  para valores pequeños de este índice. Sin embargo a partir de  $\mathcal{N} = 6$  los resultados para la energía son independientes de  $\mathcal{N}$ . Esto nos permite cortar la serie para  $\mathcal{N} = 6$ , es decir para un desarrollo con siete términos. Este resultado fue el mismo en todos los casos independientemente del potencial utilizado.

El menor valor de  $r_s$  donde se presenta la onda de densidad de carga nos da el punto de transición al cristal de Wigner. Este criterio para determinar el punto de transición ha sido utilizado por otros autores[14]. Los valores del parámetro  $r_s$  donde la solución autoconsistente cambia de homogénea a periódica son distintos para los diferentes sistemas de fermiones estudiados, esto es, para los distintos valores de  $\mu$ . La transición ocurre a una densidad más alta para el gas de electrones, *i.e.*,  $\mu = 0$ . Si  $\mu \neq 0$ , el punto de transición ocurre a menor densidad que para el gas de electrones. Esto se observa claramente en la Fig. 1. En la Tabla I se dan los valores del parámetro de densidad donde se presenta la transición al cristal de Wigner para los distintos valores del parámetro de pantalla. El valor de  $r_s = 31.3$  para la transición en el gas de electrones, es cercano a los valores de  $r_s = 26$  que se obtiene en la Ref. [21] y de  $r_s = 27$ , obtenido por Van Horn [22]. Es interesante notar que los valores de  $r_s$  obtenidos para la transición por distintos métodos y con distintos criterios,

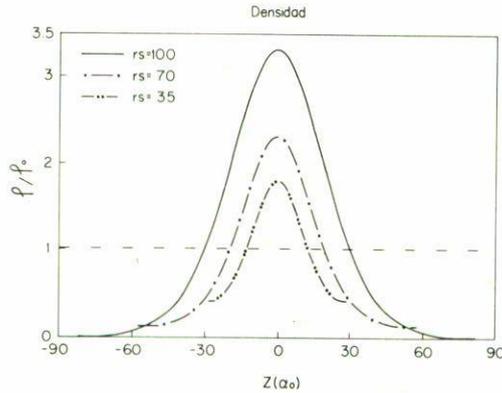


FIGURA 3. Densidad de partículas  $\rho$ , con respecto a la densidad de onda plana  $\rho_0$ , a lo largo de la dirección de  $\mathbf{q}_0$ . Se considera el caso coulombiano. Se presentan resultados correspondientes a tres valores del parámetro  $r_s$ .

$r_s$	$\mu$
31.3	0.0
41.0	0.4
63.0	0.8

TABLA I. Densidad de transición a ondas de densidad de carga para sistemas con potencial coulombiano apantallado.

$r_s$	$(\rho/\rho_0)_{MAX}$
35	1.79
70	2.31
100	3.31

TABLA II. Densidad de partículas a lo largo de  $\mathbf{q}_0$ , para el caso coulombiano, referida a la densidad de ondas planas. El periodo está dado por  $L = 1.63r_s$ .

varían en un intervalo muy amplio. Así se han reportado valores desde  $r_s = 5$  hasta  $r_s = 700$ , (Refs. [23] y [24] respectivamente).

En la Fig. 2 se comparan los resultados obtenidos para la energía del estado base con los que se reportan en la Ref. [4] y con los resultados de onda plana. Las soluciones de la Ref. [4], obtenidas por medio de un cálculo HF variacional, son generalizaciones de las funciones propuestas por Overhauser, y como se mencionó antes, no tienen el mismo valor del momento total en todo el intervalo de densidades, a diferencia de las funciones de este trabajo. Las tres curvas en la Fig. 2 corresponden al caso coulombiano. Se observa que el sistema es más estable para el desarrollo propuesto en la Ec. (1).

