

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

**SOLUCIONES RIVIALES A ECUACIONES HARTREE-
FOCK EN SISTEMAS DE FERMIONES CON INTERACCIONES RE-
PULSIVAS**

T E S I S

Que para obtener el título de

F I S I C O

p r e s e n t a

MARCELA D. GREYER GONZALEZ

México, D.F.

1977



Universidad Nacional
Autónoma de México



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.

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

**SOLUCIONES NO TRIVIALES A LAS ECUACIONES DE HARTREE-
FOCK EN SISTEMAS DE FERMIONES CON INTERACCIONES RE-
PULSIVAS**

T E S I S

Que para obtener el título de

F I S I C O

p r e s e n t a

MARCELA D. GREYER GONZALEZ

México, D.F.

1977

Mi agradecimiento al Dr. Rubén Barrera Pérez por su especial interés en la dirección de este trabajo, durante el -- cual me ha dejado sentir su gran calidad de maestro y amigo. Doy las gracias también al Dr. Manuel de Ilano de la -- Garza por su muy valiosa colaboración.

Quedo en deuda con Salvador Bermúdez + Graef por la realización del los trabajos de computación, así como al Depto. de Computación del I.N.E.N. por facilitar los programas del paquete "PLOT" -- de Harold V. Mc. Intosh 1975.

A todos los miembros del Departamento de Estado Sólido por el apoyo prestado, les quedo igualmente agradecida.

SOLUCIONES NO TRIVIALES A LAS ECUACIONES
DE HARTREE-FOCK EN SISTEMAS DE FERMIONES
CON INTERACCIONES REPULSIVAS

Introducción	1
--------------------	---

Capítulo I HARTREE-FOCK CON ONDAS PLANAS: EL PLASMA SIMPLE

I.1 Aproximación de Hartree-Fock..	3
------------------------------------	---

I.2 Modelo de jalea.....	9
--------------------------	---

I.3 Sólido de Wigner.....	15
---------------------------	----

Capítulo II ORBITALES HARTREE-FOCK NO TRIVIALES

II.1 Solución tipo Overhauser.....	17
------------------------------------	----

II.2 Función de correlación de pares para la "solución tipo lámina corrugada".....	21
--	----

II.3 Otro tipo de soluciones.....	23
-----------------------------------	----

Capítulo III ORBITALES HARTREE-FOCK NO TRIVIALES CON ORDENAMIENTO DE ESPINES.

III.1 Familia I	26
-----------------------	----

III.2 Familia II.....	32
-----------------------	----

Apéndice I	40
------------------	----

Apéndice II.....44

Apéndice III.....46

Apéndice IV.....56

INTRODUCCION

El estudio de un sistema de fermiones con interacciones repulsivas ha sido útil para entender las propiedades de los metales. El modelo que se ha tomado es tal que, el potencial iónico del sistema se ha sustituido por un fondo uniforme -- rígido de carga positiva. A este modelo se le conoce como modelo de jalea, y se ha resuelto en la aproximación de partícula independiente (aproximación de Hartree y de Hartree--Fock), se encuentra que las ecuaciones de Hartree-Fock presentan una solución exacta en términos de ondas planas a la que se le ha llamado solución trivial.

Por otra parte, Wigner predice, por medio de un cálculo semi--clásico, la existencia de una solución con orden de largo alcance y en la cual los electrones vibran alrededor de posiciones fijas en un arreglo cristalino que resulta ser cúbico centrado en el cuerpo. A esta solución se le llama sólido de Wigner.

En el capítulo I del presente trabajo, se hace un breve resumen de la aproximación de Hartree-Fock haciendo énfasis en el problema del sistema de electrones en el modelo de jalea. Se revisa la solución trivial tanto para el caso paramagnético como para el ferromagnético y se tratan de visualizar los resultados por medio de la función de correlación de pares. Se revisa el cálculo hecho por Wigner y se sugiere la existencia de soluciones localizadas a las ecuaciones de -- Hartree-Fock que nos den un estado mas estable que la solución trivial.

En el capítulo II se hace un análisis de la energía para una solución localizada a las ecuaciones matriciales de Hartree-Fock en un sistema de fermiones en el modelo de jalea. Se estudia la función de correlación de pares para esta solución encontrando que dada la aproximación de Hartree-Fock, se va a encontrar un aumento en la energía al permitir que electrones con espín antiparalelo se puedan acercar, por lo que se proponen soluciones que nos den una estructura antiferromagnética.

En el capítulo III se calcula la energía del estado base para dos familias de soluciones localizadas a las ecuaciones matriciales de Hartree-Fock tales que nos dan una estructura antiferromagnética para un sistema de fermiones con interacción delta repulsiva. Este sistema es mas simple que el sistema de electrones en el modelo de jalea en el cual las interacciones repulsivas son coulombianas, sin embargo, lo consideramos aquí como un primer paso para atacar el problema original. Se presenta la fórmula general para la energía del estado base en términos de un parámetro variacional que representa la amplitud de modulación para ambas familias de soluciones localizadas. Se hace plausible el hecho de que este tipo de soluciones son mas estables que la solución trivial, sin embargo, el análisis numérico de dicha estabilidad se reportará posteriormente. Se presentan además, gráficas de la densidad para distintos miembros de las familias y se analiza la densidad neta de espín en los puntos donde se encuentran los máximos de la densidad encontrando como se esperaba, una estructura antiferromagnética.

CAPITULO I

INTRODUCCION. HARTREE-FOCK CON ONDAS PLANAS. EL PLASMA SIMPLE.

