

003 P2

5
20/1



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

**PROPIEDADES DE GASES DE FERMIONES
EN EL MODELO DE JALEA DEFORMABLE**

TESIS DE DOCTORADO

**QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
DOCTOR EN CIENCIAS (FISICA)**

P R E S E N T A :

MARIA DE LOS ANGELES AURORA ORTIZ FLORES

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

MEXICO, D. F.

1991



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.

PROPIEDADES DE GASES DE FERMIONES EN EL MODELO DE JALEA DEFORMABLE

INTRODUCCION.	3
CAPITULO I. TEORIA GENERAL PARA GASES DE FERMIONES	10
1) Modelo de partícula independiente. Hartree-Fock en sistemas de muchas partículas.	10
2) El gas ideal de Fermi y los gases de fermiones con interacción.	13
3) Sistemas en una, dos y tres dimensiones.	16
4) El hamiltoniano y la energía del estado base.	18
5) El modelo de jalea y el modelo de jalea deformable.	20
6) Soluciones Hartree-Fock con distintas simetrías.	24
7) Competencia entre energía cinética y energía potencial, la hipótesis de Wigner.	27
8) Evidencia experimental del cristal de Wigner.	30
9) Presentación del problema.	33
CAPITULO II. CALCULOS ESPECIFICOS PARA EL GAS DE ELECTRONES	
1) El gas de electrones como plasma cuántico de una componente.	36
2) El estado base del gas de electrones. Antecedentes.	38

3) El gas de electrones en el modelo de jalea deformable.	43
4) Ondas de densidad de carga.	44
5) Cálculo H-F de la energía del estado base del gas de electrones en el modelo de jalea deformable.	49
6) Resultados.	52

CAPITULO III. CALCULOS PARA GASES DE FERMIONES CON INTERACCION DE ALCANCE ARBITRARIO.

1) Las ventajas de un factor de pantalla.	61
2) Generalización del método empleado para el gas de electrones.	64
3) Localización de partículas.	66
4) Criterios para determinar la transición.	67
5) La energía del estado base, como función del factor de pantalla.	68
6) El parámetro de acoplamiento como función de la distancia entre partículas y del factor de pantalla.	70
7) La localización como función del alcance de la interacción.	71
8) El factor de pantalla y la densidad de estados.	74
CONCLUSIONES	78
REFERENCIAS	80
PIES DE TABLAS	
PIES DE FIGURAS	

INTRODUCCION

Los problemas que se presentan en cualquier rama de la física involucran generalmente un gran número de partículas que interaccionan, por este motivo el estudio de sistemas de muchos cuerpos es muy importante para los físicos.

La descripción de los sistemas de muchos cuerpos ha sido abordada con diferentes métodos y aproximaciones, tanto clásica como cuánticamente. En cada caso la elección específica depende del interés concreto en determinadas propiedades físicas del sistema.

En algunas ocasiones la aproximación con la que se estudian los sistemas de muchos cuerpos nos permite considerarlos como entes sin estructura, por ejemplo en física atómica y molecular suele considerarse a los núcleos como partículas puntuales, sin embargo en física nuclear el interés fundamental radica en el estudio del núcleo como sistema de muchas partículas; los satélites y planetas pueden considerarse también como entes sin estructura para el cálculo aproximado de sus órbitas, pero en el cálculo de otras propiedades es esencial la estructura e interacción entre sus componentes.

Formalmente debemos iniciar el estudio de todos estos sistemas considerando que están formados por muchos cuerpos que interaccionan, y posteriormente se puede emplear la aproximación apropiada en cada caso.

La mecánica cuántica proporciona métodos aproximados para el estudio de sistemas de muchos cuerpos¹, estos métodos han sido empleados con éxito en el estudio de sistemas tanto de bosones como de fermiones.

Entre los sistemas cuánticos de muchos cuerpos son de primordial interés los gases de fermiones, ya que se presentan frecuentemente en diferentes ramas de la física. Estos sistemas se describen, en cada una de ellas, tomando en cuenta diferentes puntos de vista. Como habíamos mencionado, el interés específico en algunas observables físicas determina la aproximación y el método empleados; sin embargo, en otras ocasiones son las limitaciones operacionales las que obligan a seguir un método o aproximación determinado.

Como ejemplos de gases de fermiones podemos mencionar, los sistemas de Coulomb, y en particular en la física del estado sólido el llamado Gas de Electrones. Uno de los problemas más importantes a resolver en esta rama de la Física es la determinación del comportamiento de los electrones responsables de las propiedades de transporte de los diferentes materiales. Estos, se conocen como electrones de conducción en los metales y constituyen el gas de electrones, que es uno de los gases de fermiones más importantes que se presentan en la Física. La descripción de este sistema se ha intentado con aproximaciones tanto clásicas² como cuánticas³, y los resultados obtenidos con los diferentes métodos, han proporcionado información relevante acerca del mismo; adicionalmente dichos resultados han sido útiles

en el estudio de otros gases de fermiones.

Otro importante ejemplo de gases de fermiones lo encontramos en el estudio de la materia nuclear⁴, en este caso se espera que el comportamiento del sistema sea diferente al de un sistema de Coulomb, ya que la interacción no es de alcance infinito. Sin embargo las técnicas generales de la mecánica cuántica, para el estudio de los gases de fermiones, se pueden aplicar tanto para sistemas de partículas que interaccionan por medio de potenciales de alcance infinito, como para sistemas de partículas cuya interacción es de corto alcance.

Podemos mencionar también, dos ejemplos concretos de gases de fermiones que se presentan en Astrofísica : las estrellas de neutrones⁵, que corresponden a una etapa final en la evolución estelar, y el interior de las enanas blancas⁶ que corresponden a otra etapa en la evolución estelar; estas últimas se encuentran formadas con material tan denso como el de las estrellas de neutrones, siendo las cargas puntuales los átomos ionizados de ${}^2\text{He}$, ${}^{12}\text{C}$ o ${}^{56}\text{Fe}$ que se mueven en un fondo homogéneo formado por los electrones.

Los ejemplos mencionados nos muestran que en diferentes ramas de la física, se presentan sistemas cuya descripción se puede abordar a partir del estudio de gases de fermiones.

Un sistema infinito constituido exclusivamente por fermiones libres, a temperaturas muy bajas, está sujeto solamente a las condiciones que establece la estadística de Fermi-Dirac, su descripción se ha desarrollado en el marco de la mecánica

cuántica.⁷ Este sistema, conocido como Gas Ideal de Fermi, es el ejemplo más simple de gas de fermiones, y se considera frecuentemente como una aproximación simplificada de otros sistemas más realistas, o sirve como punto de partida para otras aproximaciones.

Para mejorar esta descripción, es necesario considerar tanto la interacción entre los fermiones, como con el medio en el que se encuentran. Estas interacciones son diferentes en cada sistema, sin embargo es frecuente iniciar el estudio de cualquier gas de fermiones con las siguientes aproximaciones: i) se consideran solamente interacciones entre dos cuerpos; y ii) se toman en cuenta únicamente las interacciones que dependen de la distancia entre partículas, $V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$. Quedan incluidas tanto las interacciones coulombianas de alcance infinito, como las de corto alcance, inclusive como una interacción delta. Entre estos dos extremos se encuentran muchas otras interacciones, que resultan adecuadas para describir sistemas de interés físico.

Podemos afirmar que el comportamiento de un sistema está determinado, en gran parte, por el alcance de la interacción entre las partículas que lo constituyen, sin embargo, en este trabajo se quieren resaltar las características comunes que presentan algunos gases de fermiones, sin importar si la interacción involucrada es de largo o de corto alcance.

Como ya mencionamos, la teoría cuántica proporciona métodos generales aplicables a todos los sistemas de muchos cuerpos, en particular a sistemas de fermiones. Entre los métodos que se

emplean más frecuentemente se encuentran los métodos perturbativos, los métodos variacionales y las simulaciones en computadora, o combinaciones de dos o más de ellos.

Entre los primeros, el método de la función de Green⁸ juega un papel muy importante, ya que la Función de Green de un problema contiene la información física más importante del sistema, como son la energía del estado base y otras funciones termodinámicas. Sin embargo, no es fácil determinar las funciones de Green de muchos sistemas, por lo que es necesario recurrir a aproximaciones. El estudio de los gases de fermiones se aborda frecuentemente por el método de la función de Green, a diferentes niveles, principalmente la aproximación de partícula independiente y RPA (Random Phase Aproximation). Sin embargo, no siempre es en método perturbativo el más adecuado para describir un sistema específico, por este motivo, se han desarrollado otros métodos.

Como alternativa se tienen, por ejemplo algunos métodos variacionales, entre ellos destaca el método de la densidad funcional o funcionales de la densidad, desarrollado por Hohenberg, Kohn y Sham⁹. Con este método se pueden obtener algunas propiedades del estado base del sistema en términos de la densidad de partículas, que se considera como funcional de un potencial externo. Se generan variacionalmente ecuaciones para una partícula, análogas a las de Hartree-Fock, las cuales, en general son más fáciles de resolver que las ecuaciones de movimiento de la función de Green. Actualmente este método es uno de los más populares en el cálculo de propiedades del estado base de algunos

sistemas específicos.

Por último conviene mencionar que en los últimos años han cobrado gran importancia las simulaciones en computadora, en particular el Método Monte Carlo¹⁰ se ha empleado con mucho éxito. Como ejemplo podemos mencionar que actualmente a escasos 11 años de su publicación, el trabajo de D. M. Ceperley y B. J. Alder¹¹, es ya un clásico al que hay que referirse en cualquier cálculo de la energía del estado base del gas de electrones, y de otros gases de partículas, tanto fermiones como bosones.

Cada uno de los métodos mencionados tiene ventajas y limitaciones, sin embargo, en conjunto todos ellos han proporcionado la información que se conoce actualmente sobre el comportamiento y características de los gases de fermiones.

En este trabajo abordamos el estudio de algunas propiedades del estado base de diferentes gases de fermiones, en la aproximación de partícula independiente, resolviendo en forma autoconsistente las ecuaciones de Hartree - Fock correspondientes.

En el Capítulo I presentamos la teoría mínima necesaria para poder ubicar el problema. En el Capítulo II efectuamos los cálculos correspondientes a un plasma cuántico de una componente. Se proponen soluciones con diferentes simetrías, en todos los casos se determinan las funciones de onda, la energía del estado base y, cuando se presenta, la localización de las partículas. Finalmente en el Capítulo III, siguiendo el método presentado en el Capítulo II, se describen gases de fermiones que interaccionan por medio de potenciales de alcance arbitrario. Se determina la dependencia del

alcance de la interacción sobre las características del estado base. Nuestro interés fundamental en esta parte del trabajo radica en la posible localización de partículas para estos sistemas, análoga a la que se presenta en sistemas de Coulomb.

CAPITULO I. TEORIA GENERAL PARA GASES DE FERMIONES.

Modelo de partícula independiente. Hartree-Fock para sistemas de muchas partículas.

Como punto de partida para describir un sistema de N cuerpos, se considera el estado base de un Hamiltoniano H_0 , de N partículas que no interaccionan. Dicho estado se describe por Φ_0 , en donde cada una de las partículas del sistema ocupa un estado de una sola partícula, de manera que su movimiento es independiente de la presencia de las otras.

Esta situación se modifica drásticamente al introducir la interacción, sin embargo es un hecho experimental que la descripción con el modelo de partícula independiente resulta sorpresivamente una buena primera aproximación para muchos sistemas de N cuerpos.¹²

Es claro que un método adecuado para abordar la descripción de sistemas de muchos cuerpos, debe retener esta información, de manera que es conveniente considerar la aproximación de partícula independiente como un punto de partida para otras aproximaciones. De todas las versiones que se encuentran en la literatura la aproximación de Hartree-Fock^{12,13} es el mejor modelo de partícula independiente. La aproximación de Hartree-Fock (H-F) fue introducida inicialmente en la búsqueda de una descripción adecuada para sistemas atómicos y moleculares.¹⁴ Se obtiene a

partir de un principio variacional, con el que se plantean las ecuaciones que deben satisfacer los orbitales para que la energía sea un mínimo. Resolviendo ese sistema de ecuaciones se determinan las funciones de onda y a partir de éstas se puede calcular la energía y otras propiedades del estado base del sistema.

Cuando los sistemas con los que se trabaja tienen un número pequeño de partículas, como es el caso de algunos átomos y moléculas, la solución autoconsistente de las ecuaciones acopladas resulta complicada, sin embargo se ha podido resolver en muchos casos.¹⁵ El nivel de complicación crece rápidamente cuando aumenta el número de partículas y para algunas moléculas el problema computacional es extraordinario. Es por esto que inicialmente parecía imposible efectuar un cálculo H-F autoconsistente para un sistema infinito. En la literatura existe confusión a este respecto, ya que lo que llaman algunos autores soluciones de H-F para sistemas de muchos cuerpos, son únicamente soluciones aproximadas que se obtuvieron tomando como punto de partida las ecuaciones de H-F, pero sin llegar a realizar un cálculo autoconsistente.¹⁶

Es evidente que no se puede resolver un sistema infinito de ecuaciones acopladas por los métodos tradicionalmente empleados en física atómica y molecular, por lo tanto es necesario resolver el problema matemático en forma alternativa.¹⁷

Para muchos sistemas de N cuerpos, las observables físicas de interés no dependen fuertemente de las correlaciones; y para algunos otros éstas no son muy importantes, en ambos casos, la

aproximación H-F es la más adecuada. Por otra parte, siempre puede ser el punto de partida para el estudio de sistemas en los que las correlaciones modifican el comportamiento del sistema, ya que como paso inicial es conveniente obtener la mejor solución de partícula independiente.

En general, la introducción de correlaciones puede modificar la energía del estado base, es importante aclarar que en sistemas infinitos, frecuentemente se considera que se han introducido correlaciones al considerar soluciones diferentes de las ondas planas y en algunas ocasiones definen la energía de correlación, como la diferencia entre la energía real y la energía de onda plana. Aquí emplearemos la definición formal de energía de correlación, como la contribución a la energía que se obtiene exclusivamente en cálculos que van más allá del modelo de partícula independiente.

Un resultado general muy importante es que las soluciones homogéneas, en términos de ondas planas, son siempre soluciones autoconsistentes de las ecuaciones de Hartree-Fock para cualquier gas de fermiones, siempre que las partículas interactúen a través de potenciales que dependen solamente de la distancia entre partículas. Por este motivo, es frecuente que se propongan estas soluciones de OP, dentro de la aproximación de partícula independiente y son, en muchas ocasiones, el punto de partida para descripciones que incluyen correlaciones.

Es importante recordar que, en todo sistema cuántico de fermiones, se satisface el principio de exclusión de Pauli, en consecuencia

la estadística de Fermi-Dirac introduce automáticamente una correlación de espín entre pares de partículas, dicha correlación marca la diferencia entre un sistema de fermiones y uno de bosones, y siempre está presente en cualquier descripción de estos sistemas, incluyendo la aproximación de H-F.

En este trabajo abordamos el estudio de diferentes gases de fermiones en la aproximación de partícula independiente, se resuelven en forma autoconsistente las ecuaciones de Hartree-Fock de cada sistema, y se calculan algunas propiedades importantes del estado base, de cada uno de los gases de fermiones estudiados.

El gas ideal de Fermi y los gases de fermiones con interacción. Habíamos indicado en la introducción que se conoce como el gas ideal de Fermi a un sistema de fermiones que no interaccionan, su estado base está representado en el espacio de momentos, por una esfera llena, de radio k_F , cuya superficie se conoce como Superficie de Fermi. Al introducir una interacción esta situación se modifica, es necesario tomar en cuenta que un sistema que consiste exclusivamente de un conjunto de fermiones libres, idénticos, que interactúan atractiva o repulsivamente, es lógicamente inestable, se requiere otro conjunto de partículas, como es el caso de los iones positivos en los metales, o un fondo homogéneo de carga contraria que neutralice el sistema y permita así su estabilidad.

El término carga se emplea aquí en forma muy general, se reduce a la carga eléctrica en el caso del gas de electrones y de otros

gases de partículas cargadas, pero en general dependerá del tipo de interacción presente en cada sistema. Es en este sentido que se pide neutralidad cuando se considera un fondo homogéneo de carga contraria.

En este trabajo se estudian gases de fermiones con diferentes interacciones, pero siempre sumergidos en un fondo que los neutraliza. Las características del fondo se indican en cada caso. La interacción presente en cada sistema depende de las características de las partículas que lo constituyen, y se propone en cada caso una expresión matemática que la describe. En algunas ocasiones se hace una proposición inicial y con base en los resultados se puede modificar, hasta tener una expresión matemática adecuada. En consecuencia, la forma explícita de la interacción puede variar mucho de un cálculo a otro, aquí consideramos únicamente interacciones entre dos cuerpos, que dependen de la distancia entre los mismos.

El prototipo de los gases de fermiones con interacción es el gas de electrones. En este sistema la interacción entre los electrones, entre estos y el fondo, así como la interacción del fondo con él mismo, es coulombiana, por lo tanto el alcance es infinito. Es frecuente encontrar también en la literatura otros gases de fermiones para los que la interacción tiene menor alcance, inclusive se reportan cálculos para sistemas cuyos componentes interactúan por medio de un potencial delta.¹⁸

A pesar de que las interacciones presentes determinan el hamiltoniano del sistema, y este a su vez caracteriza a cada

sistema, en principio, no tiene significado físico la comparación de los resultados obtenidos para observables físicas de sistemas diferentes. Sin embargo, frecuentemente encontramos que si se pueden inferir algunos aspectos del comportamiento de un sistema determinado, a partir de la información del comportamiento de otro sistema cuya interacción sea semejante a la del primero. En este sentido, el estudio de sistemas que interactúan a través de potenciales delta ha sido muy útil, ya que además de tratarse del estudio de un problema con menor complicación matemática, representa un límite de interés para diferentes sistemas físicos. A partir de las consideraciones anteriores, resulta conveniente desarrollar un método general, que permita efectuar cálculos generales de las propiedades del estado base de sistemas que interactúan a través de un potencial de alcance arbitrario, de tal forma que podamos abordar simultáneamente el estudio de diferentes gases de fermiones, desde aquellos caracterizados por una interacción de alcance infinito, hasta los que interactúan por medio de un potencial con alcance comparable a la distancia entre partículas.

En consecuencia se podrían obtener expresiones generales hasta cierto nivel y al final de los cálculos introducir la forma específica de la interacción que interese, así con muy poco esfuerzo adicional se puede obtener información de diferentes sistemas físicos.

Sistemas en una, dos y tres dimensiones.

La dimensionalidad del sistema es una características que clasifica en conjuntos ajenos a los diferentes sistemas físicos. A pesar de que todo sistema físico real se encuentra en tres dimensiones, las características específicas de algunos permiten que se aborde su estudio considerándolos como sistemas en menos dimensiones. Es frecuente encontrar en la literatura análisis de gases de fermiones en una (1D)¹⁹ o dos dimensiones (2D)²⁰. Es muy importante tener en cuenta esta posibilidad, ya que la dimensionalidad determina en muchos casos los métodos que pueden emplearse para su estudio.

Algunos sistemas, debido a sus características geométricas, se pueden considerar aproximadamente como sistemas en 1D, un ejemplo muy claro lo tenemos en el estudio de algunos alambres conductores; también existen otros sistemas con alguna característica unidireccional importante, tal que en algunas ocasiones se les considera como sistemas en 1D y se incluye la presencia de los alrededores como potenciales externos.

Adicionalmente al estudiar sistemas en 1D se cuenta con las siguientes ventajas: matemáticamente es más simple desarrollar un método de cálculo en una dimensión; frecuentemente se puede extender el método a más dimensiones y se puede obtener una idea del comportamiento cualitativo de los sistemas en 2D y 3D, que interaccionan a través de los mismos potenciales.

Un camino alternativo, para la descripción de estos sistemas, consiste en estudiar el sistema tridimensional e introducir una

solución anisotrópica con la simetría característica.

El análisis de sistemas en dos dimensiones (2D), ha tenido mayor interés físico, tanto desde un punto de vista teórico, como experimental. Por ejemplo, el estudio de propiedades de superficies, que actualmente ocupa un lugar muy importante en el estudio de la Materia Condensada, se puede iniciar con una descripción de sistemas de dos dimensiones; el gas de electrones en 2D, en sus diferentes versiones y aproximaciones, se emplea como modelo para determinar propiedades de transporte en la física de semiconductores, así como para describir algunas estructuras semiconductoras de interés (metal-oxide-semiconductor, MOS). También el hecho de que el movimiento electrónico en los nuevos superconductores de alta temperatura crítica se presente fundamentalmente en planos, ha generado recientemente mucha expectación sobre los resultados reportados en sistemas en 2D.

También en estos casos en un camino alternativo se plantea el problema en tres dimensiones y por medio de una solución con simetría planar se puede intentar una descripción del sistema.

En consecuencia, los sistemas de más interés son los de tres dimensiones, ya que además de ser la dimensionalidad de los sistemas reales, el estudio de lo sistemas en menos dimensiones resulta una simplificación que no siempre es necesaria. Es de estos sistemas de los que nos ocuparemos en este trabajo, mencionando en algunas ocasiones su conexión con sistemas en menos dimensiones.

El hamiltoniano y la energía del estado base

Una de las propiedades más importantes de cualquier sistema físico es la energía del estado base. Para sistemas infinitos como los que abordaremos aquí, se debe calcular la energía por partícula, por alguno de los métodos de la mecánica cuántica antes mencionados.

Para el cálculo concreto de la energía del estado base de un gas de fermiones, se parte del hamiltoniano del sistema, en éste se tienen que incluir todas las interacciones presentes. Aquí se propone que el hamiltoniano de un gas de fermiones que interaccionan, sumergido en un fondo inerte que lo neutraliza, tiene la siguiente forma general:

$$H = T + V_{pp} + V_{pf} + V_{ff} \quad \text{I.1}$$

donde T es el término de energía cinética que proviene exclusivamente de las partículas; V_{pp} representa la interacción entre las partículas, este término tiene dos contribuciones en el cálculo de la energía: el término directo V_d y el término de intercambio V_1 ; V_{pf} corresponde a la interacción de las partículas con el fondo; y finalmente V_{ff} representa la interacción del fondo con el mismo.

La forma específica de la interacción depende del sistema que se quiera estudiar, y será la que determine las características peculiares de cada sistema; sin embargo aprovechando la forma general de estos hamiltonianos y con el fin de desarrollar el

álgebra correspondiente una sola vez, se tratará de obtener, hasta donde sea posible, expresiones generales válidas para todos los gases de fermiones estudiados.

En la expresión general del hamiltoniano tenemos un término constante V_{ff} ; dos operadores de una partícula, T y V_{pf} ; y un operador de dos partículas, V_{pp} . El formalismo de segunda cuantización nos proporciona el lenguaje y la herramienta adecuados para obtener una expresión para la energía del estado base de sistemas cuyo hamiltoniano presenta operadores de una y dos partículas.^{12,21}

Para calcular la energía del estado base de un sistema determinado, es necesario que una vez especificados los términos del hamiltoniano correspondiente se seleccionen los métodos y las aproximaciones con las que sea conveniente efectuar dicho cálculo. Tanto los métodos como las aproximaciones dependen del cálculo específico, ya que el camino seguido para obtener la energía del estado base de un sistema determinado puede no ser adecuado en el cálculo correspondiente para otro sistema. Sin embargo, muchos gases de fermiones tienen algunas características comunes que nos permiten abordarlos en conjunto, por lo menos hasta cierto nivel, y resulta conveniente aprovechar estas ventajas cuando sea posible.

El modelo de jalea y el modelo de jalea deformable.

En la literatura se encuentran frecuentemente cálculos de propiedades del estado base de diferentes gases de fermiones

empleando el modelo de jalea²² (jellium). Este modelo consiste de un conjunto de partículas sumergido en un fondo homogéneo e inerte que neutraliza globalmente al sistema. Inicialmente se introdujo este modelo, para la descripción del gas de electrones, y la densidad de carga de los iones se aproximó por medio de un fondo homogéneo. Posteriormente se ha extendido el empleo del modelo de jalea para otros gases de fermiones.

El estado base de cualquier gas de fermiones, donde éstos interaccionan por medio de un potencial entre pares de partículas, cuando se trabaja con el modelo de jalea, presenta un resultado general muy importante. Siempre que se emplea la aproximación de partícula independiente, se obtiene como solución trivial, autoconsistente de las ecuaciones de Hartree-Fock, la solución homogénea en términos de ondas planas⁷. Como consecuencia, al efectuar el cálculo de la energía del estado base con orbitales de onda plana, se obtiene en forma automática la cancelación de los términos que provienen de: el término directo de la interacción entre partículas, la energía de interacción de las partículas con el fondo, y la energía de interacción del fondo con el mismo. Este resultado es independiente del tipo de interacción involucrada, solamente se requiere que sea entre pares de partículas y que dependa de la distancia entre ellas, además es necesario que la interacción sea igual entre las partículas y el fondo.