En la Fig. 3 se grafica la densidad de partículas  $\rho/\rho_0$ , en la dirección  $z$ , para diferentes valores del parámetro de Wigner-Seitz. Se consideró el caso coulombiano. Cuando  $r_s$  es menor que 31.3 el valor de la densidad de partículas es constante e igual a 1, ya que  $\rho = \rho_0$ . A medida que  $r_s$  aumenta después del punto de transición, la densidad es periódica en la dirección de  $\mathbf{q}_0$  ya que al menos una  $C_i \neq 0$  con  $i \neq 0$ . De la Fig. 3 se observa que cuando la densidad va disminuyendo, la localización de las partículas es mayor. Esto significa que las partículas se localizan más para el sistema diluido en apoyo de la hipótesis de Wigner. En la Tabla II se muestran los valores máximos de  $\rho/\rho_0$  en términos de  $r_s$ . Note que a partir de la relación





divergencias que aparecían debido al largo alcance del potencial coulombiano. Siendo la densidad de estados en el nivel de Fermi distinta de cero 0 si  $\mu \neq 0$ .

Los cálculos numéricos se efectuaron en la Burroughs 7800 de la Dirección General de Cómputo Académico, UNAM.

## Referencias

1. H.M. Van Horn, *Phys. Today* **32** (1979) 23.
2. N.H. March and M.P. Tosi, *Solid State Phys.* **36** (1981) 177.
3. A.W. Overhauser, *Phys. Rev.* **167** (1968) 691.
4. R.G. Barrera, M. Grether and M. de Llano, *J. Phys. C* **12** (1979) L715.
5. R.M. Méndez-Moreno and M.A. Ortíz, *Rev. Mex. Fis.* **34** (1988) 47.
6. *Methods of Electronic Structure Theory*, edited by H. F. Schaefer, Plenum, New York, (1977).
7. A. Svane, *Phys. Rev. B* **35** (1987) 5496.
8. Joseph Delhalle, Jean-Louis Calais, *Phys. Rev. B* **35** (1987) 9460.
9. J.G. Harrison, *Phys. Rev. B* **35** (1987) 987.
10. M.A. Ortíz y R.M. Méndez-Moreno, *Rev. Mex. Fis.* **34** (1988) 486.
11. John C. Inkson, *Many Body Theory of Solids*. Plenum Press, New York (1984).
12. E. Wigner, *Phys. Rev.* **46** (1934) 1002; *Trans. Faraday Soc.* **34** (1938) 678.
13. Setsuo Ichimaru, *Rev. Mod. Phys.* **54** (1982) 1017; C.M. Care and N.H. March, *Adv. Phys.* **24** (1975) 101.
14. L.M. Sander, J.H. Rose and H.B. Shore, *Phys. Rev. B* **21** (1980) 2739.
15. R.M. Méndez-Moreno y M.A. Ortíz, *Rev. Mex. Fis.* **32** (1986) 413.
16. M.A. Ortíz and R.M. Méndez-Moreno, *Phys. Rev. A* **36** (1987) 888.
17. E.P. Wigner and F. Seitz, *Phys. Rev.* **43** (1933) 804.
18. F.E. Fragachán and A.W. Overhauser, *Phys. Rev. B* **29** (1984) 2912.
19. A.W. Overhauser and N.R. Butler, *Phys. Rev. B* **14** 3371 (1976) 3371.
20. M. de Llano and A. Plastino, *Phys. Rev. A* **13** (1976) 1633.
21. H.B. Shore, E. Zaremba, J.H. Rose and L. Sander, *Phys. Rev. B* **18** (1978) 6506.
22. H.M. Van Horn, *Phys. Rev.* **157** (1967) 342.
23. W.J. Carr, *Phys. Rev.* **122** (1961) 1437.
24. A.A. Kugler, *Ann. Phys.* **53** (1969) 133.

**Abstract.** A self-consistent Hartree-Fock calculation at high, intermediate, and low densities for fermion gases in the deformable jellium is presented. With the purpose to cut the long range of the Coulomb interaction, the particle-particle interaction is taken as a screened Coulombic one. The single particle doubly occupied orbitals are expanded in terms of a cosine function series. This series is chosen in such a way that a periodic particle density along an axis can be simulated. Relevant ground state properties such as the ground state energy per particle, the charge density, and the total momentum are evaluated. The density  $r_s$ , at which Wigner crystallization occurs, is compared with the value obtained by other authors. The effect of the screened potential on the behaviour of the density of states at the Fermi level is discussed.