Resumiendo podemos afirmar que con el modelo de jalea, en la aproximación de partícula independiente, al calcular la energía

del estado base con soluciones homogéneas, se cancelan las siguientes contribuciones a la energía¹

$$V_d + V_{pf} + V_{ff} = 0 \quad \text{I.2}$$

Es importante recalcar que esta cancelación ocurre en los términos de la energía, no tendría sentido afirmarlo para el hamiltoniano, donde deben aparecer todos los términos de interacción presentes en el sistema; sin embargo, el resultado I.2 nos permite ahorrar esfuerzos en el cálculo de la energía en el modelo de jalea, cuando la solución propuesta es homogénea, ya que no es necesario calcular los términos anteriores, si sabemos que al sumarlos se cancelarán.

En general, en el modelo de jalea, aún en la aproximación de partícula independiente, pero con soluciones no homogéneas, la anterior cancelación no se efectúa y se tendrá una contribución a la energía proveniente de dichos términos.

Un comentario más, al definir el modelo de jalea, se indicó que el fondo es homogéneo e inerte y neutraliza globalmente al sistema; por otra parte, sabemos que los orbitales de ondas planas producen densidad uniforme de partículas y por consiguiente densidad uniforme de carga. Por lo tanto, con la solución trivial autoconsistente, en términos de orbitales de ondas planas, el modelo de jalea garantiza no sólo neutralidad global, sino adicionalmente neutralidad local. Cualquier otra solución diferente de las ondas planas produce densidad de carga no

uniforme, en esos casos el modelo de jalea no garantiza la neutralidad local, ya que el fondo permanece inerte y homogéneo con cualquier distribución de la densidad de las partículas.

Por otra parte, una densidad local de carga diferente de cero en alguna región del sistema implicaría la presencia de campos distintos de cero en esa región y esto incrementaría necesariamente la energía, por tal motivo el modelo de jalea, en la aproximación de partícula independiente, con soluciones no homogéneas, no es energéticamente el más adecuado para describir el estado base de ese sistema.

Estas consideraciones sugieren efectuar alguna modificación al modelo de jalea, de manera que siempre se mantenga la neutralidad local del sistema y se minimice la energía. Como respuesta a esta inquietud se define el modelo de jalea deformable.^{23,24} Este consiste de un sistema de partículas en un fondo inerte, pero no necesariamente homogéneo, ya que la densidad del fondo es igual a la densidad de las partículas, en esta forma se mantiene siempre neutralidad local de carga.

La diferencia fundamental entre el modelo de jalea y el modelo de jalea deformable estriba en que en el primero la densidad del fondo permanece homogénea sin importar cual sea la densidad de las partículas, mientras que en el segundo la densidad del fondo siempre es igual a la densidad de las partículas, con el fin de mantener siempre neutralidad local.

Podemos considerar que en el modelo de jalea el fondo es completamente rígido y se mantiene uniforme a pesar de la

presencia de los campos producidos por modificaciones en la densidad de las partículas; mientras que en el modelo de jalea deformable el fondo es completamente elástico y presenta la misma densidad que la de las partículas. Ambos modelos representan situaciones extremas, diferentes de la realidad física.

Por otra parte, en el modelo de jalea deformable, cuando trabajamos en la aproximación de partícula independiente, se obtiene un resultado útil e importante. Debido a la deformación del fondo, cuando se efectúa el cálculo de la energía del estado base se obtiene automáticamente la cancelación de los términos que provienen del fondo y el término directo de la interacción entre partículas, la misma cancelación que se obtenía en el modelo de jalea con soluciones de onda plana (1.2). Debido a la importancia de este resultado, frecuentemente se define el modelo de jalea deformable, en la aproximación de partícula independiente, imponiendo la cancelación que mostramos en la expresión I.2

$$V_d + V_{pp} + V_{pf} = 0$$

Se puede afirmar, por lo tanto, que en el modelo de jalea deformable el cálculo concreto de la energía del estado base se reduce al cálculo del término que proviene de la energía cinética de las partículas y el término de intercambio de la interacción entre partículas.

$$E = T - V_1$$

I.3

Es importante recordar que formalmente el hamiltoniano no ha cambiado, contiene el término de energía cinética de las partículas, los términos directo y de intercambio de la interacción coulombiana, el término de interacción partículas-fondo y el término fondo-fondo; sin embargo en el modelo de jalea deformable, al calcular la energía se cancelan las contribuciones de la expresión I.2.

Soluciones H-F con distintas simetrías.

Habíamos mencionado que las ondas planas son soluciones autoconsistentes, de las ecuaciones de H-F, de cualquier gas de fermiones que interaccionan a través de un potencial que depende solamente de la distancia entre partículas; debemos recordar sin embargo, que debido a que las ecuaciones de H-F no son lineales, la solución no es única, y los orbitales de ondas planas no son en muchos casos, los más adecuados energéticamente, por lo que se requiere continuar la búsqueda de mejores soluciones en la aproximación de partícula independiente.

En esta búsqueda se debe tomar en cuenta que una solución aproximada para todos los gases de fermiones es la solución con orbitales de ondas planas, y se deben recuperar como solución para cualquier gas de fermiones, en el límite en que las interacciones puedan desprejarse. En consecuencia, resulta conveniente que otros orbitales propuestos para sistemas con interacción, contengan explícitamente un término de onda plana, al que tienen

que reducirse en las condiciones indicadas anteriormente.

Una proposición para los orbitales, que ha probado su utilidad en la descripción de diferentes sistemas, tanto para gases de fermiones sumergidos en un fondo homogéneo, como para gases en un fondo caracterizado por determinada simetría es:

$$e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} F(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad 1.4$$

donde $F(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ es una función que debe tener la simetría del sistema.

Existen en la literatura muchos cálculos específicos con orbitales de esta forma para algunos gases de fermiones. Los más conocidos son, posiblemente los que se emplean en estado sólido, para describir los electrones de conducción, en ese caso se conoce la simetría del fondo, que está determinada por la red de los iones, por lo tanto se propone que $F(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ tenga dicha simetría, $F(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ es la función de Bloch.^{2,3}

En este caso y en cualquier otro en el que se tenga información sobre la simetría del fondo, se debe proponer una función F con esa simetría, que aparece explícitamente en el hamiltoniano del sistema.

Sin embargo, en otras ocasiones no se cuenta con la información de la simetría del fondo, inclusive se puede contemplar la posibilidad de un rompimiento espontáneo de simetría. En esos casos, la nueva simetría es parte de la información que se quiere obtener del sistema.

En esas condiciones se pueden proponer diferentes soluciones, cada una de ellas con una simetría característica, y por medio de criterios energéticos se determina la solución apropiada.

En la literatura se encuentran frecuente soluciones variacionales, es decir se proponen funciones F que dependen de algunos parámetros que se determinan variacionalmente.²⁴ Este método ha proporcionado resultados interesantes para algunos sistemas, pero tiene el inconveniente de que no hay un camino claro y sistemático para mejorar la solución obtenida, ya que un incremento arbitrario en el número de parámetros no garantiza una mejor solución.

Una proposición más sistemática, aunque en algunos casos más difícil de abordar, consiste en proponer, para la función F un desarrollo en términos de funciones ortogonales.²⁵ Lógicamente este desarrollo se debe escoger en forma apropiada para que rápidamente se obtenga convergencia en el cálculo de la función de onda, y se pueda trabajar con un número reducido de términos.

Uno de los factores más importantes para determinar el desarrollo apropiado es la simetría, pero también deben tomarse en cuenta los problemas operacionales que involucra cada desarrollo.

Al proponer una función de onda como un desarrollo en términos de funciones ortogonales, se pueden ir mejorando la solución paso a paso, hasta alcanzar convergencia en el cálculo de las observables físicas, o el nivel de aproximación que nos interese, o nos sea posible obtener. Esto último depende, en algunos casos de nuestra capacidad para resolver los problemas matemáticos involucrados y en otros del equipo de cómputo con que contemos. Una ventaja

adicional que tenemos al proponer un desarrollo en términos de funciones ortogonales y que tendría que imponerse para otros tipos de funciones, es precisamente la ortonormalización de las funciones de onda.

Competencia entre energía cinética y energía potencial, la hipótesis de Wigner.

En todos los gases de fermiones con interacción, sumergidos en un fondo que neutraliza globalmente al sistema, se presenta una competencia entre la energía cinética de las partículas y la energía potencial. Esta competencia depende de la magnitud y el alcance de la interacción involucrada. Un estudio detallado de este tipo de competencia lo presentó Wigner, para el caso particular del gas de electrones en 1934, y ha servido de modelo para predecir el comportamiento de otros gases de fermiones.

A partir de 1934 Wigner²⁶ inició la publicación de varios trabajos en los que analiza los efectos de la interacción electrónica en los niveles de energía electrónicos de los metales. Después de indicar la importancia que tiene cada una de las contribuciones a la energía, para diferentes valores de la distancia promedio entre partículas, propuso un modelo muy sencillo para describir a los metales en situaciones extremas.

Cuando la distancia promedio entre partículas es muy grande, es decir, para una densidad del sistema muy baja, debido al largo alcance de la interacción coulombiana, la energía potencial es dominante en el cálculo de la energía del estado base. Mientras

que, en la región de altas densidades, la energía se encuentra claramente dominada por el término de energía cinética de los electrones. Este hecho es el que justifica físicamente, que se propongan orbitales de partícula libre, OP, como soluciones al gas de electrones en la región de altas densidades, y que los resultados obtenidos con ellos sean razonables. Podemos afirmar que los electrones se comportan prácticamente como partículas libres en la región de altas densidades.

Wigner indicaba que para densidades menores de cierto valor crítico, la energía cinética es despreciable y el comportamiento del gas de electrones se determina por la configuración electrónica que minimize la energía potencial coulombiana.

Debido a que la energía potencial de un sistema distribuido al azar es mayor que la de un sistema ordenado, Wigner concluyó que a partir de cierto valor crítico de la distancia promedio entre partículas el gas de electrones debía formar un cristal. Tomando esto en consideración propuso un modelo sobresimplificado para los metales. Partió de la hipótesis de que en un metal, se puede considerar que los iones constituyen un fondo homogéneo en el que se encuentran sumergidos los electrones. Estos se comportan realmente como partículas libres a densidades altas, pero conforme disminuye la densidad del sistema, la competencia entre el término de energía cinética electrónica y los términos del potencial se va incrementando, hasta que finalmente domina la energía potencial y los electrones se localizan en posiciones más o menos fijas, formando una red sumergida en el fondo homogéneo, se dice que los

electrones cristalizan.

Este modelo se conoce a partir de entonces como el **Cristal de Wigner** y es sorprendente la cantidad de trabajos que se han publicado,²⁷ en los cuales por muy diferentes métodos y aproximaciones se quiere encontrar la densidad de transición al cristal de Wigner.

Existen en la literatura muchos y muy variados criterios para determinar el valor de la distancia promedio entre partículas r_n , medida en radios de Bohr, de la transición al cristal de Wigner.²⁷ En la Tabla I.1 se presentan algunos de estos valores publicados, indicando quienes lo obtuvieron y por que método.

En el modelo de Wigner el fondo es homogéneo, sin embargo, en principio, todos sus argumentos se pueden extender para un gas de electrones en el que el fondo no sea homogéneo, en particular se ha encontrado que el gas de electrones en el modelo de jalea deformable, satisface las hipótesis de Wigner y cristaliza a densidades bajas,^{24, 25} lo único que se requiere es mantenerse en un régimen cuántico. Lógicamente el valor crítico de r_n dependerá de las características de fondo.

Sería deseable que el análisis anterior para el gas de electrones se pudiera generalizar para otros gases de fermiones, lógicamente el comportamiento de cada sistema depende fuertemente del alcance de la interacción involucrada, y posiblemente no siempre se presente una situación equivalente a la indicada por Wigner para el gas de electrones.

Evidencia experimental del cristal de Wigner.

Simultáneamente a los múltiples trabajos teóricos, a partir de la proposición de Wigner, se inició también una búsqueda de la evidencia experimental que verificara la proposición de cristalización.

La observación de un sistema de Coulomb, con diferentes características para el fondo, que pudiera presentar un estado cristalino a densidades bajas fue el objetivo de muchos grupos de experimentadores. A pesar de que el estudio de las características de los metales fue el motivo de las reflexiones al respecto de la fase del estado base del gas de electrones, la verificación de la proposición de Wigner en estos materiales resultaba imposible, ya que en primer lugar el cristal de Wigner no es conductor, y en segundo lugar la densidad de partículas a la que estos materiales existen en la naturaleza es muy grande, comparada con la densidad de transición a la que diferentes teorías predicen la cristalización.^{27,11} Por lo tanto, para verificar la existencia del cristal de Wigner fue necesario dar las condiciones adecuadas en el laboratorio, a fin de tratar de construirlo.

Una vez establecidas las limitaciones se han realizado múltiples intentos en esta dirección, tanto con sistemas en dos, como en tres dimensiones; con fondo homogéneo y con fondo deformado.

La primera idea al respecto, que se presentó en dos dimensiones, consiste en depositar electrones sobre una superficie líquida, de manera que se pudieran establecer estados superficiales. Inicialmente la propusieron Cole y Cohen²⁸ para He, H₂, D₂ y Ne;

y en forma independiente lo propuso también Shikin²⁹ para He. La condición para que se presenten estos estados de superficie, es que el líquido debe tener afinidad electrónica negativa, para evitar que los electrones penetren, pero también es necesario que la fuerza electrostática con su imagen sea suficientemente grande como para que permanezcan en estados ligados.

Basados en estas ideas Crandall y Williams³⁰ realizaron el primer experimento en el que se depositan electrones sobre una superficie de Helio líquido, debido a la afinidad electrónica del helio, los electrones no penetran en el líquido, pero si quedan ligados a sus imágenes, por las fuerzas electrostáticas, en estados superficiales localizados fuera del líquido, tal como se requería. Las densidades electrónicas obtenidas experimentalmente se encuentran entre 10^7 y 10^9 cm^{-2} , de forma que la distancia promedio entre los electrones es del orden de 10^{-4} cm, si se toma en cuenta que la distancia a la placa cargada positivamente es mucho mayor, se puede considerar que se satisface la condición de gas de electrones diluido, sumergido en un fondo homogéneo de carga positiva. En estas condiciones obtuvieron que los electrones quedaban localizados en estados de superficie formando una red hexagonal. Este experimento de electrones sobre helio líquido ha resultado ideal y a partir del trabajo de Crandall y Williams muchos otros grupos lo han repetido con diferentes condiciones y aproximaciones.³¹

Posteriormente, también Crandall y Williams con otros colaboradores, elaboraron experimentos en los que observaron la

estructura cristalina de esferas de poliestireno³² en suspensión acuosa. El tamaño de las partículas es aproximadamente de 0.1 μm , y la distancia entre ellas alrededor de 0.5 μm . Por difracción de Bragg se observó la estructura cristalina, que resultó (bcc) cúbica centrada en el cuerpo, con mezcla de (fcc) cúbica centrada en las caras. Encontraron adicionalmente que variando las concentraciones, es decir, la distancia promedio entre partículas, se puede variar la constante de la red, sin cambiar la estructura. También D.W. Schaefer y B.J. Ackerson³³ realizaron experimentos semejantes

Finalmente, el interés en el estudio de suspensiones coloidales en las que el alcance de la interacción entre las partículas es comparable a la distancia entre las mismas, condujo también a la realización de un conjunto de experimentos muy importantes en este campo. En el estudio del equilibrio entre las fases cristalina y espacialmente desordenada que presentan algunas suspensiones coloidales de esferas de poliestireno en fluidos polares, D. Hone³⁴ indicó que debe observarse directamente al microscópio si se forman o no estructuras cristalinas. A partir de estas ideas, D. A. Weitz, W. Z. Dozier y P. M. Chaikin construyeron y observaron estructuras periódicas en cristales coloidales.³⁵

Toda esta diversidad en evidencia experimental sugiere que la cristalización de sistemas coulombianos se puede presentar en diferentes condiciones dependiendo de la simetría, la dimensionalidad y el alcance real de la interacción, y que da lugar a muchas y muy variadas estructuras cristalinas. Por lo

tanto resulta muy importante tener un método sistemático que nos permita determinar teóricamente la posibilidad de cristalización de diferentes sistemas, así como las estructuras más estables en cada caso.

Sin embargo, un análisis más cuidadoso de los resultados experimentales antes presentados, nos indica que todos estos sistemas se han construido en condiciones tales que podemos considerarlos como sistemas clásicos. En este sentido ninguno de ellos verifica realmente la existencia de un cristal de Wigner en régimen cuántico, sin embargo la realización experimental de estos sistema implica que, a pesar de que la proposición de Wigner se plantea para sistemas cuánticos, las mismas conclusiones son válidas también para sistemas de Coulomb clásicos.

Debido a la característica clásica de los experimentos anteriores, se ha seguido en la búsqueda de un cristal de Wigner realmente cuántico. Recientemente dos grupos de investigadores han reportado observaciones indirectas que indican la presencia evidente de una fase cristalina en un gas de electrones bidimensional, en presencia de campos magnéticos intensos.³⁶

Presentación del problema.

En este trabajo efectuamos cálculos de algunas propiedades relevantes del estado base de diferentes gases de fermiones, en la aproximación de partícula independiente. Los sistemas que se estudian aquí tienen algunas características comunes, pero difieren substancialmente en otros aspectos, como el alcance de la

interacción entre partículas y la simetría de la solución propuesta.

Proponemos una forma general para el hamiltoniano y como soluciones H-F proponemos orbitales expresados como el producto de una onda plana multiplicada por un desarrollo de funciones periódicas en términos de funciones coseno. Los coeficientes de los desarrollos se determinan en forma autoconsistente, por medio de las ecuaciones de H-F.

Consideramos tres tipos de soluciones H-F, cada uno de ellos en términos de un desarrollo con una simetría característica, y realizamos los cálculos autoconsistentes con diferente número de términos, hasta obtener convergencia en el valor de los coeficientes del desarrollo correspondiente.

Como pretendemos describir diferentes sistemas, cada uno de ellos lo caracterizamos por el alcance de la interacción entre pares de partículas y por la simetría de la solución propuesta.

Consideramos inicialmente en el capítulo II, un plasma cuántico de una componente, que corresponde a un sistema de Coulomb, por lo tanto la interacción es de alcance infinito. Trabajamos en el modelo de jalea deformable y nos interesa fundamentalmente calcular la energía del estado base, en un amplio intervalo de densidades con el fin de determinar la transición a sistemas localizados semejantes al cristal de Wigner. Estudiamos tanto sistemas paramagnéticos como ferromagnéticos, comparando en algunos casos los resultados obtenidos para ambos tipos de sistemas.

En el capítulo III, estudiamos otros gases de fermiones con interacciones de alcance finito, realizamos los cálculos para diferentes valores del alcance, desde aquellos cercanos al potencial coulombiano, hasta considerar interacciones de muy corto alcance, semejantes a la interacción delta.

En todos los casos se efectúan cálculos autoconsistentes de Hartree-Fock, para determinar la función de onda, con la cual se calcula la energía del estado base de cada uno de los gases de fermiones considerados.

Estos cálculos se realizan para cualquier valor de la distancia entre partículas, es decir obtendremos la función de onda y la energía del estado base de diferentes gases de fermiones, para densidades altas, intermedias y bajas sin necesidad de interpolar los resultados de diferentes regiones. Como ya se mencionó tenemos especial interés en determinar si para estos sistemas también se presenta una transición semejante a la del cristal de Wigner.

La teoría se desarrolla para sistemas en tres dimensiones, de tal forma que se tiene la opción de proponer soluciones con diferentes simetrías, nos interesa estudiar sistemas que puedan presentar localización en una, dos y tres direcciones independientes.

Finalmente analizamos la densidad de estados en los sistemas que interaccionan a través de potenciales de alcance finito, mostrando su dependencia con el alcance de la interacción, con la densidad de partículas y con la simetría del sistema.

CAPITULO II. CALCULOS ESPECIFICOS PARA EL GAS DE ELECTRONES.

El gas de electrones como plasma cuántico de una componente.

En este capítulo determinamos algunas propiedades del estado base de gases de fermiones que interaccionan a través de potenciales coulombianos. Nuestro interés fundamental radica en el estudio del gas de electrones, pero podemos abordar el problema general de un plasma de una componente.

Un plasma de una componente es un sistema constituido por una sola especie de partículas cargadas sumergidas en un fondo, frecuentemente homogéneo, que neutraliza el sistema. Este modelo, a pesar de su simplicidad, ha sido muy útil en la descripción de muchos sistemas físicos, ya que manifiesta las características fundamentales de todo sistema de Coulomb. Los plasmas se han estudiado tanto clásica como cuánticamente.³⁷ Aquí abordaremos el problema cuántico, sin embargo en algunos casos de interés, mencionaremos resultados del caso clásico.

Los plasmas de una componente se caracterizan por medio de un parámetro de acoplamiento Γ , que mide la relación entre la energía potencial coulombiana y la energía cinética de las partículas cargadas. Cuando $\Gamma < 1$ tenemos un plasma débilmente acoplado, si por el contrario $\Gamma > 1$ el plasma es fuertemente acoplado. Una gran cantidad de sistemas físicos se pueden estudiar como plasmas fuertemente acoplados,³⁸ esto ha ocasionado que las

técnicas y métodos de estudio se mejoren constantemente, y los resultados obtenidos para alguno de estos sistemas se puedan, en muchas ocasiones, generalizar para otros.

Concretamente, el estudio del gas de electrones como un plasma cuántico de una componente, ha permitido aprovechar el lenguaje y las técnicas que se han desarrollado en el estudio de los plasmas. Sabemos que en un sistema de Coulomb como el gas de electrones, sumergido en un fondo inerte, ya sea homogéneo o deformado, las partículas se comportan prácticamente como partículas libres a densidades altas, pero a densidades bajas la importancia relativa de la energía potencial aumenta, produciendo una densidad de carga no uniforme; a densidades más bajas se puede producir una estructura cristalina, como lo indicaba Wigner.

Esta transición o rompimiento de simetría puede determinarse por medio del cálculo de algunas características del plasma, en particular el cálculo del parámetro de acoplamiento resulta muy útil en la descripción de las fases de estos sistemas, ya que como veremos más adelante, su comportamiento nos permitirá localizar en forma precisa los puntos de transición.

El interés de múltiples trabajos y el nuestro en este capítulo, es determinar algunas propiedades del estado base del gas de electrones en el modelo de jalea deformable, considerado como un plasma cuántico de una componente, fuertemente acoplado. Nos interesan fundamentalmente las fases que puede presentar el sistema para cada región de densidades.

El estado base del gas de electrones. Antecedentes.

Para calcular las propiedades del estado base de cualquier sistema, debemos partir del hamiltoniano correspondiente y por los métodos de la mecánica cuántica, tratar de obtener la solución de menor energía. En el problema que aquí abordamos, se desconoce el hamiltoniano exacto, por lo tanto el problema se inicia al proponer la forma explícita del mismo, que dependerá también de las observables físicas que estemos interesados en calcular.

En la literatura se han reportado los resultados obtenidos con diferentes modelos, los cuales han introducido muchas y muy variadas proposiciones para el hamiltoniano, dependiendo de la densidad a la que se quiere describir el sistema, esta densidad se caracteriza por la distancia entre las partículas, r_s , medida en radios de Bohr.

Como antecedente sabemos que dentro del modelo de partícula independiente, el estado base a densidades altas, tanto para el gas de electrones como en general para un plasma cuántico de una componente, se aproxima a un gas ideal de Fermi y podrá describirse aproximadamente en esta región, por orbitales de ondas planas, que producen densidad homogénea de partículas. Esta solución de onda plana es, para densidades altas, el punto de partida para aproximaciones, más allá del modelo de partícula independiente, en las que se toman en cuenta las correlaciones.

Tratando de ir más allá del modelo de partícula independiente, es decir, tomando en cuenta la presencia de las correlaciones, en la región de muy altas densidades, en 1956 Gell-Mann y Brueckner³⁹

publicaron un trabajo en el que calculan la energía de correlación por partícula de un gas de electrones sumergido en un fondo uniforme, en la región de densidades altas. En vista de que un desarrollo en teoría de perturbaciones presenta divergencias, a causa del alcance infinito de la interacción coulombiana, fue necesario encontrar un método alternativo para realizar el cálculo, con el que obtuvieron un desarrollo en términos de la distancia entre partículas, r_s . Este trabajo inició una cadena de publicaciones, entre las que destaca la de Carr y Maradudin⁴⁰ en 1964, quienes continuaron el cálculo de Gell-Mann y Brueckner, obteniendo algunos términos adicionales para el desarrollo. Finalmente se tiene la siguiente expresión que describe el estado base del gas de electrones a densidades altas.

$$E(Ry) = 2.21 r_s^{-2} - 0.916 r_s^{-1} + 0.0622 \ln r_s - 0.096 + \\ + 0.018 r_s \ln r_s + (E_3 - 0.036) r_s + O [r_s^2 \ln r_s] \quad \text{II.1}$$

El primer término proviene de la energía cinética de las partículas; el segundo término proviene del término de intercambio que se obtiene, en la aproximación de partícula independiente, en un cálculo H-F. Estos dos términos se obtienen sin considerar la presencia de las correlaciones, los términos restantes son los calculados por Gell-Mann y Brueckner, con las correcciones de Carr y Maradudin. E_3 es la suma de doce integrales. Este desarrollo se ha empleado con éxito en muchos trabajos. En la

figura II.1 presentamos una gráfica de la energía del estado base para densidades altas, que se obtiene a partir de esta expresión. En el otro extremo, a partir de la hipótesis de Wigner, se sabe que a densidades suficientemente bajas el sistema cristaliza, por lo tanto debe ser descrito por funciones periódicas, con las características de simetría de la red de electrones que se forme. El hamiltoniano del sistema debe tener esta información, por lo tanto es radicalmente diferente al propuesto para densidades altas, en donde se parte de un hamiltoniano de electrones libres y se introduce posteriormente la interacción coulombiana.

Los cálculos de la energía del estado base en la región de bajas densidades, más allá del modelo de partícula independiente también han conducido a un desarrollo en términos de r_s . Tal como Wigner lo propuso, se considera inicialmente un hamiltoniano que toma en cuenta que cada electrón se encuentra en un punto de la red; la energía potencial correspondiente depende de la red específica que se propone. A fin de decidir cual es la red energéticamente más estable, fue necesario realizar los cálculos correspondientes para diferentes redes.

Rosemary Coldwell y Alexei Maradudin⁴¹, calcularon inicialmente la energía del punto cero para las redes cúbicas, a partir de sus resultados se encontró que la configuración con energía potencial más estable corresponde a una red cúbica contrada en el cuerpo (bcc); el valor correspondiente a una red cúbica contrada en las caras (fcc) es muy cercano; mientras que el de la red cúbica simple es el energéticamente menos estable de las tres redes

cúbicas, sin embargo la diferencia con las otras redes es pequeña. Proponiendo la red (bcc) calcularon el segundo término del desarrollo, que se obtiene cuando se considera que los electrones realizan movimiento armónico simple alrededor de su posición de equilibrio. Se proponen por lo tanto, soluciones de oscilador armónico, como proponía el mismo Wigner desde su trabajo inicial; los siguientes términos se obtienen cuando se introducen correcciones anarmónicas para mejorar el valor de la energía del estado base, obteniéndose finalmente el siguiente desarrollo en la región de densidades bajas.⁴²

$$E(Ry) = -1.79185 r_{\square}^{-1} + 2.65724 r_{\square}^{-3/2} - 0.73 r_{\square}^{-2} - 0.8 r_{\square}^{-5/2} +$$

$$O(r_{\square}^{-3}) + E_{\text{exp}} \quad \text{II.2}$$

donde E_{exp} depende exponencialmente de $r_{\square}^{1/2}$. En la figura II.2 presentamos la gráfica de la energía con este desarrollo. Debemos insistir en que los dos desarrollos, para r_{\square} pequeñas, y para r_{\square} grandes, parten de hamiltonianos completamente diferentes, cada uno de ellos adecuado para describir al sistema en la región correspondiente. A pesar de la importancia de estos resultados, que han introducido correlaciones, la energía del estado base en la región más importante, la de densidades intermedias no se obtiene por ninguno de los dos procedimientos, por lo que ha sido necesario interpolar los resultados de densidades altas y bajas a fin de predecir resultados en la región de densidades

intermedias.⁴³

Otra característica muy importante de un plasma de una componente, como el gas de electrones, es que está constituido por partículas cargadas, con espín. Por ser fermiones, el principio de exclusión de Pauli establece las posibilidades de ocupación de los estados disponibles. Dicha ocupación determinará, entre otras cosas, si el sistema es paramagnético o ferromagnético.⁴⁴ En la naturaleza se presentan ambos tipos de sistemas (además de otros cuya descripción es más compleja), por lo tanto es conveniente contar con formalismos que permitan estudiar tanto plasmas paramagnéticos como ferromagnéticos.

Hasta aquí solamente se habían considerado sistemas paramagnéticos, sin embargo, para sistemas ferromagnéticos también se han efectuado trabajos semejantes a los de Brueckner para densidades altas y a los correspondientes a densidades bajas, obteniéndose desarrollos para la energía del estado base como función de r_s , muy semejantes a los que presentamos en las ecuaciones II.1 y II.2.

Los desarrollos para la energía del estado base en función de r_s , para sistemas ferromagnéticos, se obtuvieron en algunos casos a partir de los resultados para el caso paramagnético, por ejemplo el desarrollo a densidades altas por el método de Carr y Maradudin lo obtuvo Hedin⁴⁵ y los coeficientes se modificaron obteniéndose el siguiente desarrollo.

$$E = a_1 r_s^{-2} + a_2 r_s^{-1} + a_3 \ln r_s + a_4 + a_5 r_s \ln r_s + a_6 r_s +$$

$$O(r_s^2 \ln r_s)$$

II.9

con: $a_1 = 3.507998$; $a_2 = -1.154505$; $a_3 = 0.03109$

$a_4 = -0.54$; $a_5 = 0.007$ y $a_6 = -0.021$

En la figura II.3 presentamos la energía del estado base para sistemas ferromagnéticos en la región de densidades altas. Análogamente para otras regiones y con otros métodos y aproximaciones se ha abordado el estudio de sistemas de Coulomb ferromagnéticos. Estos cálculos tienen mucha importancia, ya que al calcular la energía del estado base para las dos posibilidades de ocupación, sistemas paramagnéticos y sistemas ferromagnéticos, se pueden comparar los resultados obtenidos y en esta forma se determina la naturaleza magnética más estable de cada uno de estos sistemas, dentro del modelo y las aproximaciones empleadas.⁴⁶

El gas de electrones en el modelo de jalea deformable. La descripción del estado base de un plasma cuántico de una componente, fuertemente acoplado se ha intentado con diferentes métodos y aproximaciones, aquí seguimos la aproximación de partícula independiente, con el modelo de jalea deformable^{5,24} descrito en el capítulo anterior. Recordemos que se trata de un modelo en el cual el fondo es inerte pero no necesariamente homogéneo, ya que en cada situación específica, se ha deformado de

manera que la energía es un mínimo.

Como ya indicamos, en el modelo de partícula independiente, cuando la densidad de partículas es homogénea, hay una cancelación automática de algunos términos de la energía; pero en los casos en que la densidad de partículas no es homogénea, el imponer esta cancelación nos introduce automáticamente en el modelo de jalea deformable.

En el gas de electrones para de obtener esta cancelación y trabajar en el modelo de jalea deformable, con la aproximación de partícula independiente, corresponde a una situación en la que el fondo se ha deformado siguiendo la densidad de las partículas.

Aquí trabajaremos con el modelo de jalea deformable, en la aproximación de partícula independiente, y partiendo de un solo hamiltoniano, efectuamos cálculos autoconsistentes de Hartree-Fock para obtener la función de onda, la energía del estado base, y el parámetro de acoplamiento del gas de electrones, para cualquier valor de la distancia entre partículas r_s , es decir obtenemos explícitamente los valores de las observables físicas anteriores para toda la región de densidades, sin necesidad de interpolar.

Ondas de densidad de carga

Overhauser²³ introdujo el modelo de jalea deformable para la descripción de algunos materiales como Sodio y Potasio. En su trabajo inicial asegura que este sistema es homogéneo para densidades altas, pero es inestable frente a ondas de densidad de carga (ODC) en la región de densidades bajas. Es decir, asegura

que se puede encontrar una solución tipo ODC, más estable que las ondas planas en esta región. Este modelo se ha empleado en la descripción de diversos sistemas físicos, encontrándose que efectivamente, en muchos casos, existen ODC energéticamente más estables que las ondas planas en la zona de densidades bajas.^{26,47}

Inicialmente Overhauser propuso ODC en una sola dirección, indicando que un problema importante de resolver es la determinación de la dirección óptima para esta onda, la cual dependerá de las características específicas del sistema. Posteriormente se encontraron en la literatura sistemas que presentaban ODC también en dos y tres direcciones independientes.⁴⁸ Estas proposiciones resultan lógicas, ya que la mejor solución en cada caso depende de la simetría del sistema estudiado, que no es siempre unidireccional.

Algunos autores⁴⁹ siguen un método variacional, en el que se proponen como funciones de onda, ODC que dependen de diferentes parámetros, cuyo valor se determina variacionalmente en el cálculo de la energía. La forma matemática de las ODC puede variar mucho, dependiendo del método seguido por cada autor, análogamente el número de parámetros variacionales involucrados depende en muchos casos de las herramientas computacionales con que se cuente; ambos factores determinaran la aproximación de los resultados.

Es importante recordar que aquí estamos interesados únicamente en sistemas en tres dimensiones, sin embargo consideramos funciones de onda que puedan presentar localización de partículas a lo largo de una, dos o tres direcciones independientes.

En el capítulo I se mencionó que para mejorar la solución H-F homogénea de ondas planas, es conveniente proponer otros orbitales, pero resulta útil que estos contengan explícitamente un término de onda plana (OP), o que tengan una estructura matemática tal, que se recupere la solución homogénea de OP en la región de densidades altas, o cuando las interacciones sean despreciables.

En esta dirección una de las proposiciones más afortunadas son las ODC propuestas por Overhauser, que contienen explícitamente un término de OP; existen otras proposiciones en la literatura, algunas de ellas como ya indicamos, se determinan variacionalmente. En el capítulo I se mencionó también la importancia de encontrar un método sistemático que permita ir mejorando la proposición para los orbitales, ya que, por ejemplo, con el método variacional empleado en las referencias 49, existen varias proposiciones que podrían mejorar los cálculos obtenidos, pero no hay un camino natural para escoger la más adecuada. Cuando se considera la proposición de orbitales de la forma

$$\exp(i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) F(\mathbf{k}, \mathbf{r})$$

II.3

se debe proponer la forma explícita de F. La dependencia en \mathbf{k} , puede generar graves problemas operacionales, por este motivo, siguiendo la misma idea de la proposición de Bloch³ en su primera aproximación, para el gas de electrones en una red periódica, es frecuente proponer una función F que depende sólo de \mathbf{r} . Tanto la proposición de Overhauser como muchas otras en la literatura se

restringen a esta aproximación, que aquí también emplearemos. De acuerdo con la hipótesis de Wigner, aquí proponemos para $F(r)$ desarrollos en términos de funciones periódicas. Dependiendo de la simetría abordada en cada caso, empleamos el desarrollo apropiado. Calculamos la energía del estado base y la función de onda correspondiente, en esa forma determinamos la fase del plasma cuántico para cada valor de la distancia entre partículas. A fin de tomar en cuenta diferentes simetrías proponemos tres desarrollos para $F(r)$, todos ellos en términos de funciones coseno.

En el primer caso se considera la posibilidad de localización de partículas en una sola dirección; esta situación contiene como caso particular las ondas de densidad de carga propuestas por Overhauser y algunas otras que aparecen en la literatura,^{43,49} los orbitales son de la forma:

$$(1) \phi_{k,\lambda} = V^{-1/2} \chi_{\lambda} \exp[ik \cdot r] \sum_{n=0}^N C_n \cos(q_0 n r)$$

II.4

$r = e_1 x_1$, V es el volumen en el que se imponen las condiciones de periodicidad, q_0 es un parámetro que se determina cuando se impone que los orbitales satisfagan las ecuaciones de H-F, χ es la función de espín, n es un entero que nos indica donde se

corta el desarrollo y el vector unitario $\mathbf{n} = \mathbf{e}_1 n_1$.

El segundo desarrollo corresponde a sistemas con simetría planar, proponemos funciones de onda que puedan producir ondas de densidad de carga en dos direcciones perpendiculares.

$$(2) \phi_{\mathbf{k}, \lambda} = v^{-1/2} \chi_{\lambda} \exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}] \sum_{n_x=0}^N \sum_{n_y=0}^N C_{n_x n_y} \cos(q_0 n_x x) \cos(q_0 n_y y)$$

II.5

Con estos desarrollos se obtiene densidad homogénea a lo largo del eje Z, y se puede obtener localización de partículas con la simetría de una red cuadrada en el plano X-Y.

Finalmente el desarrollo más general corresponde a ondas de densidad de carga a lo largo de tres direcciones independientes, esta simetría corresponde a una red cúbica simple.

$$(3) \phi_{\mathbf{k}, \lambda} = v^{-1/2} \chi_{\lambda} \exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}] \sum_{n_x=0}^N \sum_{n_y=0}^N \sum_{n_z=0}^N C_{n_x n_y n_z} \left[\cos(q_0 n_x x) \right. \\ \times \cos(q_0 n_y y) \\ \left. \times \cos(q_0 n_z z) \right]$$

II.6

Una ventaja adicional de estos desarrollos es que estamos en condiciones de abordar muchas otras simetrías, por ejemplo: cúbica centrada en el cuerpo, cúbica centrada en las caras, tetragonal y ortorrómbica, sólo tenemos que asignar los valores adecuados a los índices n_i . Sin embargo, la simetría natural de este desarrollo corresponde a la red cúbica simple, por lo que es de esperarse que los mejores resultados desde el punto de vista energético, correspondan a esta red.

Aquí proponemos desarrollos en términos de funciones coseno, a diferencia de otras proposiciones que se encuentran en la literatura en términos de funciones con exponenciales,⁵⁰ debido a que hemos verificado que con estos desarrollos se simplifica considerablemente el cálculo computacional.⁵¹

Cálculo H-F de la energía del estado base del gas de electrones.

Inicialmente por medio de las ecuaciones de H-F, con las condiciones de ortonormalización de los espín-orbitales, se determina el valor del parámetro q_0 , posteriormente se determinan en forma autoconsistente los coeficiente C_n de cada uno de los desarrollos.

Con la solución autoconsistente, se puede calcular la energía del estado base y otras propiedades del estado base.

La solución de las ecuaciones de H-F para N cuerpos, con el método que aquí se propone, se ha reducido al problema matemático

de la determinación autoconsistente de los coeficientes C_n . La complicación matemática del problema dependerá del número de coeficientes C_n por determinar, sin embargo es importante indicar que el problema de N cuerpos planteado en esta forma se puede abordar y resolver con diferentes aproximaciones.

Los cálculos los iniciamos, en cada uno de los desarrollos, con un número reducido de términos, posteriormente modificando y adaptando el desarrollo algebraico y el programa computacional se aumentó el número de términos hasta obtener convergencia en los resultados obtenidos para los coeficientes C_n .

Si se escoge adecuadamente el desarrollo, esta convergencia se alcanza con pocos términos, en caso contrario se tiene que considerar un desarrollo con un número muy grande de términos.

La forma general de las ecuaciones de H-F que se resolvieron es:

$$\sum_{n_3} \left[\langle n_1 k_1 | T | n_3 k_1 \rangle - \sum_{n_2} \sum_{n_4} \langle n_1 k_1, n_2 k_2 | V | n_4 k_2, n_3 k_1 \rangle C_{n_2}^* C_{n_4}^* \right] C_{n_3} =$$

$$= E_{n_1} C_{n_1}$$

II.7

donde $n_1 = e_1 x + e_2 y + e_3 z$

A fin de satisfacer las ecuaciones de H-F con la condición de ortonormalización, el parámetro q_0 debe ser mayor o igual a $2k_F$, aquí seleccionamos el valor $2k_F$ por ser el energéticamente más adecuado.^{44, 49} Los coeficientes C_n se determinaron en forma autoconsistente con una aproximación de 10^{-6} con respecto a la última iteración.

Los cálculos se efectuaron para densidades altas, intermedias y bajas, como es costumbre los valores de la densidad se determinan por medio de la distancia promedio entre partículas r_s , medida en radios de Bohr.

La función de onda en la aproximación de H-F es el determinante de Slater de los espín-orbitales, que aquí designaremos por ϕ_1 .

Por lo tanto la energía de H-F será:

$$E_{HF} = \sum_{i=1}^N \langle \phi_i | T | \phi_i \rangle - \sum_{i,j=1}^N \langle \phi_i \phi_j | V | \phi_j \phi_i \rangle$$

II.8

la forma explícita de los elementos de matriz y las ecuaciones de H-F que se tengan que resolver dependerán del sistema escogido, y este se caracterizará por la proposición específica para ϕ_1 . Por otra parte, la ocupación de los estados definirá, entre otras cosas, si el sistema es paramagnético o ferromagnético.

Resultados.

Uno de nuestros principales intereses es determinar la transición de OP a ODC. Los criterios que se emplean en la literatura para la determinación del punto de transición son muy variados²⁷, aquí al igual que en otros trabajos, seguiremos fundamentalmente un criterio energético. Nos basamos en la diferencia de energía con respecto a la onda plana y en el comportamiento del parámetro de acoplamiento Γ . Consideramos como criterio auxiliar el comportamiento de la localización de partículas, este no es un criterio preciso debido a que cerca de la transición la localización no es apreciable, es necesario considerar densidades mucho más bajas que la densidad de la transición para observar claramente la localización. Los resultados para las propiedades antes mencionadas se presentan a continuación.

Inicialmente reportamos los resultados obtenidos para sistemas paramagnéticos. Se han considerado desarrollos con diferentes simetrías, en todos los casos se obtuvo que en estos sistemas se localizan las partículas a densidades bajas, ya que la solución H-F autoconsistente corresponde a ODC en esta región; sin embargo, la solución H-F autoconsistente que se obtiene por este método a densidades altas siempre es de ondas planas. Es decir, para valores pequeños de r_n todos los coeficientes C_n de los diferentes desarrollos fueron iguales a cero, con excepción de C_0 .

Primeramente presentamos el comportamiento de la energía por partícula. En las figuras II.4 y II.5 se muestran los resultados

para el desarrollo (1), que corresponde a una ODC en una dirección. Se realizaron cálculos para diferentes valores del índice superior en la suma del desarrollo, N a partir de 1. Aún para $N = 1$ se obtuvo una solución periódica con menor energía que la OP a partir de cierto valor de r_s . Se compararon los resultados para desarrollos con diferente N , obteniéndose convergencia en el cálculo de los coeficientes C_n con $N = 6$. Los resultados reportados en las figuras corresponden a $N = 6$.

En la figura II.4 se presenta la energía por partícula como función de r_s . Se presentan los resultados obtenidos en el intervalo de mayor interés, en la región de densidades bajas. La transición de densidad homogénea a densidad localizada se presenta en $r_s = 31.3$.

Se grafican también los resultados obtenidos con ondas planas y con otras funciones que se reportaron en la literatura,²⁴ y que presentan la misma simetría, entre ellas ODC tipo Overhauser, que resultan un caso particular de nuestros desarrollos.

En la figura II.5 reportamos la diferencia de energías con respecto a la solución homogénea de ondas planas, como habíamos indicado, la solución autoconsistente que obtenemos en la región de densidades altas sigue siendo la de ondas planas, por lo tanto esta diferencia de energías es igual a cero hasta el punto de transición. Este tipo de gráficas nos indican directamente el punto de transición y la ganancia en energía con respecto a la solución homogénea, para cualquier valor de r_s .

En la figura II.6 se presentan los resultados obtenidos con el

desarrollo (2), se muestra la diferencia de energía por partícula, con respecto a las ondas planas, correspondiente a una función de onda con simetría cuadrada; la transición de densidad homogénea a ODC en dos direcciones se presenta para un valor de r_c menor que para el caso anterior. Puede observarse también, que la ganancia en energía es mayor que la obtenida con ODC en una dirección. La solución reportada corresponde al desarrollo (2) en donde el límite superior en la suma es $N = 6$, que fue el valor de N donde se obtuvo convergencia. A pesar de que el índice superior en la suma es el mismo que empleamos con el desarrollo (1), el número de términos de este desarrollo es mayor que para ODC en una sola dirección.

Finalmente en la gráfica II.7 se presenta la diferencia de energía obtenida con el desarrollo (3). El número de términos en este desarrollo es mucho mayor que en los otros casos, y el problema matemático y computacional se complica considerablemente. Se muestran los resultados para desarrollos con diferente número de términos, correspondientes a diferentes valores del índice superior en las sumas correspondientes. Se puede observar que la ganancia en energía es mayor que en los casos anteriores, aún para valores pequeños de N . La transición se presenta en $r_c = 28.8$, 26.2 y 26.1 con los desarrollos correspondientes a $N = 1, 2$ y 3 respectivamente, y en $r_c = 26$ para $N = 4$ y 5. Podemos concluir que para estos desarrollos el punto de transición converge al valor $r_c = 26$. De las gráficas también se puede observar que con $N = 5$ se tiene una zona de convergencia desde el punto de

transición hasta r_g aproximadamente igual a 50.

En la figura II.8 se presenta la energía por partícula después de la transición, empleando desarrollos con 27, 64, 125 y 216 términos en los desarrollos, que corresponden respectivamente a $N = 2, 3, 4$ y 5 . Podemos observar dos resultados importantes, en primer lugar la ganancia en energía es muy grande, del orden de 10^{-2} Ry; en segundo lugar, pero posiblemente más importante, es la región de estabilidad que se puede observar en las gráficas con $N = 4$ y 5 ; se presenta un mínimo en la energía, no tan pronunciado como el que se presenta a densidades altas con OP, pero la presencia de una zona con presión no negativa, tiene un significado físico que es obviamente muy importante.

Se muestran también en esta gráfica otros resultados reportados en la literatura,^{52,43,11} para el gas de electrones en el modelo de Jalea, pero determinados por métodos diferentes.

En la referencia 11, Ceperley y Alder calculan las energías de correlación por medio de una simulación estocástica de la ecuación de Schrodinger. Sus resultados se consideran exactos y desde su publicación es frecuente encontrar que otros cálculos los toman como referencia obligada.

En la referencia 43, Aguilera-Navarro, Baker y De Llano reportan los resultados obtenidos con el método de aproximantes integrales. Como punto de partida emplean el desarrollo de la energía en función de r_g a densidades bajas y ajustan con los resultados del cálculo Monte Carlo de Ceperley y Alder.

En la referencia 52 Nagara, Nagata y Nakamura reportan la energía

que obtienen empleando los resultados de un cálculo Monte Carlo consistente con las energías libres de un sistema clásico, e incorporan posteriormente una corrección cuántica.

Estos cálculos ya fueron reportados⁵² y se indicó que tipo de comparación puede hacerse entre los resultados obtenidos con diferentes modelos, sin embargo es importante volver a aclarar aquí que si se comparan resultados calculados con diferentes modelos de un mismo sistema físico, debido a que las aproximaciones empleadas en cada modelo pueden ser diferentes, la comparación reflejará las diferencias entre las hipótesis asumidas en cada uno de ellos.

Finalmente, si se introducen correlaciones suponemos que las curvas de la energía se desplazarán hacia arriba, acercándose a los resultados ~~exactos~~ de Ceperley y Alder.

En conclusión, de todas las gráficas anteriores podemos afirmar que, de los sistemas que aquí hemos estudiado, el más estable energéticamente es el que tiene la simetría de una red cúbica simple. Adicionalmente observamos que la inestabilidad con respecto a ondas de densidad de carga con corrugación en tres direcciones perpendiculares se presenta para densidades mayores que los otros sistemas estudiados.

Los cálculos matemáticos y los programas computacionales desarrollados nos permiten obtener también los resultados individuales para la energía cinética y la energía potencial para cualquier valor de r_s , por lo tanto se puede calcular el parámetro de acoplamiento, Γ en forma inmediata.

En la figura II.9 se muestra el parámetro de acoplamiento Γ como función de r_n para ondas planas y para los tres desarrollos que aquí se proponen, empleando en cada caso el desarrollo que garantiza convergencia en el cálculo de la energía.

El comportamiento de Γ en la región de altas densidades, para todos los desarrollos, es el de una función lineal, como corresponde a una solución homogénea de onda plana.⁴¹ Posteriormente se presenta una discontinuidad en cada gráfica de Γ que nos indica, cual es el punto de transición de densidad homogénea a densidad periódica, este punto se determina en forma más precisa, por medio de la discontinuidad del parámetro Γ , que con el cálculo de las diferencias de energía presentado en las gráficas anteriores, se obtiene así un criterio adecuado para caracterizar la transición. Este hecho justifica el empleo del lenguaje de plasmas de una componente, en el cálculo de propiedades del estado base del gas de electrones.

Una vez determinados los coeficiente C_n de cada desarrollo para todo valor de r_n , se puede obtener, también en forma inmediata la distribución de carga electrónica ρ para cualquier valor de r_n . Obviamente, en todos los casos reportados, se presenta densidad homogénea antes de la transición y a partir de esta, poco a poco se van localizando las partículas como se muestra en las figuras. Debe mencionarse que dadas las características de los desarrollos presentados, la localización de las partículas se obtiene en el caso de ODC en una dirección, (desarrollo 1) en forma de una lámina corrugada a lo largo de la dirección de \mathbf{e}_0 ;

con las ODC en dos direcciones (desarrollo 2), la localización de partículas se presenta con la simetría correspondiente a una red cuadrada, en los planos escogidos para la corrugación; finalmente para las ODC en tres direcciones (desarrollo 3) se obtiene, como ya indicamos, la localización de partículas con la simetría de una red cúbica simple.

En la figura II.10 se muestran los resultados obtenidos con el desarrollo (1), para diferentes valores de r_s . Graficamos $\rho = |\psi|^2$ con respecto a la densidad de onda plana ρ_0 , en la dirección de q_0 . Mostramos la localización para $r_s = 35, 70$ y 100 . Puede observarse que conforme se consideran valores mayores de r_s , la localización va siendo cada vez más pronunciada.

En las figuras II.11 y II.12 se muestra ρ para el desarrollo (2), correspondiente a la simetría planar. Se escogió como plano de corrugación el plano X-Y. Lógicamente en los otros planos se observaría únicamente densidad de lámina corrugada, semejante a la que produce una ODC en una dirección, ya que a lo largo del eje Z no hay localización en este desarrollo. Se presentan resultados para $r_s = 60$ y 100 .

Debido a la simetría del sistema la localización de partículas, en el caso de ODC, en tres direcciones es igual en cualquiera de los planos XY, XZ, YZ, y es cualitativamente equivalente a la presentada en las gráficas II.11 y 12 para ODC en dos direcciones. La única diferencia se encuentra en el valor de los máximos obtenidos, ya que para las ODC en tres direcciones será más marcada la localización y los máximos serán mayores que para ODC

en dos direcciones.

Hasta aquí hemos presentado resultados para sistemas paramagnéticos, pero tenemos todos los resultados correspondientes a cada uno de los sistemas anteriores en la versión ferromagnética. Las conclusiones para estos sistemas son semejantes a las obtenidas para sistemas paramagnéticos, por lo que no reproducimos aquí todas las gráficas, solamente consideramos que es conveniente hacer una comparación entre los resultados para un sistema en sus versiones paramagnética y ferromagnética, a fin de determinar el carácter magnético más estable para cada valor de r_s , dentro del modelo y las aproximaciones empleadas.

En la gráfica II.13 se muestran nuestros resultados para las energías en la región de densidades intermedias y bajas, que se obtienen con el desarrollo (3) con $N = 5$, correspondiente a ODC en tres direcciones, tanto para el plasma paramagnético como para el ferromagnético.

Como en los otros casos, las soluciones autoconsistentes que se obtuvieron en la región de densidades altas son ondas planas; en esta región es bien conocido el resultado general que se obtiene con soluciones homogéneas; sabemos que la solución paramagnética de OP es más estable que la correspondiente ferromagnética a muy altas densidades, hasta $r_s = 5.47$ y posteriormente, para valores mayores de r_s siempre es más estable la solución ferromagnética de OP.

Aquí encontramos que en la región de densidades intermedias y

bajas la solución autoconsistente para sistemas ferromagnéticos presenta una localización semejante a la que se obtuvo con sistemas paramagnéticos, encontrándose la transición a soluciones periódicas en $r_s = 33$, posterior a la transición paramagnética que se presenta en $r_s = 26$.

Los resultados para la energía nos indican que el sistema ferromagnético es energéticamente más estable que el correspondiente paramagnético en la región de densidades intermedias, hasta que se presenta la transición a función periódica paramagnética, en $r_s = 26$. A partir de ese valor tenemos una pequeña región en la cual se invierten los papeles, el sistema paramagnético es más estable. Esta situación se modifica cuando se presenta la transición a función periódica en el sistema ferromagnético, es decir en $r_s = 33$; finalmente a partir de esta distancia entre partículas vuelve a ser el sistema ferromagnético el más estable. Es importante observar que además de tener una región estable, se obtiene, con este modelo, una región en la que se obtiene un valor menor para la energía en el sistema paramagnético que en el ferromagnético, a diferencia de los resultados obtenidos con OP. El comportamiento de los sistemas ferromagnéticos con las otras simetrías estudiadas es cualitativamente equivalente.

CAPITULO III. CALCULOS PARA GASES DE FERMIONES CON INTERACCION DE ALCANCE ARBITRARIO.

Las ventajas de un factor de pantalla.

Como indicamos en la introducción, es de esperarse que el comportamiento y características de los gases de fermiones serán diferentes si se modifica el alcance de la interacción involucrada, sin embargo es deseable contar con un método general que nos permita iniciar el estudio de diferentes sistemas, sin tener que precisar completamente la interacción.

Con el método empleado en el capítulo anterior para un plasma cuántico de una componente, se intenta estudiar en este capítulo algunos otros gases de fermiones.

Como punto de partida debemos determinar que tipo de interacciones entre partículas se puede emplear para generalizar el método. La forma matemática de la interacción coulombiana nos permite modificarla fácilmente, por medio de un factor de pantalla $e^{-\mu r}$, de manera que asignando diferentes valores al parámetro de apantallamiento μ , podemos simular interacciones con cualquier alcance, inclusive podemos considerar valores de μ tales que el alcance adquiera un valor menor que la distancia entre partículas, en este caso la interacción es prácticamente equivalente a una interacción delta, por lo tanto esta forma de interacción resulta conveniente para nuestros cálculos.

Una vez establecida la forma general del potencial se puede abordar el problema de la determinación de las características del estado base de gases de fermiones que interactúan por medio de potenciales con alcance finito. Para este fin empleamos al igual que en el capítulo anterior, el modelo de jalea deformable. Tanto el potencial coulombiano apantallado, como el coulombiano puro, corresponden a interacciones entre pares de partículas que dependen sólo de la distancia entre ellas, ya que el factor de pantalla no modifica esta dependencia, por lo tanto podemos trabajar con este potencial, en el modelo de jalea deformable sin tener que efectuar ninguna modificación o aproximación adicional en el proceso.

Para el caso particular en que se considere únicamente el estudio de sistemas de Coulomb, pero con alcance finito, es decir simplemente como una extensión al problema del plasma cuántico de una componente, el apantallamiento se puede interpretar como la introducción de correlaciones estáticas.²²

Tenemos otra ventaja al introducir el apantallamiento en este sistema, es bien conocida la divergencia logarítmica en la densidad de estados²², que presentan los sistemas de Coulomb en el nivel de Fermi, cuando los orbitales son ondas planas y se trabaja en la aproximación de Hartree-Fock. Dicha divergencia impide abordar el estudio de propiedades de transporte del sistema, por lo tanto por diferentes métodos se ha tratado de eliminar.

Se ha demostrado⁵³ que con potenciales de Coulomb, si nos mantenemos en la aproximación H-F, la divergencia persiste, aun

con funciones de onda diferentes de las ondas planas; sin embargo cada función de onda propuesta introduce una modificación característica en el comportamiento de $E(k)$ cerca del nivel de Fermi.

Otro mecanismo para eliminar la divergencia consiste en ir más allá de H-F, pero el precio es alto, pues se pierde toda la simplicidad que nos da una teoría de partícula independiente.

Se han encontrado también otros caminos, entre ellos destaca, el método LSDA (local-spin-density approximation) en el que se introduce un apantallamiento efectivo que elimina la divergencia en el nivel de Fermi.⁵⁴ Sin embargo, con esta aproximación el apantallamiento resulta exagerado y los resultados para la densidad de estados no son aceptables. Con el fin de corregir este problema, frecuentemente se introduce la corrección SIC (self-interaction correction) a LSDA, que reduce el apantallamiento efectivo.⁵⁵

Con la proposición que aquí se presenta, nos mantenemos en el modelo de partícula independiente, y estamos en condiciones de introducir un potencial coulombiano apantallado, con un factor de pantalla tan pequeño como se quiera, de manera que se evita la divergencia en el nivel de Fermi, se simula la presencia de correlaciones estáticas y se pueden obtener valores razonables para la densidad de estados.

Estas son algunas de las ventajas que se tienen si nos limitamos al estudio de sistemas de Coulomb, sin embargo la importancia fundamental del planteamiento de este capítulo radica en el hecho

de que estamos en condiciones de abordar del estudio de gases de fermiones muy diferentes con el método empleado en el capítulo anterior para el gas de electrones con interacción de alcance infinito.

Generalización del método empleado para el gas de electrones. Tratamos de seguir al camino que nos permitió describir el estado base del gas de electrones, a fin de desarrollar un formalismo para estudiar sistemas que interaccionan a través de potenciales de cualquier alcance.

Se proponen desarrollos para la función de onda con diferentes simetrías, de manera que se puedan presentar soluciones semejantes a las ondas de densidad de carga en una, dos y tres direcciones perpendiculares, análogos a los empleados en el capítulo anterior. Es importante recordar que cuando hablamos de Ondas de densidad de carga en estos sistemas, empleamos el término *carga* en la forma general descrita en el capítulo I, al introducir el modelo de jalea deformable.

Se construyeron y se resolvieron en forma autoconsistente, las ecuaciones de H-F correspondientes, que ahora dependen también del parámetro μ .

Una vez determinadas las funciones de onda para cada valor de μ , en una amplia región de densidades, se calculó para cada caso la energía por partícula, al igual que otras propiedades del estado base.

Tanto los desarrollos algebraicos como los programas

computacionales se elaboraron de manera que tienen tal versatilidad que, con pocas modificaciones, podemos obtener información para sistemas extremadamente diferentes.

Cada sistema lo caracterizamos por la simetría de la función de onda propuesta, por el alcance de la interacción y por el valor de la distancia entre partículas. Cada una de estas características, así como la aproximación de los cálculos se determinó en la siguiente forma:

- i) la simetría se determina por el desarrollo propuesto para los orbitales, podemos obtener ondas de densidad de carga en una, dos o tres direcciones. Aquí solamente se han considerado estructuras cuadradas para las ODC en dos direcciones y simetría cúbica simple para las ODC en tres direcciones, sin embargo, al igual que en los sistemas de Coulomb, aquí también puede abordarse el estudio de sistemas con otras estructuras cristalinas, por ejemplo con ODC en dos direcciones podemos describir estructuras rectangulares, triangulares y hexagonales; y con ODC en tres direcciones se pueden describir sistemas con simetrías cúbica centrada en el cuerpo, cúbica centrada en las caras, tetragonal y ortorrómbica
- ii) el número de términos en el desarrollo, que indica la aproximación con la que se trabaja, hasta que se alcanza la convergencia en el cálculo de los coeficientes C_n . Una vez alcanzada la convergencia los resultados no dependen del número de términos del desarrollo.
- iii) el alcance de la interacción se caracteriza por el factor de pantalla μ , medido en unidades de $2k_f$; se considera valores de μ

tales que la interacciones puedan ser de largo, mediano y corto alcance.

iv) la distancia promedio entre partículas se caracteriza por el valor r_p ; se pueden efectuar los cálculos para cualquier valor de r_p , sin embargo aquí se restringen los cálculos a la región más interesante, donde se puede presentar el cambio de densidad homogénea a densidad periódica.

Localización de partículas.

El primer resultado que nos interesa generalizar para sistemas que interaccionan con un potencial de alcance finito, es la posible transición de fase a densidades bajas, semejante a la propuesta por Wigner para el gas de electrones con fondo homogéneo.

A pesar de que el planteamiento del problema matemático es muy semejante al del plasma cuántico de una componente, las diferencias cualitativas son muy importantes, ya que físicamente es muy diferente un conjunto de partículas cuya interacción es de alcance infinito y otro conjunto de partículas cuya interacción está representada por un potencial delta. Entre estos dos extremos se pueden estudiar una gran variedad de sistemas físicos cuyo comportamiento se espera que sea muy diferente.

A partir de un hamiltoniano semejante al del gas de electrones, introduciendo el potencial coulombiano apantallado, con un factor de pantalla μ , se irán asignando diferentes valores de μ a fin de describir diferentes sistemas.

Siguiendo el procedimiento del capítulo II, con las modificaciones

introducidas por el nuevo potencial, se plantean las ecuaciones de H-F correspondientes, para cada uno de los valores de μ . Cuando el factor de pantalla tiende a cero, se recuperan los resultados del capítulo II. Posteriormente al asignar valores diferentes a μ , se determina la dependencia del alcance de la interacción en el comportamiento del sistema, en particular en la localización de partículas a densidades bajas, a fin de saber si con el método propuesto aquí, existen algunos valores del factor de pantalla para los cuales es posible obtener localización de partículas análoga a la cristalización obtenida para el gas de electrones.

Criterios para determinar la transición.

En el capítulo I mencionamos que existen en la literatura muchos y muy variados criterios para determinar el valor de r_s de la transición al cristal de Wigner,²⁷ análogamente para determinar la transición en estos sistemas que interaccionan por medio de potenciales de menor alcance, los criterios pueden ser semejantes. En este trabajo se han considerado fundamentalmente tres criterios:

i) En primer lugar se considera el criterio energético, se calcula la diferencia de energía del estado base entre el sistema homogéneo y el sistema inestable ante ondas de densidad de carga, sabemos que a partir del valor de r_s para el cual esta diferencia de energía es apreciable, la solución localizada será energéticamente más estable.

ii) Otro criterio se obtiene a partir del parámetro de

acoplamiento Γ , el comportamiento de Γ como función de r_{c} permite precisar la transición, ya que al igual que para el gas de electrones, en todos los sistemas estudiados, este parámetro presenta una discontinuidad muy clara en los puntos de transición.

iii) Como último criterio se considera la localización de las partículas, calculando $\rho = |\Psi|^2$, para distintos valores de r_{c} , en esta forma puede observarse para que valor se inicia la localización de las partículas; este último cálculo tiene la ventaja de que indica geoméricamente, como está acomodado el sistema, que tipo de estructura se formó. Sin embargo sería difícil determinar la transición sólo con este criterio, ya que la localización no es muy apreciable cerca de la r_{c} crítica, sólo al trasladarnos a densidades menores se va acentuando.

La energía del estado base como función del factor de pantalla. Se calculó y se graficó la energía del estado base, en la región de densidades altas, intermedias y bajas, para diferentes simetrías y con diferentes valores del parámetro de apantallamiento μ .

Como resultado general se puede mencionar que los sistemas energéticamente más estables, en todas las simetrías estudiadas, son aquellos para los que el potencial es de mayor alcance.

En la figura III.1 graficamos la energía del estado base como función de r_{c} , y en la figura III.2 la ganancia normalizada de energía $\Delta E / E(\text{OP}) = [E(\text{OP}) - (\text{ODC})] / E(\text{OP})$. En ambos casos, se consideran sistemas que presentan ondas de densidad de carga en

una sola dirección. Mostramos las gráficas para diferentes valores del factor de pantalla, μ medido en unidades de $2k_F$. Seleccionamos en este caso, valores que representan interacciones de largo, de intermedio y de corto alcance. La convergencia en el cálculo de los coeficientes C_n , se obtuvo en todos los casos para $N = 6$, como índice superior en la suma del desarrollo (1), que coincide con el número de términos con los que se obtuvo convergencia para el gas de electrones. En la gráfica se presentan solamente los resultados correspondientes a $N = 6$.

A partir de estos resultados vemos que el comportamiento cualitativo de los sistemas que interactúan por medio de potenciales de alcance finito es semejante al de sistemas coulombianos, sin embargo, cuando el factor de pantalla es muy grande, el rompimiento de simetría se presenta para densidades extremadamente bajas, de tal forma que los resultados para sistemas físicos en esa región son de menor interés.

Tomando en cuenta este resultado, nos restringimos a valores pequeños de μ , para los cálculos en sistemas con simetría cuadrada y cúbica simple. Esta elección se justifica claramente al estudiar la densidad de estados.

En la figura III.3 presentamos los resultados para la diferencia de energía por partícula $\Delta E = E(OP) - E(ODC)$, que se obtienen cuando se propone como solución ondas de densidad de carga en dos direcciones perpendiculares. Como puede observarse el comportamiento para sistemas que presentan ondas de densidad de carga en una o dos direcciones es cualitativamente equivalente,

sin embargo, para un valor de μ determinado, la transición para ODC en dos direcciones se presenta en un valor menor de r_s . Este resultado es semejante al que se obtuvo para el gas de electrones. Finalmente presentamos los resultados para la función de onda energéticamente más estable. Dado un factor de pantalla μ , el sistema con ondas de densidad de carga en tres direcciones presenta la transición de densidad homogénea a densidad localizada para un valor menor de r_s , comparado con los sistemas que corrugan en dos y una dirección, y la ganancia en energía es claramente mayor. Los resultados se presentan en la figura III.4.

El parámetro de acoplamiento como función del alcance de la interacción y de la distancia entre partículas.

Al igual que para el gas de electrones, también para otros gases de fermiones, el cálculo del parámetro de acoplamiento Γ nos proporciona información relevante del sistema, en particular resulta muy útil para determinar, en forma precisa el valor de la distancia entre partículas r_s , al que se presenta la transición de densidad homogénea a densidad localizada.

En la región de densidades altas el parámetro de acoplamiento Γ , de todos los sistemas estudiados presenta una dependencia lineal en r_s , la pendiente de cada una de estas rectas se va modificando al cambiar el valor del parámetro de apantallamiento μ , conforme aumenta μ , r_s disminuye; esta dependencia lineal corresponde a la solución de densidad homogénea. A partir de los puntos de transición, se presenta una brusca caída en el valor de Γ , este

comportamiento se obtiene para todas las simetrías y para todos los valores de μ . El comportamiento cualitativo es el mismo, pero la forma explícita de cada curva depende de μ y de la simetría de las soluciones. En las figuras III.5 y III.6 se presenta Γ como función de r_s con diferentes valores de μ , para ODC en dos y tres direcciones respectivamente. Podemos afirmar que en general el comportamiento del parámetro de acoplamiento Γ de estos gases de fermiones, es semejante al del gas de electrones a pesar de la reducción en el alcance de la interacción, cuando se consideran valores grandes de μ . En la figura III.6 no presentamos la región lineal, se grafica Γ a partir de la transición.

En las figuras III.7 graficamos en el plano $\mu - r_s$, el comportamiento de los puntos de transición en función del parámetro μ . En la figura III.7 (a) se reportan los resultados para ODC en una dirección y en la figura III.7 (b) para ODC en tres direcciones.

Es importante mencionar que los resultados reportados corresponden a valores de r_s menores de 200, ya que no consideramos que los resultados para densidades menores puedan ser de interés, sin embargo, debido a que es frecuente encontrar en la literatura reportes de cálculos para densidades aún más bajas, estamos en condiciones de efectuar los cálculos correspondientes para cualquier valor de r_s .

La localización como función del alcance de la interacción.
Tanto las gráficas de la energía como las del parámetro de

acoplamiento Γ , nos indican que en todos los casos, para todas las simetrías y para todos los alcances considerados se obtuvo una transición de densidad homogénea a densidad localizada.

El punto de transición se va desplazando a la región de densidades bajas conforme aumenta el factor de pantalla, pero en este modelo siempre se obtiene localización de partículas para los diferentes gases de fermiones. A partir del punto de transición se aprecia el cambio de densidad homogénea, pero es para densidades más bajas que podríamos decir que realmente están localizadas las partículas.

En la figuras III.8 y III.9 se muestra la densidad de partículas para diferentes valores de r_s , para ondas de densidad de carga en una dirección. En la figura III.8 se muestran los resultados muy cerca de la transición, en esta región la localización de lámina corrugada es poco apreciable. En la figura III.9 se muestra la densidad de lámina corrugada, en un plano que contiene la dirección de corrugación, para un valor de r_s en el que la localización ya es muy clara.

Finalmente en las figuras III.10 a III.12 se presentan los resultados que se obtuvieron con ODC en tres direcciones independientes. Debido a la simetría del sistema los resultados son iguales para los planos XY, YZ y XZ. La localización corresponde a la de una red cúbica simple; inicialmente la distribución de partículas es casi homogénea, como se observa en la figura III.10, pero se va acentuando conforme aumenta r_s , como puede observarse en los siguientes resultados.

En las figuras III.11 (a) y (b) presentamos la localización de partículas en el plano XY, para un sistema con $\mu = 0.1$, en $r_s = 40$ y 80 respectivamente. A pesar de que podemos considerar que $r_s = 40$ corresponde a una densidad cercana a la transición, la localización es muy clara, el máximo tiene una altura de 174.0; pero en $r_s = 80$ el máximo ya tiene un valor de 579.17; en la figura III.11 (c) presentamos los resultados para un sistema con la misma simetría, en $r_s = 40$, pero con un parámetro de apantallamiento mucho menor, $\mu = 0.01$, los máximos alcanzan el valor 176.28, muy cercano al valor obtenido con $\mu = 0.1$, pero mayor, como era de esperarse.

En las figuras III.12 (a) y (b) presentamos otras gráficas que ilustran el comportamiento de la localización de partículas para diferentes valores de μ y de r_s . En la figura III.12 (a) mostramos los resultados con $\mu = 0.03$, en $r_s = 80$, el máximo tiene un valor de 580.26, mayor que el obtenido con $\mu = 0.1$, que corresponde a un alcance menor, sin embargo la diferencia es muy pequeña. En la figura III.12 (b) se muestran los resultados correspondientes a un alcance mayor, con $\mu = 0.01$ para el mismo valor de $r_s = 80$. Puede observarse que no se aprecia la diferencia entre los resultados con $\mu = 0.01$ y 0.03 , el máximo es igual a pesar de la diferencia en el factor de pantalla. Algo semejante ocurre con los resultados de la diferencia de energías, realmente sólo en los resultados de la energía misma se puede observar diferencias entre estos sistemas.

La densidad de partículas para ODC en dos direcciones, en el plano

de localización, es semejante a la presentada en estas últimas gráficas, sin embargo los valores máximos serán menores, comparados con los correspondientes para las ODC en tres direcciones.

Si graficamos la densidad de partículas para ODC en dos direcciones en cualquiera de los otros planos, obtendremos una localización de lámina corrugada semejante a la que mostramos en las figuras III.8 y 9, para ODC en una dirección, pero en este caso los máximos serán mayores.

Para cada simetría, el comportamiento del sistema es cualitativamente equivalente para diferentes valores de μ , sin embargo el punto de transición se aleja hacia densidades muy bajas conforme consideramos interacciones de menor alcance.

Si, por otra parte, nos fijamos en un valor de μ y observamos la localización de las partículas en los sistemas con diferente simetría, observamos que la localización va siendo más pronunciada al aumentar el número de direcciones de corrugación. Esto lo podemos verificar fácilmente al fijarnos en los máximos de las diferentes curvas. Por otra parte este resultado es lógico, ya que la ganancia en energía también es mayor para los sistemas que corrugan en más direcciones.

El factor de pantalla y la densidad de estados.

Hasta aquí hemos mencionado algunas ventajas que se obtienen al introducir un potencial coulombiano apantallado. La primera y más evidente es que nos permite calcular con el mismo hamiltoniano,

con la misma teoría y prácticamente el mismo programa computacional, propiedades relevantes del estado base de gases de fermiones radicalmente diferentes.

Por otra parte, es bien conocido que la divergencia logarítmica de la densidad de estados que se presenta en el nivel de Fermi cuando trabajamos con OP, en la aproximación de H-F, es una consecuencia del largo alcance del potencial coulombiano, por lo tanto con un potencial de alcance infinito no se puede abordar el estudio de propiedades de transporte del sistema, ni de ninguna otra propiedad sensitiva al valor de la densidad de estados en el nivel de Fermi.

Ya mencionamos al principio de este capítulo, que se ha demostrado que esta divergencia no se puede eliminar por medio de funciones de onda diferentes de las ondas planas, es necesario modificar el alcance de la interacción para eliminar la divergencia y poder abordar el estudio de las propiedades de transporte.⁵³

Por lo tanto, con la introducción del potencial apantallado en el estudio de los gases de fermiones, conseguimos adicionalmente eliminar la divergencia del gas de electrones en el nivel de Fermi.

A fin de analizar el comportamiento logarítmico de la densidad de estados, seguimos la aproximación esférica sugerida por Harrison en la referencia 54 para el cálculo aproximado de la densidad de estados, que en este caso resulta proporcional a: $\left[k^2 / | \nabla E_k | \right]$.

La dependencia de μ en la densidad de estados, en esta

aproximación, se presenta en términos de la forma⁵⁶

$$\text{Ln} \left[\frac{\mu^2}{1 + \mu^2} \right]$$

por lo tanto la divergencia logarítmica en k_F se puede eliminar con valores muy pequeños del parámetro de apantallamiento, aún con $\mu = 10^{-9}$, que prácticamente reproduce la interacción coulombiana. Las gráficas de las funciones obtenidas para valores muy pequeños de μ , presentan una curvatura semejante a la que se obtiene para $\mu = 0$. Conforme μ aumenta, dicha curvatura se va modificando lentamente hasta un valor determinado de μ , que depende de la simetría de la solución, en el caso de ODC en dos direcciones este valor es $\mu = 0.03$. A partir de este valor del parámetro de apantallamiento la curvatura de la función se modifica drásticamente, debido a que el alcance de la interacción se ha reducido demasiado, si queremos seguir describiendo sistemas de Coulomb, este comportamiento de la densidad de estados se considera anómalo y los valores que se obtendrían para las propiedades de transporte se alejan mucho de los que pueden esperarse para estos sistemas.

Por lo tanto, sólo para valores pequeños de μ , menores del valor para el cual el comportamiento de la densidad de estados se modifica, se puede contemplar el cálculo de propiedades de transporte de sistemas de Coulomb, dentro del modelo y las aproximaciones que aquí se han empleado.

Para otros gases de fermiones, cuya interacción es de menor alcance, sigue siendo adecuada esta descripción, para valores mayores de μ .

En las figuras III.13 y III.14 mostramos las curvas correspondientes a ODC en dos direcciones para $\mu = 0.01$ y 0.03 para $r_s = 35$ y 60 respectivamente. El comportamiento que se obtiene para sistemas con otras simetrías y para otros valores de r_s es cualitativamente equivalente.

Los cálculos numéricos se efectuaron en la Burroughs B7800 de la Dirección General de Cómputo Académico de la U.N.A.M.

CONCLUSIONES.

En el marco de la Mecánica Cuántica con la aproximación de Hartree-Fock, se ha desarrollado un método general para describir propiedades del estado base de gases de fermiones, que interaccionan por medio de potenciales de alcance arbitrario, en el modelo de jalea deformable.

Este método tiene la ventaja de que, manteniéndonos en la aproximación de partícula independiente, nos permite determinar en forma autoconsistente soluciones H-F con diferentes simetrías, todas ellas energéticamente más adecuadas que la solución de partícula libre y otras soluciones variacionales que se han reportado en la literatura.

A partir de las soluciones obtenidas se pueden calcular propiedades del estado base de los gases de fermiones estudiados, para cualquier densidad de partículas, sin necesidad de interpolar resultados de densidades altas y bajas.

Los resultados obtenidos nos indican que:

- i) todos los sistemas de Coulomb estudiados, en la aproximación de partícula independiente y dentro del modelo de jalea deformable cristalizan a densidades bajas, tanto en el caso paramagnético como en el ferromagnético, y
- ii) para todos los gases de fermiones con interacciones de alcance arbitrario estudiados, también en la aproximación de partícula independiente y con el modelo de jalea deformable, debido a que la interacción efectiva que proviene del término de intercambio es

atractiva, se produce un rompimiento de simetría que localiza a las partículas a densidades bajas.

Como conclusión podemos establecer la siguiente conjetura:

La hipótesis de cristalización de Wigner enunciada y buscada inicialmente para el gas de electrones en un fondo homogéneo, es un resultado particular de un hecho más general que se refiere a la competencia entre energía cinética y energía potencial, de gases de fermiones sumergidos en un fondo que los neutraliza.

A partir de los resultados obtenidos, consideramos que las condiciones que se requieren para establecer la localización de los fermiones en el modelo de partícula independiente son:

- 1) que la interacción sea entre pares de partículas y dependa de la distancia entre las mismas,
- 2) que la interacción efectiva sea atractiva,
- 3) que se mantenga el sistema en un régimen cuántico,

si esto se satisface, a condición de ir a densidades suficientemente bajas siempre se encontrará un valor de r_s para el cual la distribución de partículas cambia de homogénea a localizada.

La introducción de correlaciones puede cambiar esta situación, pero partir de una buena solución de partícula independiente es la mejor forma de iniciar un cálculo con correlaciones.

REFERENCIAS

- 1.- A.L. Fetter y Walecka, *Quantum Theory of Many Particles Systems*, Mc Graw Hill, New York, 1971.
- 2.- C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, Wiley, New York, 1971.
- 3.- J. M. Ziman. *Principles of the Theory of Solids*, Cambridge University Press, 1972.
- 4.- A. W. Overhauser, *Phys. Rev. Lett.* **4**, 415 (1960); H.J. Lipkin, *Quantum Mechanics*, North-Holland, 1973.
- 5.- S. Ichimaru, H. Iyetomi y S. Tanaka, *Phys. Rep.* **149**, 91 (1987)
- 6.- H. M. Van Horn, *Phys. Today* **32**, 23 (1979)
- 7.- J.M. Ziman, *Elements of Advanced Quantum Theory*, Cambridge University Press, 1969.
- 8.- D. Pines y P. Nozieres, *The Theory of Quantum Liquids*, Benjamin, New York, 1966.
- 9.- P. Hohenberg y W. Kohn, *Phys. Rev.* **136**, 864 (1964); W. Kohn y L. J. Sham, *Phys. Rev.* **140**, 1133 (1965)
- 10.- W. L. Slattery, G. D. Doolen y H. E. De Witt, *Phys. Rev. A* **21**, 2087 (1980); **26**, 2255 (1982).
- 11.- D. M. Ceperley y B. J. Alder, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 566 (1980).
- 12.- H. A. Bethe y R. W. Jackiw, *Intermediate Quantum Mechanics*, W. A. Benjamin, 1968.
- 13.- C. C. J. Roothann, *Rev. Mod. Phys.*, **23**, 69 (1951).
- 14.- P. W. Atkins, *Molecular Quantum Mechanics*, Oxford

University Press, 1970.

- 15.-C. Froese Ficher, *The Hartree-Fock Method for Atoms*, Wiley-Interscience, N. Y. 1977.
- 16.-M. de Llano, A. Plastino, y J. G. Zabolitzky, *Phys. Rev. C*, **20**, 2418 (1979).
- 17.-A. Cabrera, M. A. Ortiz, A. Calles y R. M. Mendez-Moreno, *Rev. Mex. Fis.* **31**, 17 (1984).
- 18.-V. C. Aguilera-Navarro, et al *Phys. Rev. A* **15**, 1256 (1977); S. M. Blinder, *Phys. Rev. A* **37**, 973 (1988)
- 19.-G. Gutiérrez, A. Plastino and G. Zannoli, *Phys. Rev A* **23**, 1558(1981); J. Voit, *J. Phys. C* **21**, L1141 (1988).
- 20.-Y. Takada, *Phys. Rev. B* **30**, 3882 (1984); H. K. Sim, R. Tao y F. Y. Wu, *Phys. Rev. B* **34**, 7123 (1986); Y. Saito y H. Muller-Krumbhaar, *Phys. Rev. B* **23**, 308 (1981); R. M. Méndez-Moreno, M. Moreno y M.A. Ortiz, FERMILAB-PUB-90/142-T.
- 21.-E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, Wiley, 1970.
- 22.-J. L. Inkson, *Many-Body Theory of Solids*, Plenum Press, 1984.
- 23.-A. W. Overhauser, *Phys. Rev.* **167**, 671 (1968).
- 24.-R. G. Barrera, M. Grether y M. de Llano, *J. Phys. C* **12**, L715 (1979).
- 25.-M. A. Ortiz y R. M. Mendez-Moreno, *Phys. Rev. A* **36**, 888 (1987).
- 26.-E. P. Wigner, *Phys. Rev.* **46**, 1002 (1934); E. P. Wigner, *Trans. Faraday Soc.* **34**, 678 (1938)
- 27.-C. M. Care y N. H. March, *Adv. Phys.* **14**, 101, (1975); X. C.

- Zeng y D. Stroud, Phys. Rev. A **39**, 4761 (1989)
- 28.-M. W. Cole y M. H. Cohen, Phys. Rev. Lett. **23**, 1238 (1969)
- 29.-V. B. Shikin, Zh. Eksperim. i Teor. Fiz. **50**, 1748 (1970)
- 30.-R. S. Crandall y R. Williams, **34A**, 404 (1971)
- 31.-M. A. Stan y A. J. Dahm, Phys. Rev. B **40**, 8995 (1989);
Motohiko Saitoh, Phys. Rev. B **40**, 810 (1989); G. Deville, A.
Valdes, E. Y. Andrei, F. I. B. Williams, Phys. Rev. Lett **53**,
588 (1984).
- 32.-R. Williams y S. R. Crandall. **40A**, 225 (1974); R. Williams,
R.S. Crandall y P. J. Wojtowicz, Phys. Rev. Lett. **37**, 348 (1976)
- 33.-D. W. Schaefer y B. J. Ackerson, Phys. Rev. Lett. **35**, 1448
(1975)
- 34.-D. Hone, J. Phys. (Paris), Colloq. **46**, C3-21 (1985).
- 35.-D. A. Weitz, W. Z. Dozler y P. M. Chaikin, J. Phys. (Paris),
Colloq. **43**, C3-257 (1985).
- 36.-A. Khurana, Phys. Today, ,17(diciembre 1990);V.J. Goldmann,
M. Santos, M. Shayegan, J.E. Cunningham, Phys. Rev. Lett.**65**,
2189(1990); F.I.B. Williams, P.A. Wright, R.G. Clark,
E.P. Andrei, G. Devill, D.C. Glatti, O. Probst, B. Etienne,
C. Dorin, C.T. Foxon y J.J. Harris,enviado a Phys. Rev. Lett.
- 37.-S.G. Brush, H. L. Sahlin y E. Teller, J. Chem. Phys. **45**, 2102
(1966) ; J. W. Lee y F. H. Ree, Phys. Rev. A. **30**, 5714 (1988) ;
X. C. Zeng y D. Stroud, Phys. Rev. A, **39**, (1989) ; J. Hong,
J. Park y M. H. Lee, Phys. Rev. B, **40**, 1528 (1989) ; G. S.
Stringfellow, H. E. De Witt y W. L. Slatery, Phys. Rev. A **41**,
1105 (1990).

- 38.-S. Ichimaru, Rev. Mod. Phys. **54**, 1017 (1982)
- 39.-M. Gell Mann y K. A. Brueckner, Phys. Rev. **106**, 364 (1957)
- 40.-J. W. Carr y A. A. Maradudin, Phys. Rev. **133**, A371 (1964)
- 41.-R. A. Coldwell-Horsfall y A. A. Maradudin, J Math. Phys. **1**,
395 (1960).
- 42.-W. J. Carr, R. A. Coldwell-Horsfall y A. E. Fein, Phys. Rev.
124, 747 (1961)
- 43.-V. C. Aguilera-Navarro, A. Baker y M. de Llano, Phys. Rev. B
32, 4502 (1985)
- 44.-R. M. Mendez-Moreno, M. A. Ortiz y M. Moreno, Phys. Rev. A
40, 2211 (1989). S. Misawa, Phys. Rev. **140**, A1645(1965);
- 45.-L. Hedin, Phys. Rev. **139**, A 796 (1965)
- 46.-R. M. Mendez-Moreno y M. A. Ortiz, Rev. Mex. Fis. **34**, 47
(1988).
- 47.-V. C. Aguilera-Navarro et al, Kinam **1**,441 (1979)
- 48.-L. M. Sander, J. H. Rose y H. B. Shore, Phys. Rev. B, **21**,
2739 (1980) ;S. Orozco, R. M. Méndez-Moreno y M. A. Ortiz,
Phys. Rev. A, **41**, 5473 (1990).
A. W. Overhauser, Phys. Rev. **167**,691 (1968)
- 49.-R. Barrera, M. de Llano, S. Peltier y A. Plastino, Phys. Rev. B
10, 2931 (1978); R. M. Méndez-Moreno et al, Phys. Rev. A **20**,
3561 (1983)
- 50.-G. Gutiérrez y A. Plastino, Phys. Rev. C. **25**, 1028 (1982) ;
R. Barrera et al, **10**, 2931 (1978) ; M. A. Ortiz y R. M.
Méndez-Moreno, Rev. Mex. Fis. **34**, 577 (1988).
51. R. M. Mendez-Moreno, M. A. Ortiz y M. Moreno, Phys. Rev. A, **40**,

2211(1989)

- 52.-H. Nagara, Y. Nagata y T. Nakamura, Phys. Rev. A **36**, 1859 (1987).
- 53.-R.M. Méndez-Moreno y M.A. Ortiz, Rev. Mex. Fis. **32**, 413(1986)
- 54.-J. G. Harrison, Phys. Rev. B **35**, 987 (1987)
- 55.-R. A. Heaton, J. G. Harrison y C. C. Lin, Phys. Rev. B, **28**, 5992 (1983) ; M. R. Norman y J. P. Perdew, Phys. Rev. B **28**, 2135 (1983).
56. R. M. Méndez-Moreno, S. Orozco, M.A. Ortiz y A. Ramirez, Rev. Mex. Fis. **35**,346 (1989).

PIES DE TABLAS

TABLA I.1 Se presentan algunos valores de r_s reportados en la literatura, para la transición de densidad homogénea a densidad localizada.

PIES DE FIGURAS

FIGURA II.1 Gráfica de la energía del estado base en la región de densidades altas, calculada a partir del desarrollo de Gell-Mann y Brueckner, con los términos adicionales calculados por Carr y Maradudin. Se incluyeron únicamente los 5 primeros términos.

FIGURA II.2 Gráfica de la energía del estado base en la región de densidades bajas, obtenida con el desarrollo de Caldwell y Maradudin. Se incluyeron únicamente los primeros 4 términos.

FIGURA II.3 Se grafica la energía por partícula para el estado base de un gas de electrones ferromagnético, en la región de densidades altas, empleando el desarrollo de Madin. Se consideran solamente 6 términos.

FIGURAS II.4 Se presenta la energía por partícula como función de r_1 , correspondiente a una onda de densidad de carga en una dirección. Se considera el intervalo en el que se produce la transición de densidad homogénea a densidad de lámina corrugada. La curva continua presenta los resultados obtenidos con el desarrollo (1), la curva discontinua muestra los resultados de onda plana, y la curva -.-.-.- corresponde a los resultados reportados en la referencia 24, para funciones con la misma simetría.

FIGURA II.5 Se grafica la diferencia de energía por partícula con respecto a la solución de onda plana, obtenida para el estado base con ondas de densidad de carga en una dirección.

FIGURA II.6 Se grafica la diferencia de energía por partícula $\Delta E = E(OP) - E(ODC-2D)$ que se obtiene con ondas de densidad de carga en dos direcciones.

FIGURA II.7 Se muestran los resultados obtenidos para la diferencia de energía del estado base con ondas de densidad de carga en tres direcciones independientes. Se presentan los resultados correspondientes a diferentes aproximaciones, el número que clasifica a cada curva nos indica el valor del índice superior en la suma del desarrollo propuesto.

FIGURA II.8 Se presentan nuestros mejores resultados, desde el punto de vista energético, correspondientes a ondas de densidad de carga en tres direcciones independientes, se grafican también los resultados reportados en las referencias 11, 43 y 52.

FIGURA II.9 Se grafica el parámetro de acoplamiento Γ como función de r_p para ondas planas y para ondas de densidad de carga en una, dos y tres direcciones independientes. Inicialmente las funciones son lineales, en la región de altas densidades, ya que la solución autoconsistente obtenida en esa región es de ondas planas. La transición de densidad homogénea a densidad localizada está indicada por la discontinuidad en cada curva

FIGURA II.10 Se grafica la densidad de partículas ρ / ρ_0 , que se produce con ondas de densidad de carga en una dirección. Se consideran diferentes valores de la distancia promedio entre partículas, $r_p = 35, 70$ y 100 . ρ_0 es la densidad de partículas que se obtiene con ondas planas.

FIGURA II.11 Se presenta la localización de partículas en el plano XY, correspondiente a una onda de densidad de carga con simetría planar, para $r_p = 60$. Puede observarse la localización claramente, a pesar de que es un valor de r_p no muy alejado de la transición.

FIGURA II.12 Igual que en la Figura II.11, se presentan la localización de partículas, correspondiente a ODC en tres direcciones, aquí el valor de $r_p = 100$, está muy alejado de la transición. Comparando las gráficas 11 y 12 se puede observar que conforme aumenta r_p , la localización es más pronunciada.

FIGURA II.13 Se grafican los resultados obtenidos con ODC en tres direcciones, para la diferencia de energía por partícula para un gas de electrones paramagnético y el correspondiente ferromagnético, en un amplio intervalo de densidades. uede observarse en ambas curvas la presencia de una región de presión positiva. Otro resultado importante que se observa es la región donde la solución paramagnética es más estable que la ferromagnética.

FIGURA III.1 Se grafica la energía por partícula como función de r_p obtenida con ondas de densidad de carga en una dirección, para diferentes valores del parámetro de apantallamiento μ .

FIGURA III.2 Se presenta la ganancia normalizada de energía $\Delta E/E_0$ como función de r_p , obtenida con ondas de densidad de carga a lo largo de una sola dirección. E_0 es la energía de ondas planas. Se muestran los resultados para $\mu = 0, 0.4$ y 0.8 .

FIGURA III.3 Se presentan los resultados para la diferencia de energía por partícula, obtenida con ondas de densidad de carga en dos direcciones. Puede observarse que si consideramos valores de μ cada vez mayores, esta diferencia de energías es diferente de cero para valores mayores de r_1 .

FIGURA III.4 Aquí presentamos los mejores resultados desde el punto de vista energético para ΔE , corresponden a ondas de densidad de carga en tres direcciones. La curva continua se obtiene con $\mu = 0.1$, la curva discontinua con $\mu = 0.01$, en esta escala no se percibe la diferencia entre los resultados para $\mu = 0.01$ y 0.03 .

FIGURA III.5 Se presenta el parámetro Γ , para diferentes valores del alcance de la interacción, para sistemas inestables ante ondas de densidad de carga en dos direcciones. Puede observarse que, tal como ocurre con el gas de electrones, el comportamiento de Γ antes de la transición es lineal, ya que corresponde a la solución autoconsistente de ondas planas. La pendiente de las rectas disminuye al aumentar el valor del parámetro de apantallamiento μ . El comportamiento de Γ es cualitativamente equivalente para ODC en una dirección.

FIGURA III.6 Se grafica el parámetro de acoplamiento Γ correspondiente a ondas de densidad de carga en tres direcciones. Puede observarse que el comportamiento de Γ es análogo al que se presenta con ODC en dos direcciones.

FIGURA III.7 (a) y (b) Se grafican los puntos de transición en el plano $\mu-r_z$. En la figura III.7 (a) se presenta la gráfica para ODC en una dirección y en la figura III.7 (b) para ODC en tres direcciones.

FIGURA III.8 Se presenta la densidad de partículas ρ / ρ_0 , correspondiente a una onda de densidad de carga en una dirección, para un valor de r_z muy cercano a la transición. Puede observarse que la localización de lámina corrugada apenas es apreciable. Como siempre ρ_0 es la densidad de OP. El comportamiento es cualitativamente equivalente para cualquier valor de μ .

FIGURA III.9 Se presenta la densidad de partículas para ondas de densidad de carga en una dirección, a lo largo de la dirección de corrugación, en este caso para un valor de r_z lejos de la transición, la localización ya es muy clara. Nuevamente se obtiene un comportamiento análogo para cualquier valor de μ , pero la región de localización se encuentra en densidades cada vez más bajas, conforme aumenta μ .

FIGURA III.10 Gráfica de la densidad de partículas que se obtiene con ODC en tres direcciones muy cerca de la transición. Nuevamente el comportamiento es cualitativamente equivalente para cualquier valor de μ

FIGURAS III.11 (a), (b) y (c). En las tres gráficas se presenta la densidad de partículas en el plano XY, para ODC en tres direcciones. En los otros planos la localización es igual. En la figura III.11(a) se muestra como se localiza el sistema cuando $r_s = 40$ y $\mu = 0.1$, el valor máximo es igual a 174.0. En la figura III.11 (b) se presentan los resultados para $r_s = 80$ y nuevamente para $\mu = 0.1$, en este caso el máximo es igual a 579.17. Finalmente en la gráfica (c) reportamos los resultados para $r_s = 40$ pero $\mu = 0.01$, el valor máximo es igual a 176.28, mayor que en la figura (a), pero muy cercano.

FIGURAS III.12 (a) y (b). Densidad de partículas para ODC en tres direcciones, en la figura III.12 (a) presentamos los resultados para $\mu = 0.03$ y en la figura III.12 (b) para $\mu = 0.01$ en ambos casos se consideró $r_s = 80$. Se puede observar que en esta región las partículas están claramente localizadas en una red cúbica simple, ya que los resultados para los otros planos son idénticos. Para este valor de r_s no se aprecia diferencia en el valor máximo, en ambas gráficas es igual a 580.26.

FIGURA III.13 Densidad de estado obtenida con ODC en dos direcciones, para sistemas con parámetro de apantallamiento $\mu = 0.01$ y 0.03 en $r_s = 35$. En el primer caso el apantallamiento modifica la función, pero sigue teniendo un comportamiento análogo al de OP, mientras que en el segundo el cambio en gráfica indica que el apantallamiento es exagerado, si queremos describir simplemente gases de electrones apantallados.

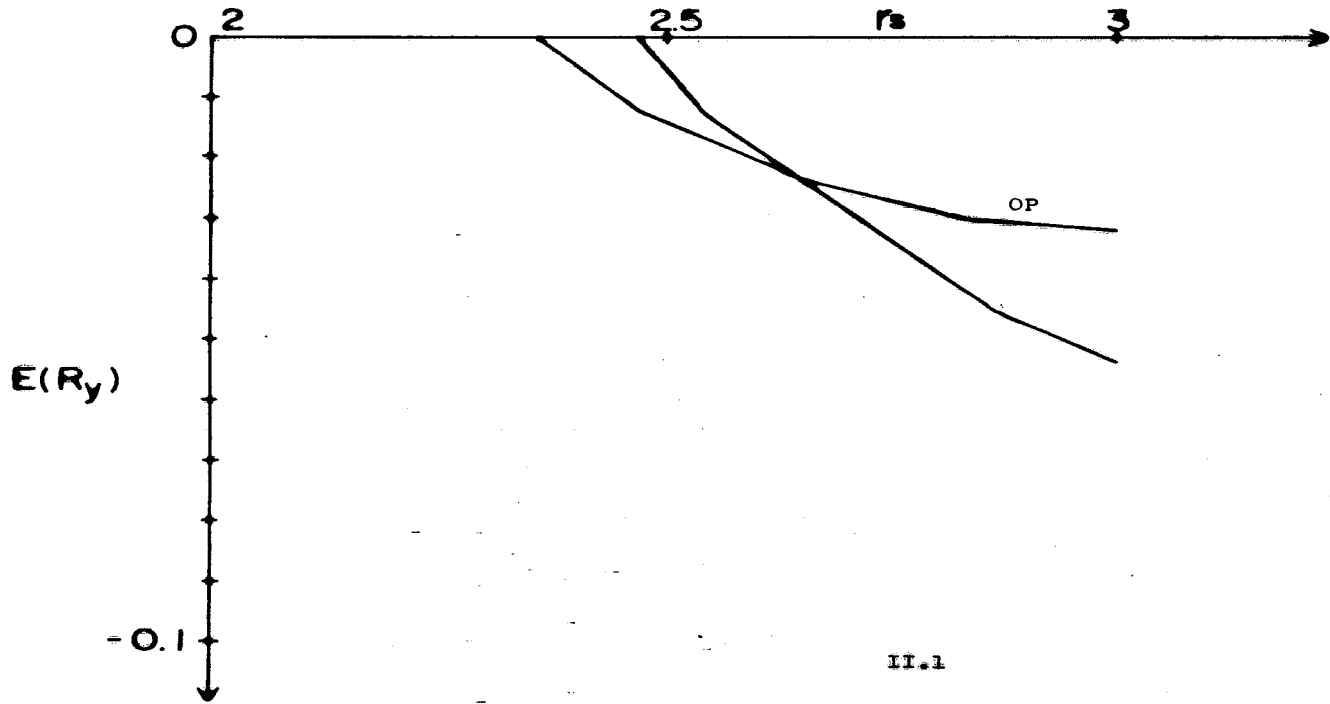
FIGURA III.14 Densidad de estados para la misma función que la gráfica III.12, y para los mismos valores de μ , pero en $r_s = 60$

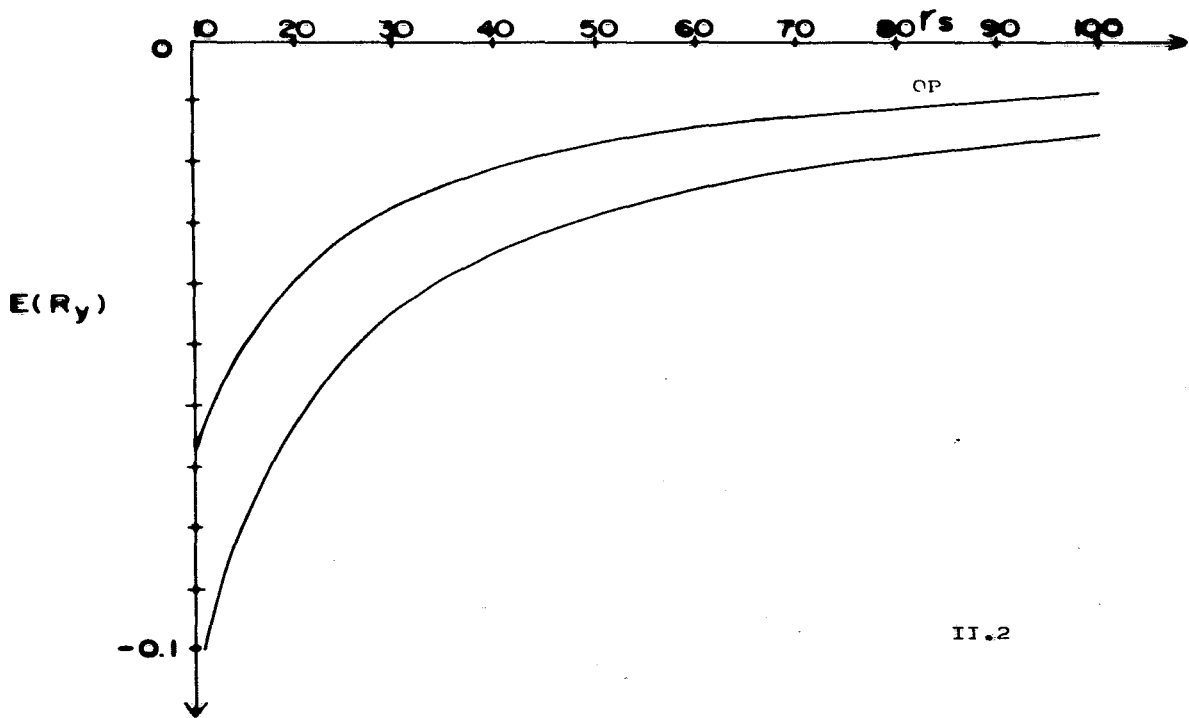
TABLA I.1

F. crítica	Autores	Método o criterio y Referencia
6 ≤ r _n r _n ≤ 10	E.P.Wigner	compara energías con otros estados Trans.Faraday Soc.34,678(1938)
20	Nozieres y Pines	δ = 1/4; Phys.Rev.111,442(1958)
5	W.J.Carr	compara energías con otros estados Phys.Rev.122,1437(1961)
6.5 104	Coldwell-Horsfall y A. Maradudin	condición de Lindemann δ = 1/4, 1/6 J.Math.Phys.1,395(1960)
47 ≤ r r ≤ 100	F.W.de Wette	existencia de estados ligados Phys..Rev.135,A287(1964)
27	H.M.Van Horn y E.E.Salpeter	Phys.Rev.157, 751(1967)
7.6	G. Carmi	comportamiento de la energía libre J.Math.Phys. 9,2120(1968)

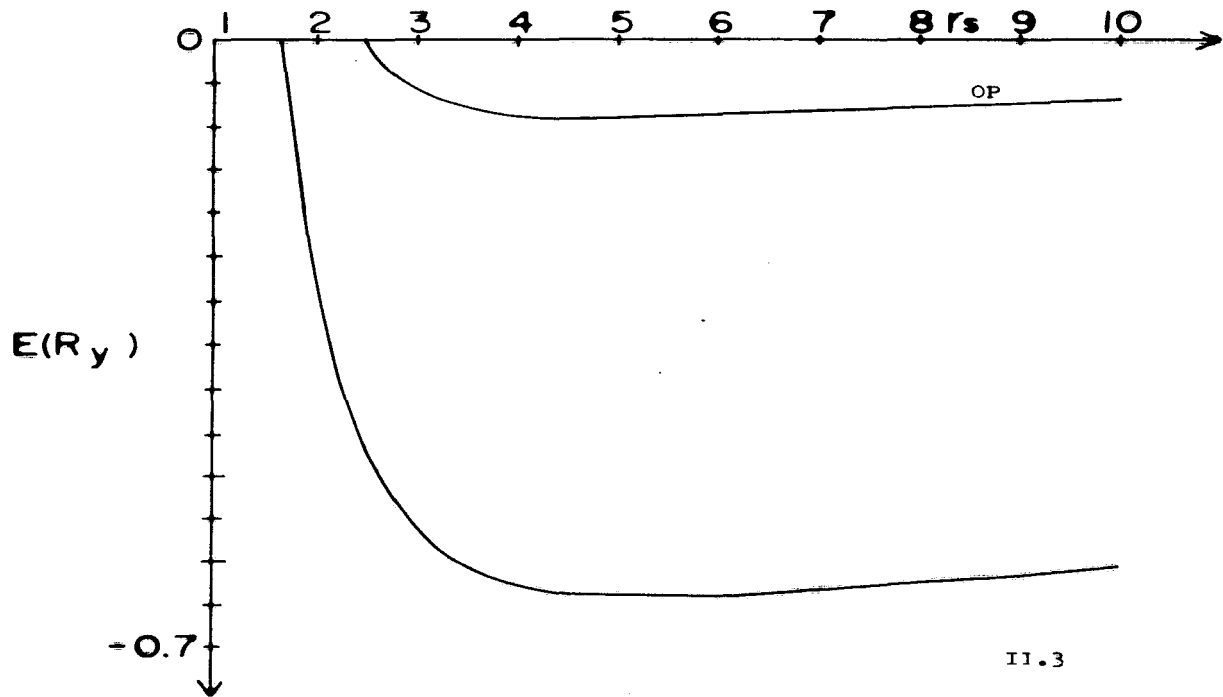
- 10 S.F.Edwards cálculos variacionales
y A.J.Hillel J.Phys.C,1,61(1968)
- 14.4 A.Isihara interpolación con aproximantes
de Padé.Phys.Lett.A,39,313(1972)
- 70 H.R.Glide cálculos variacionales
et al Phys.Lett.A,58,226(1976)
- 75 R.Mochkevitch condición de Lindemann
y J.P.Hansen modificada.Phys.Lett.73A, 35(1979)
- 100 $\frac{1}{2}$ 20 D.M.Ceperley M.C., simulación estocástica
y B.J.Alder Phys.Rev.Lett.45,566(1980)
- 25.4 L.M.Sander, densidad funcional
J.H.Rose y Phys.Rev.B 21,2739(1980)
H.B.Shore
- 12-27 K.Utsumi formulación dieléctrica
S.Ichimarú Phys.Rev.B 23,329(1981)
- 90.5 V.C.Aguilera aproximantes integrales
G.A.Baker y Phys.Rev.B 32,4502(1985)
M. de Llano

230	H. Nagara, Y. Nagata y T. Nakamura	M.C.; OCP clásico con corrección cuántica. Phys. Rev. A 36, 1859 (1987)
30 y 80	M. F. Das y J. Mahanty	densidad funcional, fcc y hcc Phys. Rev. B 30, 5713 (1988)
36	R. M. Mondes-M. M. A. Ortis y M. Morero	Hartree-Fock, OCP en 3D Phys. Rev. A 60, 2211 (1989)
97 y 102	G. Senatore y G. Pastore	densidad funcional, fccc y hcc Phys. Rev. Lett. 64, 363 (1990)
31.3	S. Gresco, R. M. Mondes y M. A. Ortis	Hartree-Fock, OCP en 2D Phys. Rev. A, 61, 5473 (1990)

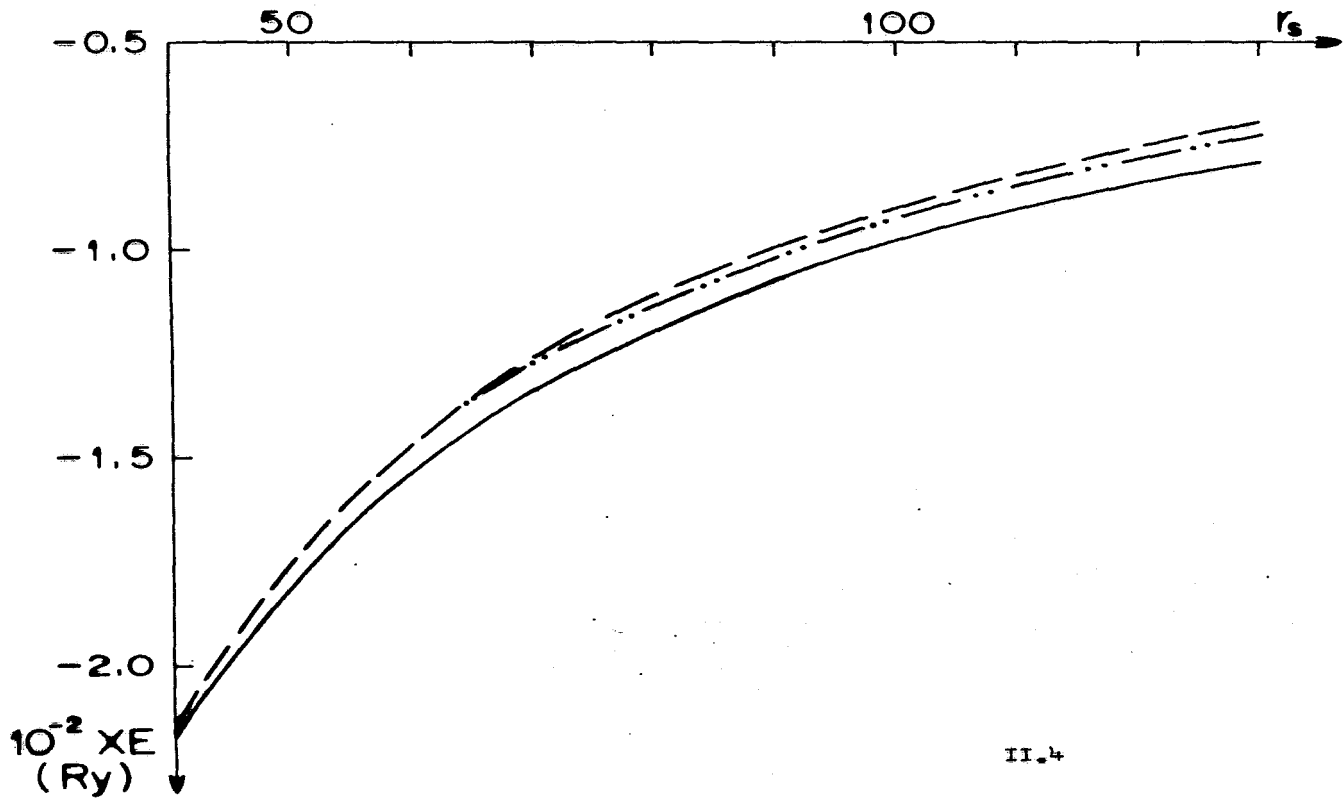


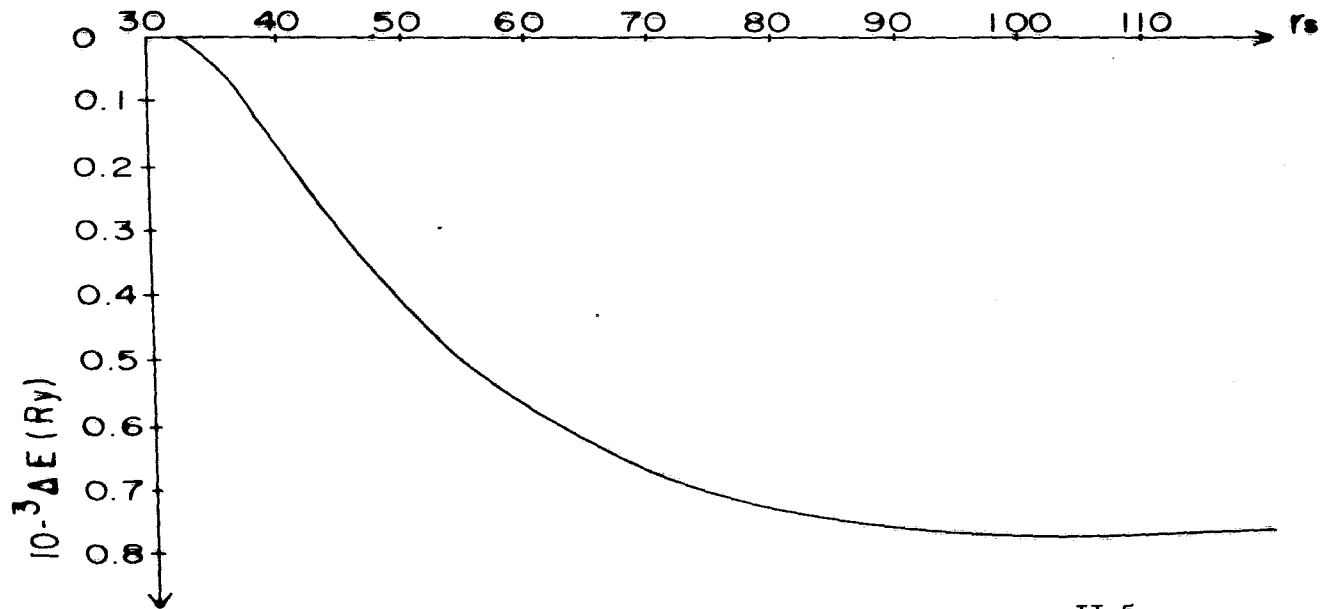


II.2

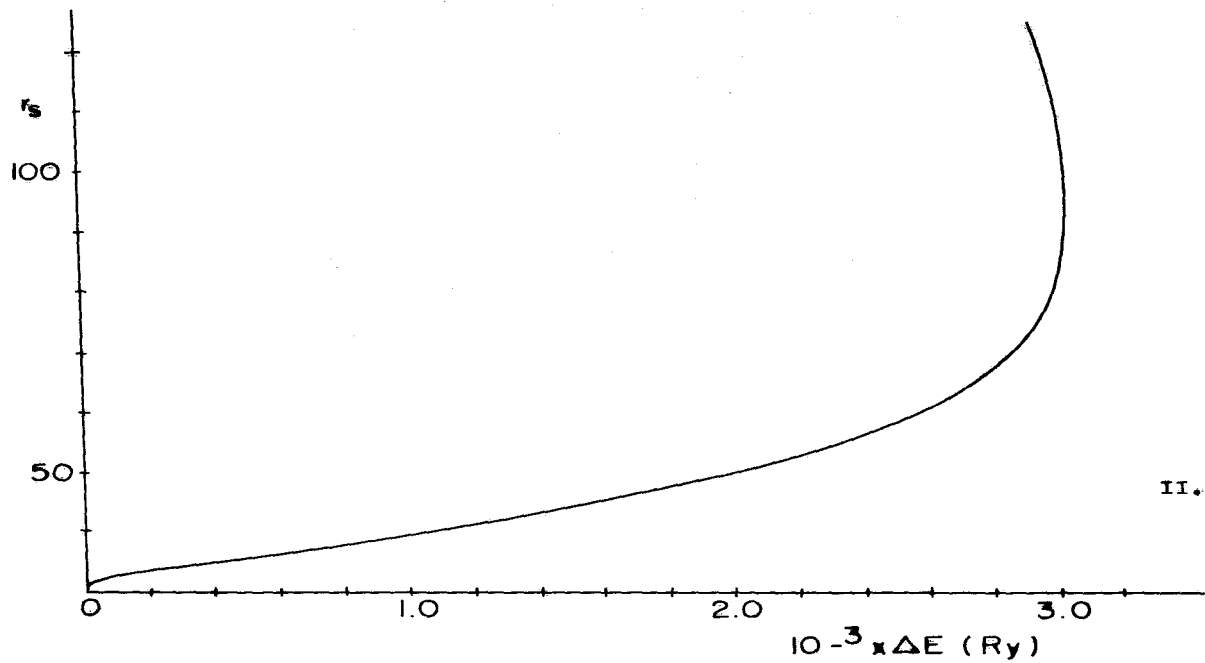


11.3

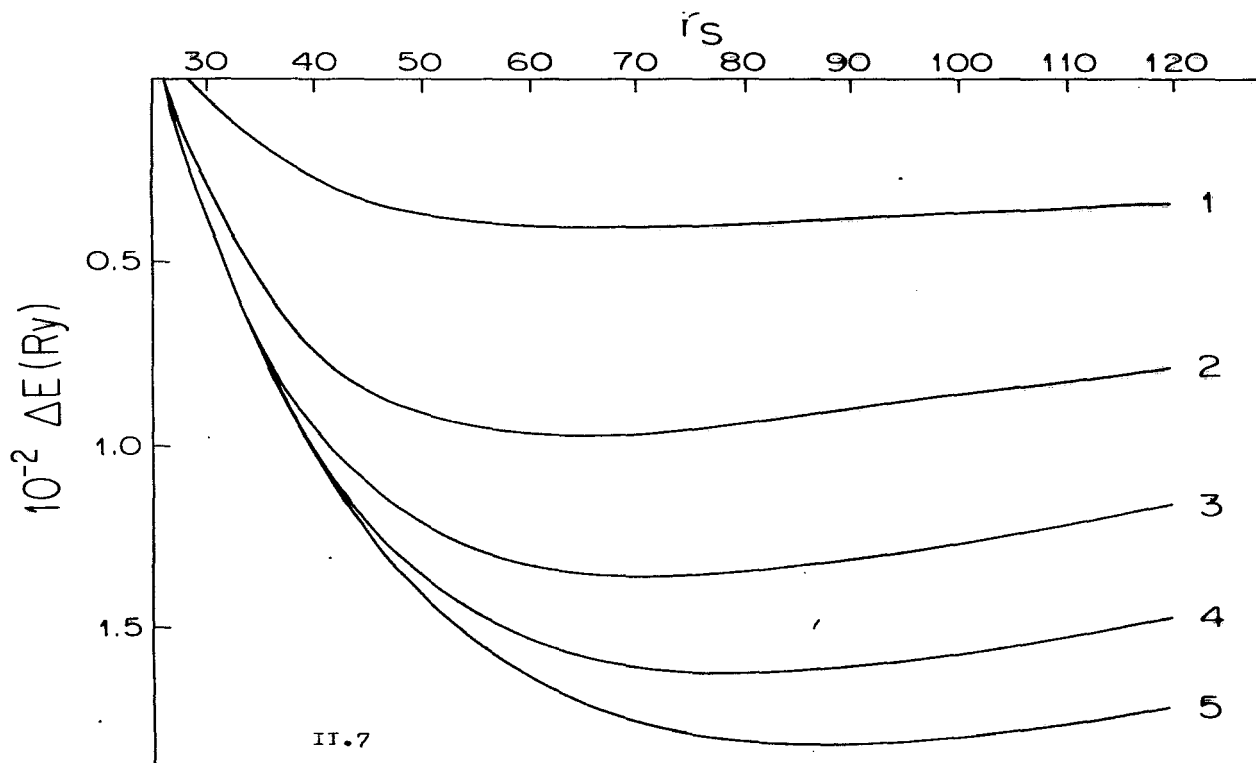




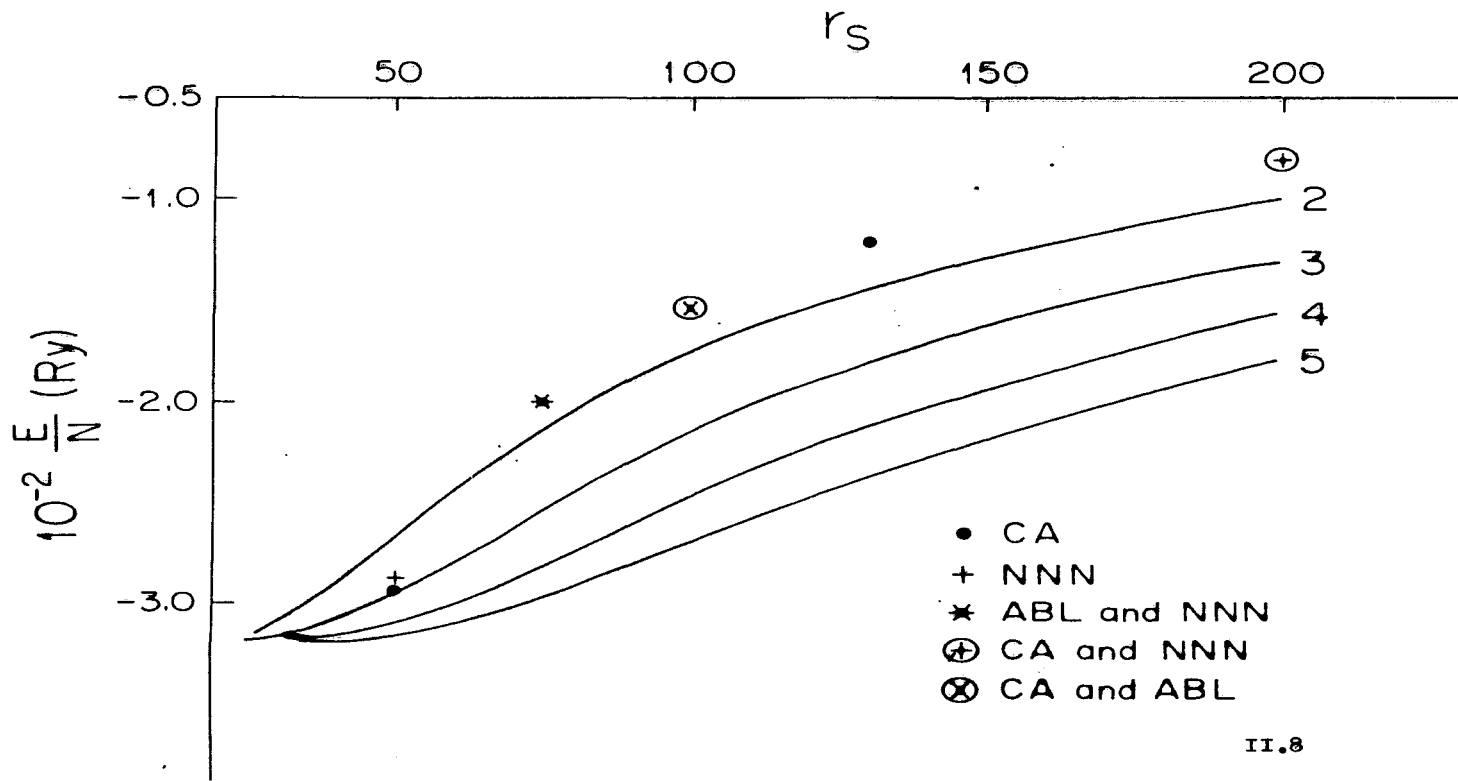
II.5

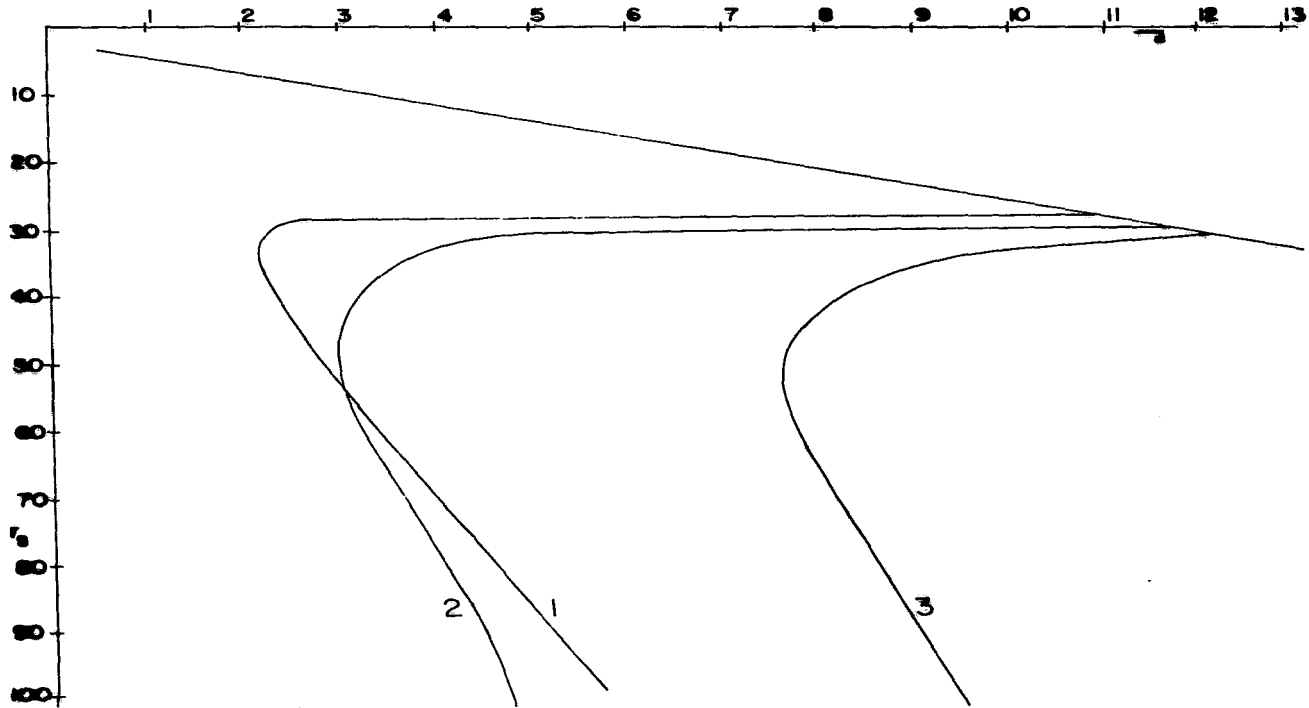


II.6



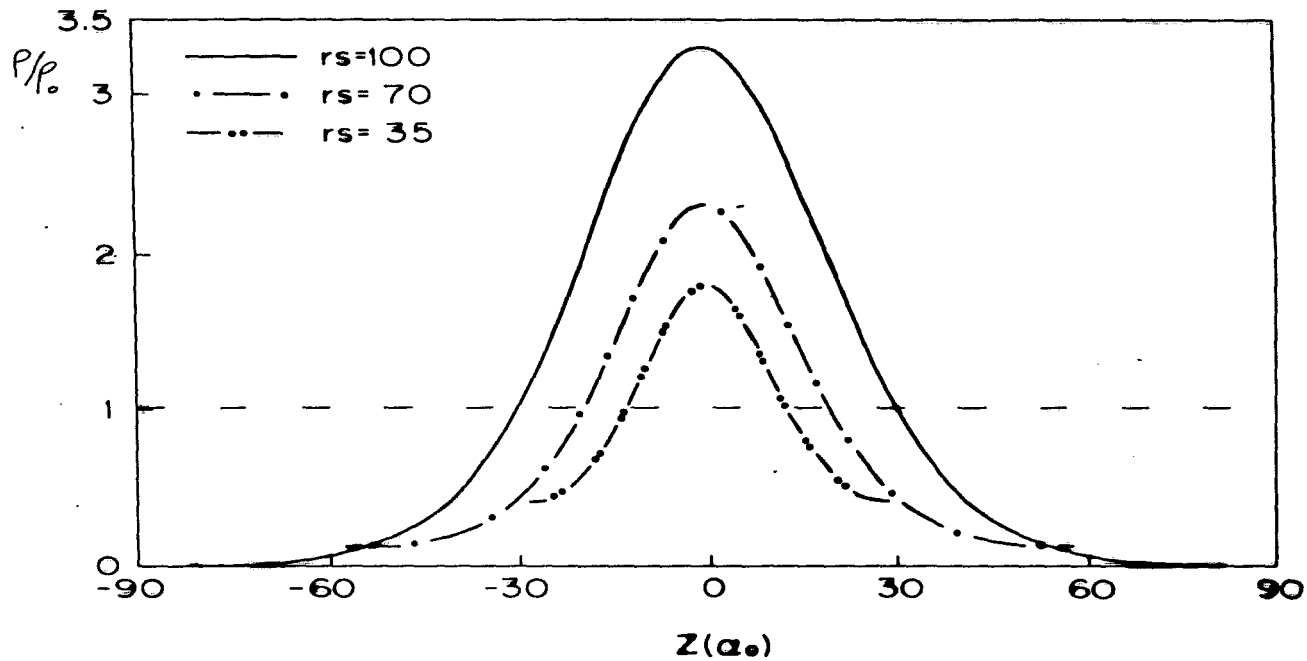
II.7





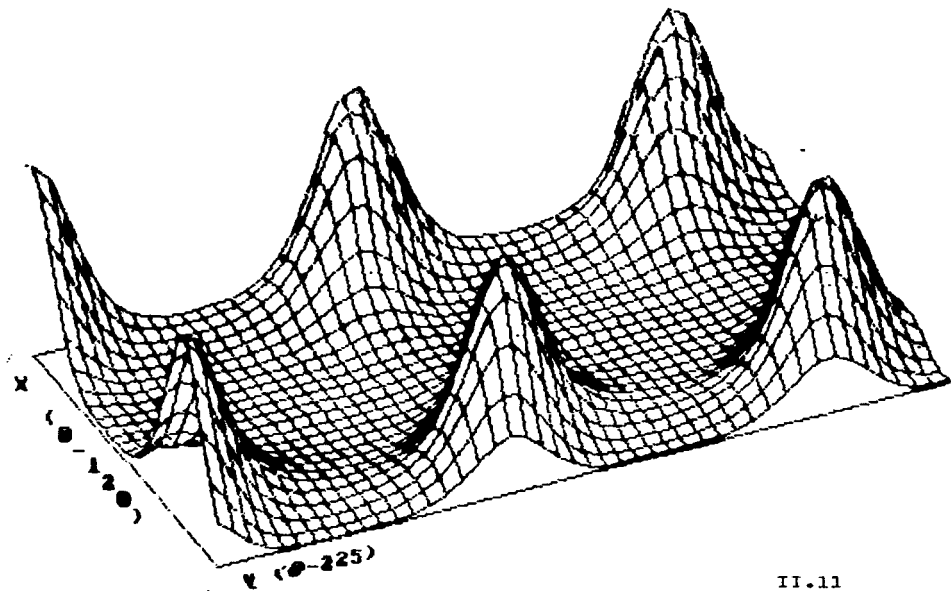
11.9

Densidad



PARTICLES DENSITY RS=60

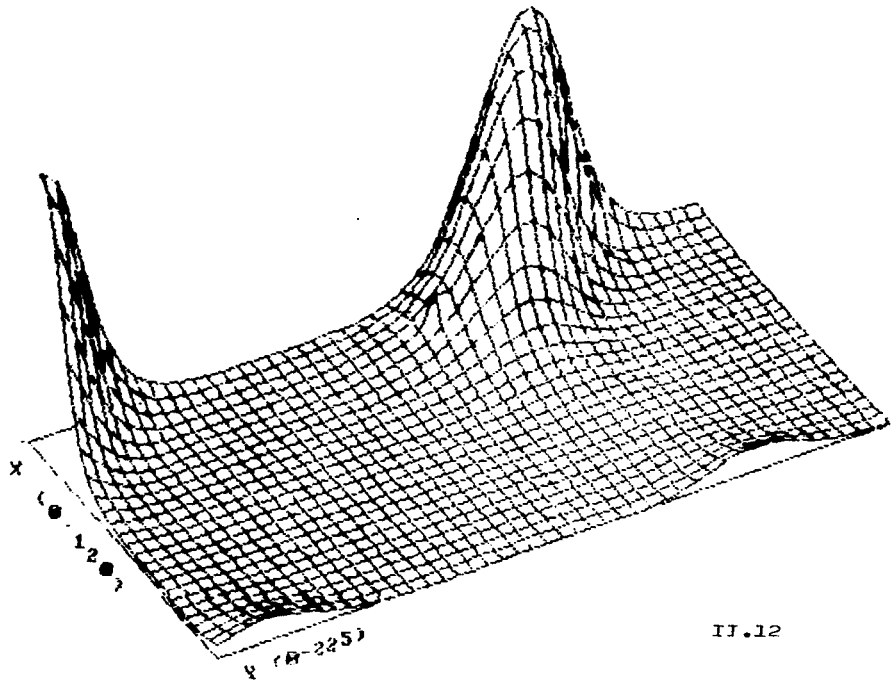
DENSITY

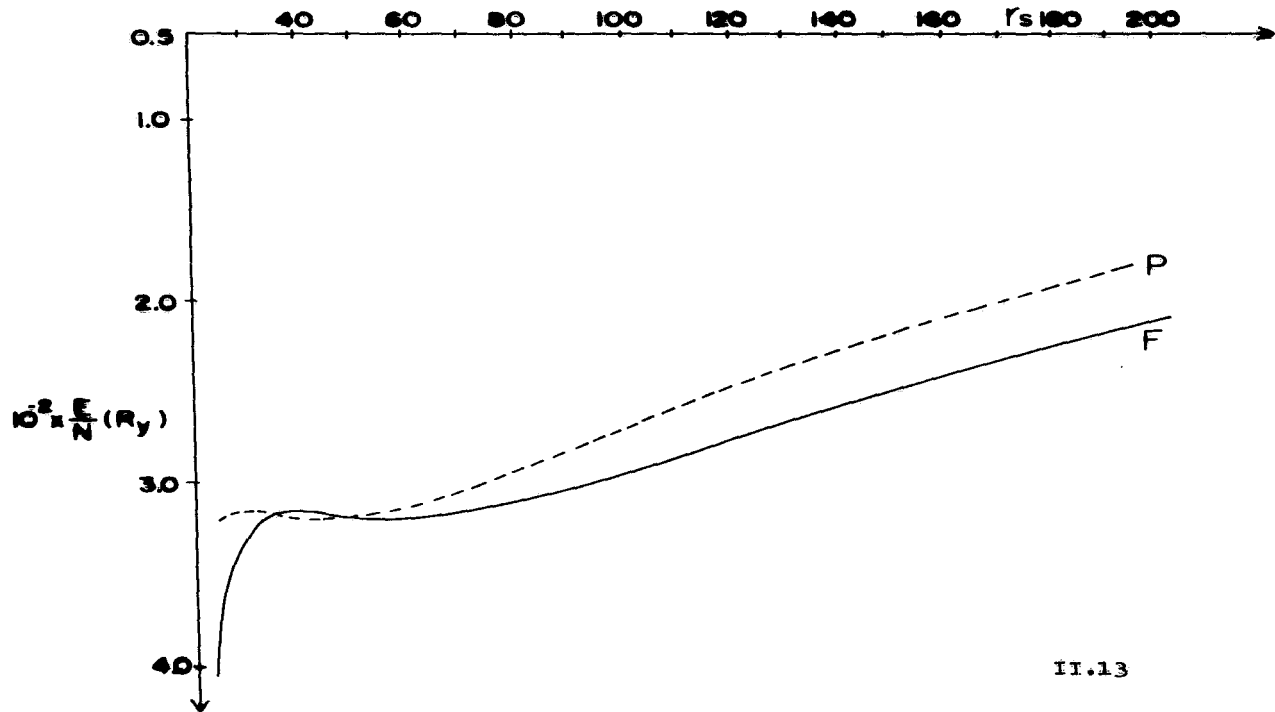


II.11

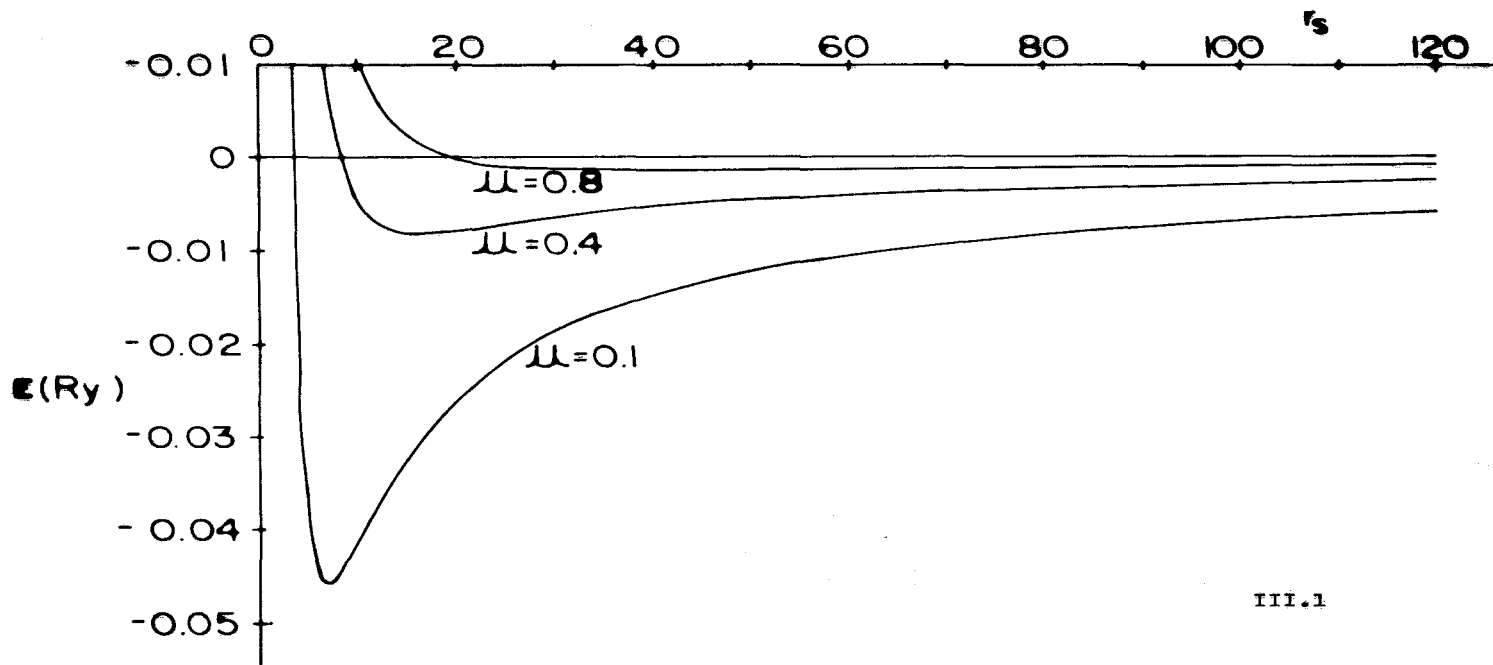
PARTICLES DENSITY RS-100

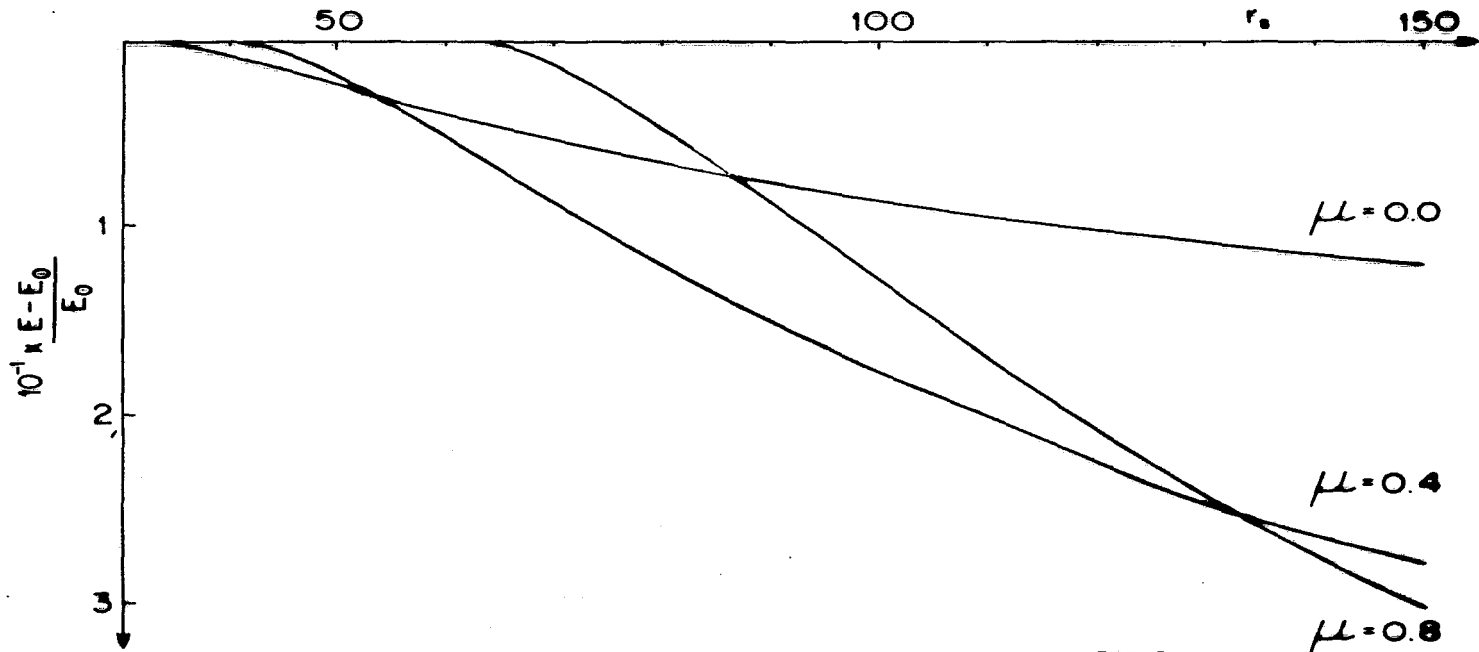
DENSITY



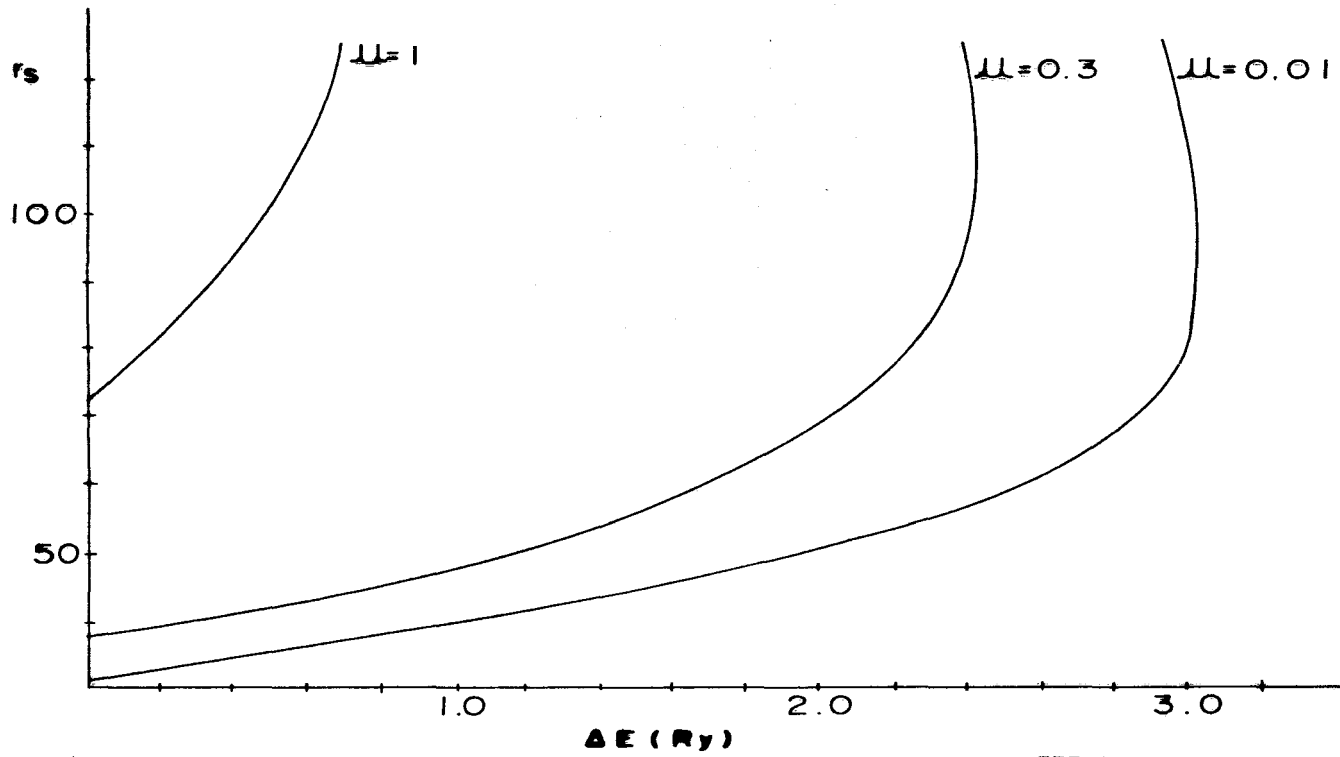


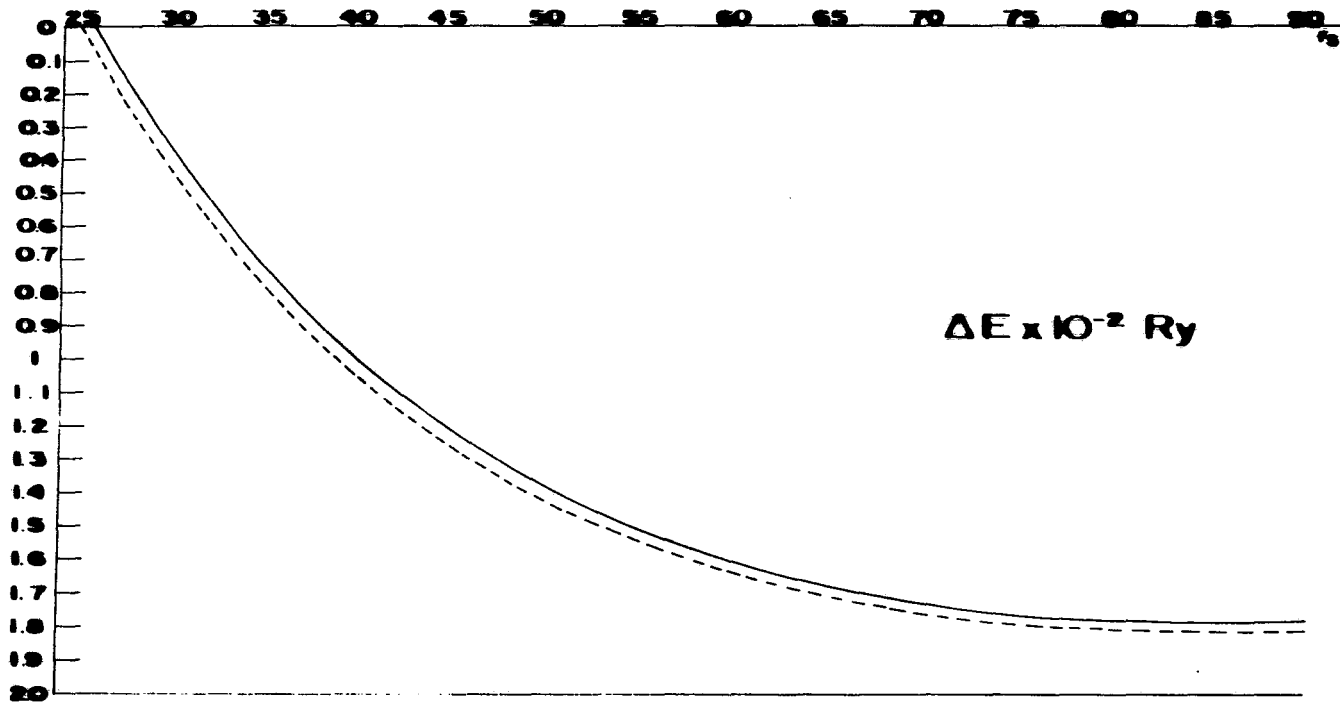
II.13

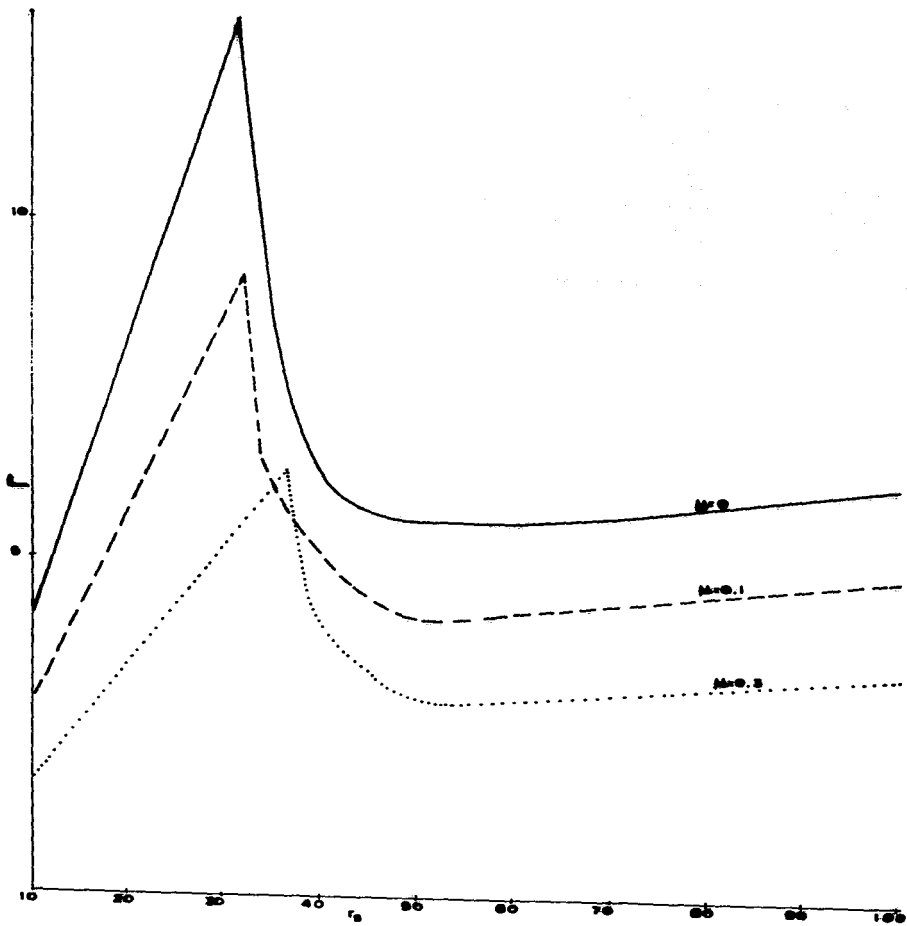




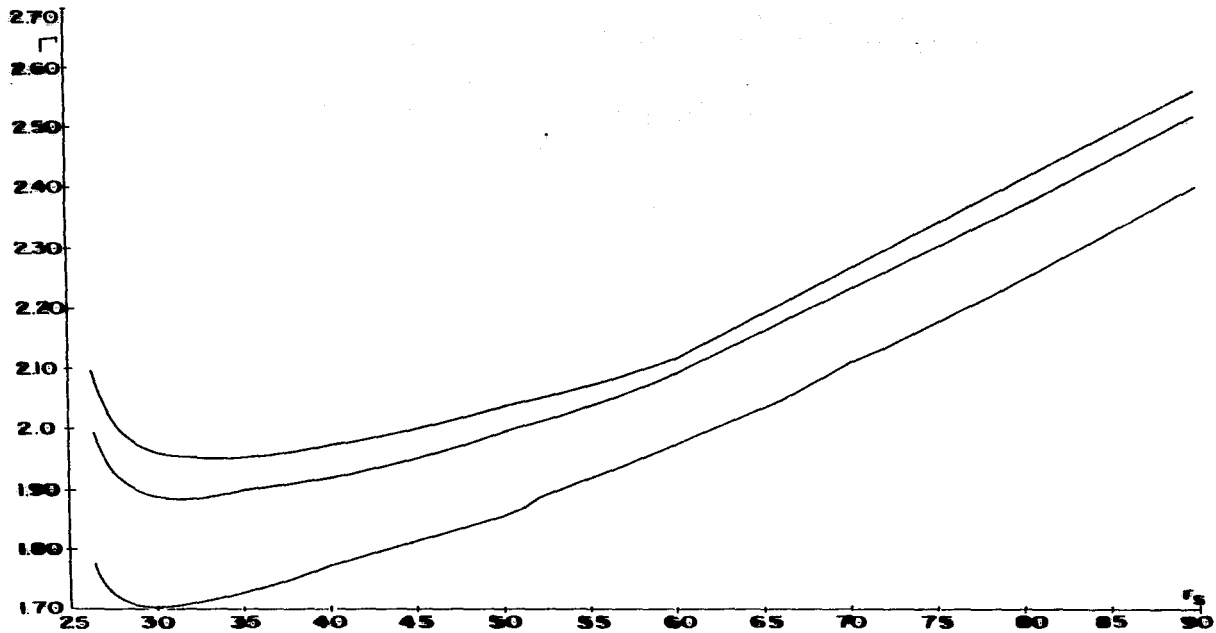
III.2



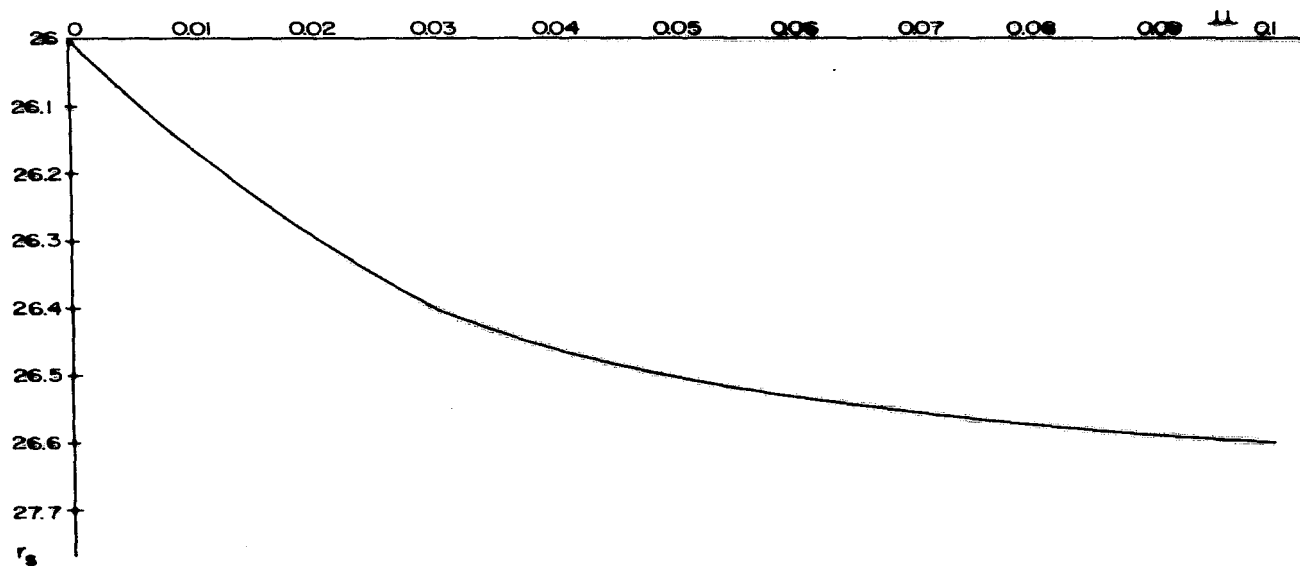




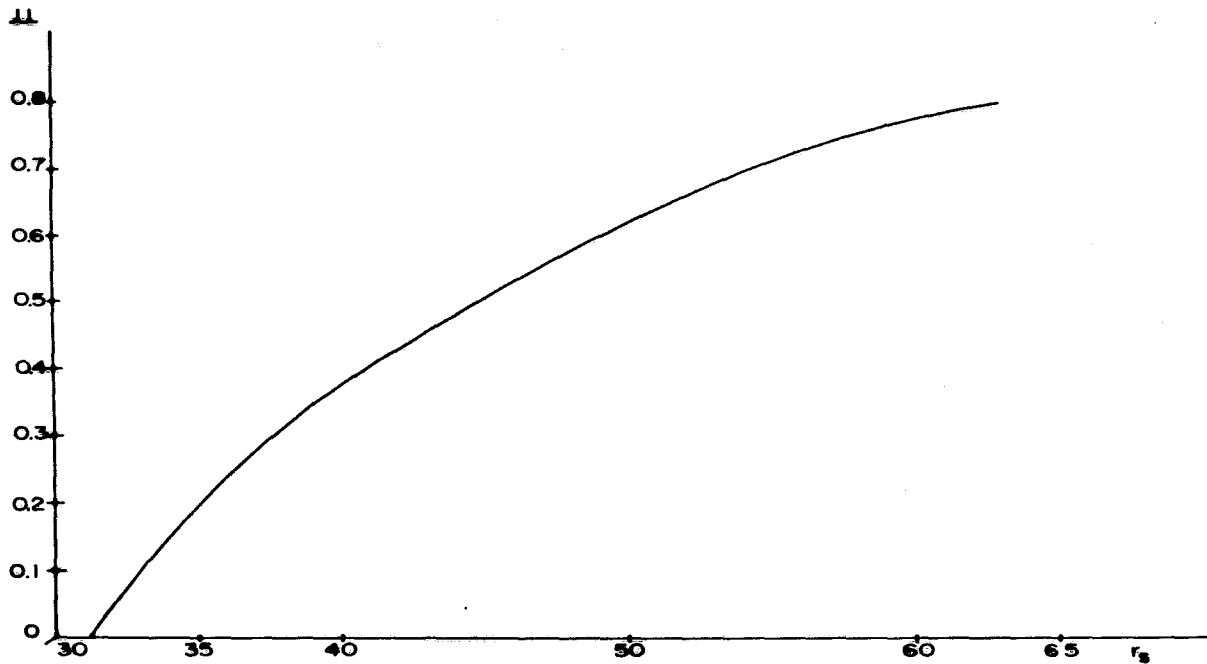
111.5



III.6



III.7a

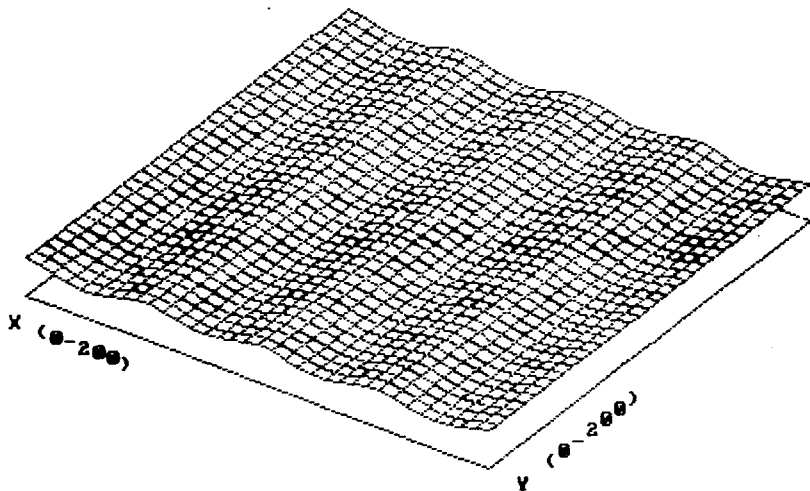


III.7b

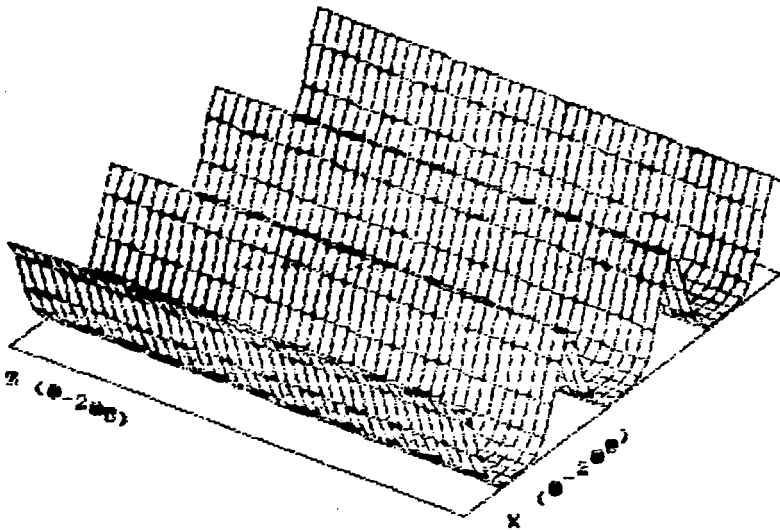
DENSITY Dmax=1.167

PARTICLES DENSITY

Z=.815*RS*mm



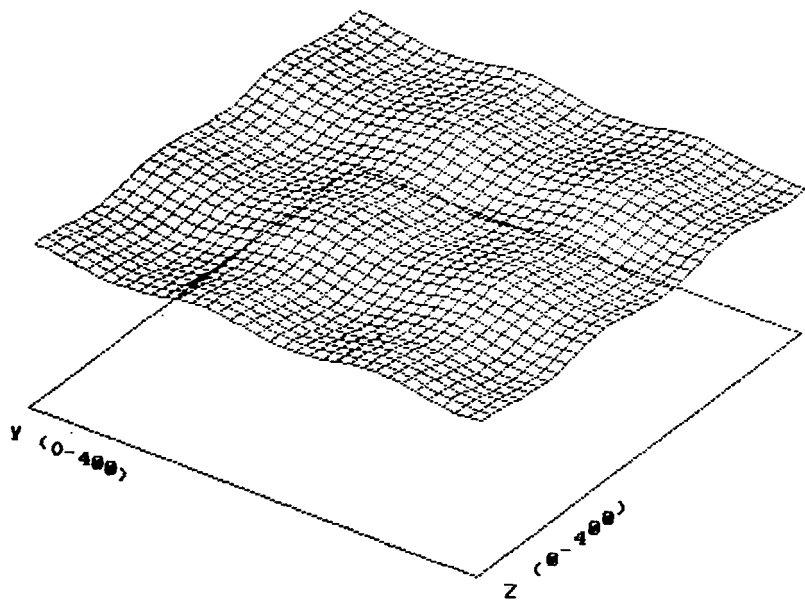
III.8



DENSITY Beam=S. 2562

PARTICLES DENSITY

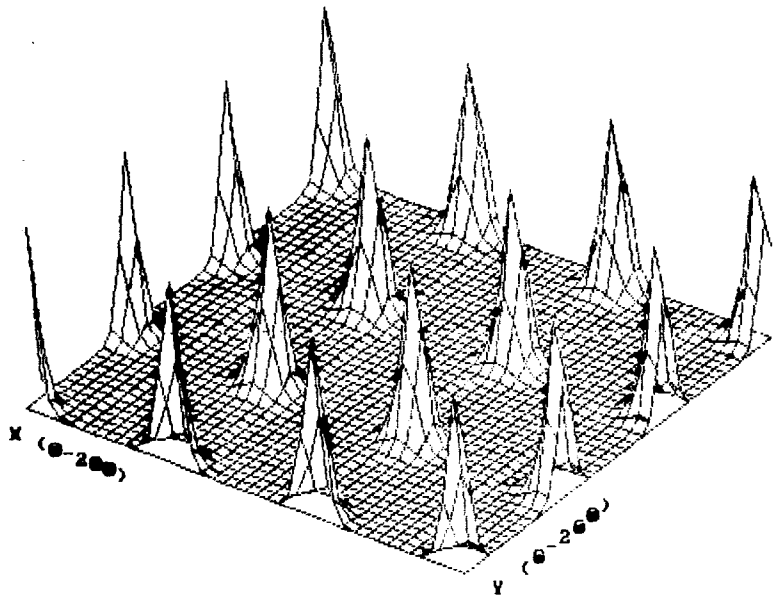
$\lambda = 1.63 \text{ \AA}$



III.10

PARTICLES DENSITY $\mu=1$ $RS=40$ $Z=0$

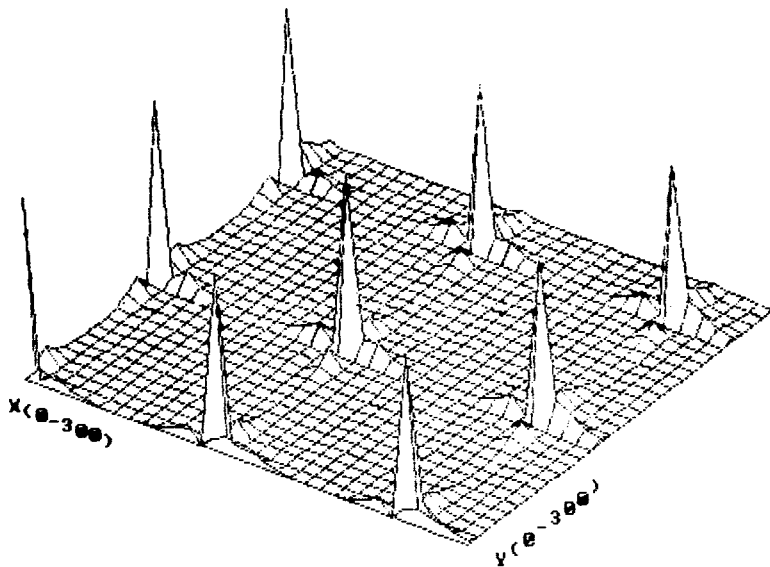
DENSITY $\text{Scale}=174.00$



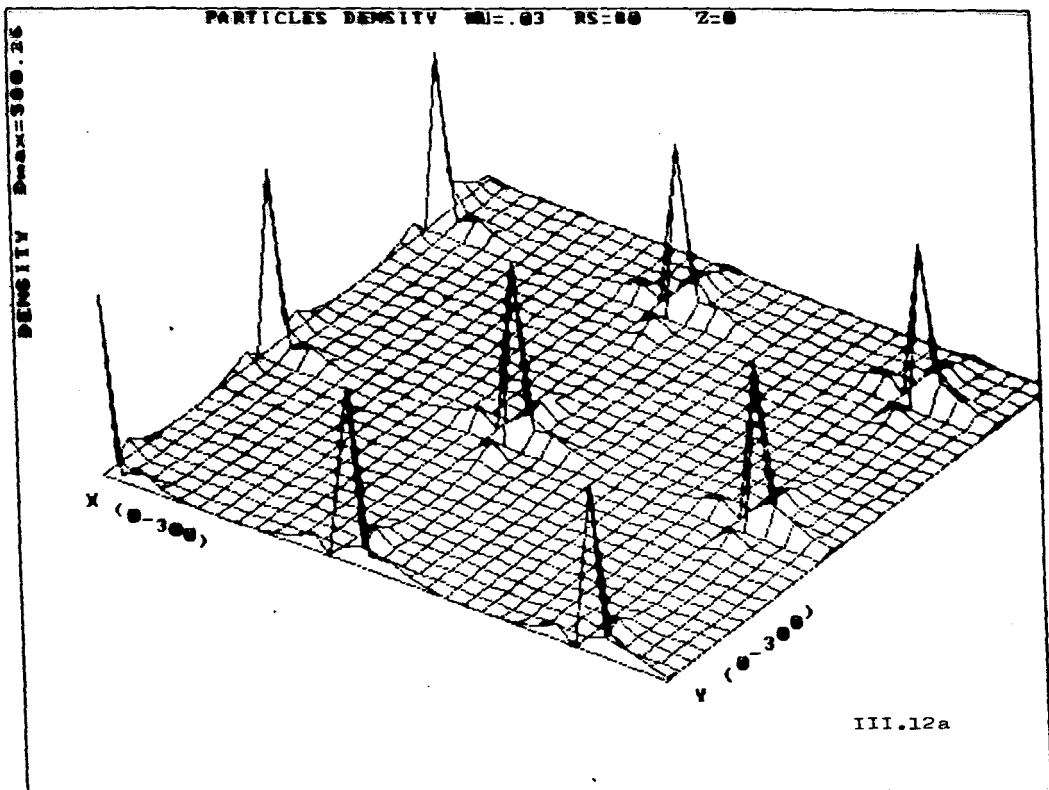
III.11a

PARTICLES DENSITY $\mu=1$ $RS=80$

DENSITY MAX=379.17

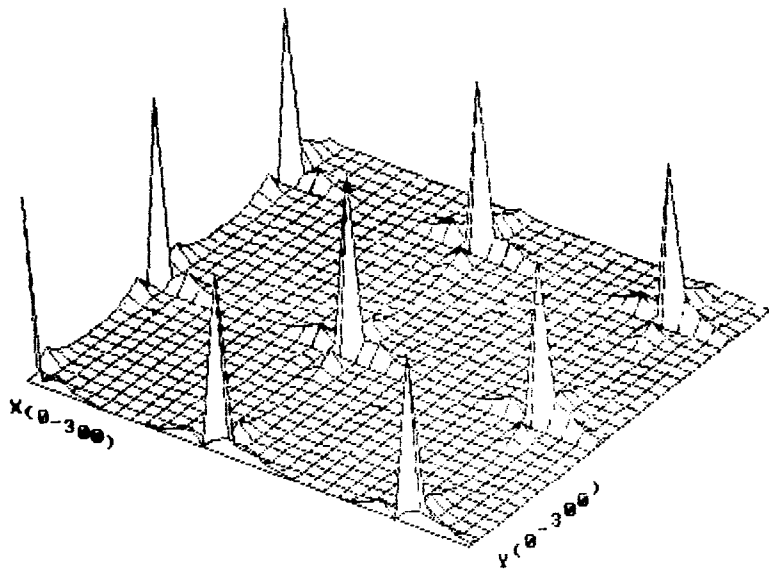


III.11b

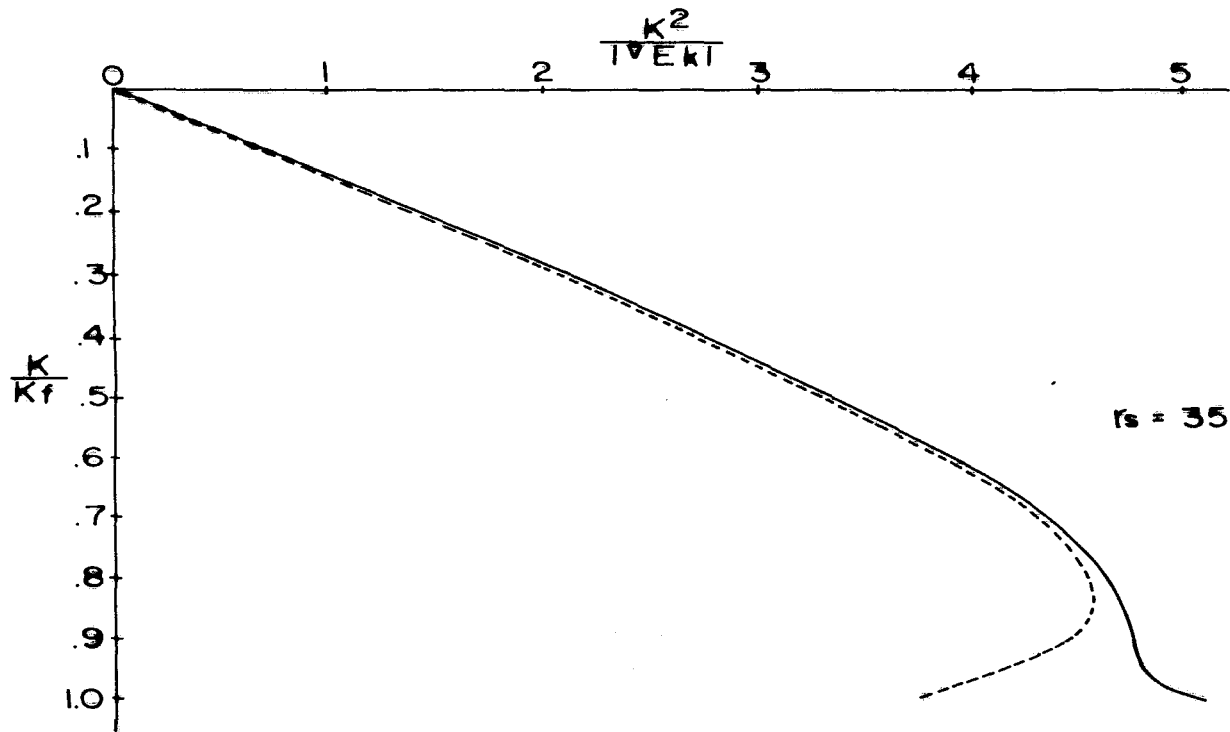


PARTICLE DENSITY $\mu = .01$ $RS = 80$

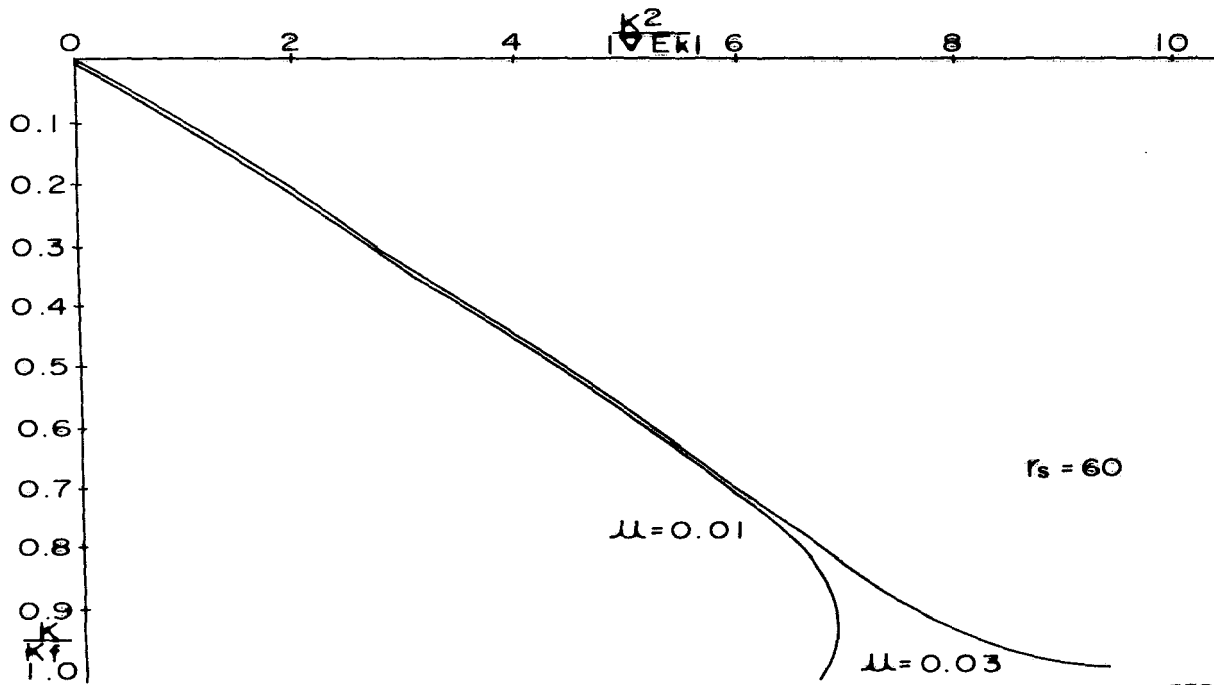
DENSITY $\mu_{max} = 300.26$



III.12b



III.13



III.14