En este capítulo se revisa la aproximación de Hartree-Fock para un sistema de muchas partículas, y se estudian las soluciones de ondas planas a las ecuaciones de Hartree-Fock para un sistema de electrones en el modelo de jalea. Se tratan tanto el caso paramagnético como el caso ferromagnético y se intentan visualizar los resultados analizando la función de correlación de pares. Se revisa el cálculo de Wigner (1) a la energía del estado base de este mismo sistema en el límite de bajas densidades, el cual predice una transición a una fase cristalina (sólido de Wigner). Se analiza la posibilidad de predecir dicha transición de fase a través de soluciones localizadas (no triviales) a las ecuaciones de Hartree-Fock.

I.1 APROXIMACION DE HARTREE-FOCK.

El problema de resolver un sistema de muchos cuerpos (≥ 3) con interacción entre pares, como ya es sabido (2), presenta grandes dificultades ya que no existen soluciones exactas a la ecuación de Schrödinger $H\psi = E\psi$ con un hamiltoniano:

$$H = \sum_{i=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \sum_{i < j} v(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \quad \dots (I.1)$$

donde $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$ es un operador de un cuerpo que representa la energía cinética y $V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ representa la interacción entre partículas. El segundo término en (I.1) es el que no deja resolver el sistema exactamente puesto que es un operador de dos cuerpos y de aquí que $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ no se puede escribir como un producto de funciones de partícula independiente. Por tanto, el problema se ha tratado de resolver aproximadamente buscando que las soluciones contengan las características esenciales de todo el problema.

Hartree (3) propone una solución aproximada al problema con el método de campo promedio en el cual cada partícula del sistema tiene su propia función de onda, esto es, el problema de muchos cuerpos se reduce al de describir el movimiento de una sola partícula en el campo promedio producido por las demás. Así, el potencial promedio que siente una partícula debido a la presencia de las demás está dado por:

$$V(\vec{r}_1) = \int \rho(\vec{r}_2) V(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) d\vec{r}_2 \quad \dots\dots (I.2)$$

donde:
$$\rho(\vec{r}) = \sum_{k_2(oc)} |\varphi_{k_2}(\vec{r}_2)|^2$$

es la densidad del sistema y las $\varphi_{k_2}(\vec{r})$ son las funciones de onda de cada partícula. Aquí k_2 representa todos los números cuánticos necesarios para especificar el estado y la suma corre sobre todos los estados ocupados en un producto de N funciones de onda φ_0 .

Así Hartree encuentra que las ecuaciones que describen al sistema de N partículas en esta aproximación están dadas por N ecuaciones integro-diferenciales no lineales acopla-

das de la forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 \phi_{k_1}(\vec{r}_1) + \left[\sum_{k_2(\text{occ})} \int |\phi_{k_2}(\vec{r}_2)|^2 / 2(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) d\vec{r}_2 \right] \phi_{k_1}(\vec{r}_1) = \epsilon_{k_1} \phi_{k_1}^{(0)}(\vec{r}_1) \quad (I.3)$$

que se tienen que resolver autoconsistentemente. Esto es, no tenemos una ecuación de Schrödinger lineal ya que el potencial promedio depende de la misma función de onda; para resolverla se proponen N funciones de onda con las cuales se calcula el potencial promedio y se resuelve entonces la ecuación de Schrödinger que nos queda. Las soluciones que se obtienen se comparan con las propuestas, si difieren de ellas, se utilizan para el cálculo del potencial promedio y se vuelve a resolver la ecuación resultante; así sucesivamente hasta que las funciones que se utilicen en el cálculo del campo promedio se aproximen tanto como se quiera a las soluciones que se obtienen de resolver las ecuaciones resultantes. Se dice entonces que las funciones de onda que se obtienen son soluciones autoconsistentes a las ecuaciones de Hartree (I.3) en la aproximación deseada.

Esta es la manera intuitiva de encontrar las ecuaciones de Hartree, pero existe una manera formal de encontrar estas ecuaciones y se hace por medio del principio variacional.

La aproximación de Hartree consiste en suponer que la función de onda del sistema, se puede escribir como un producto de funciones de una sola partícula:

$$\Phi_K(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \phi_{k_1}(\vec{r}_1) \phi_{k_2}(\vec{r}_2) \dots \phi_{k_N}(\vec{r}_N) \dots \dots \dots (I.4)$$

y se utiliza el principio variacional para determinar las funciones de onda ψ_{k_i} que den una extremal en el sistema. Esto es necesario, pero no suficiente, para minimizar el valor esperado del hamiltoniano con respecto a las funciones de onda ψ_k :

$$\frac{\delta}{\delta \psi_{k_i}(\vec{r}_i)} [\langle \Phi | H | \Phi \rangle - \lambda_i \langle \Phi | \Phi \rangle] = 0 \dots (I.5)$$

donde $\frac{\delta}{\delta \psi_{k_i}}$ significa derivada funcional y λ_i son parámetros de Lagrange que sirven para tomar en cuenta la condición de normalización de la función de onda, es decir $\langle \Phi | \Phi \rangle = 1$. Este procedimiento nos lleva a las ecuaciones (I.3) donde λ_i ha sido identificado con el eigenvalor ϵ_i . Así probamos que éstas ecuaciones aseguran que la energía total resultante debe de ser una extremal con respecto a todas las energías que se obtengan utilizando funciones de onda del tipo (I.4).

Como es bien sabido (3), la función de onda de un sistema de fermiones debe ser antisimétrica ante el intercambio de coordenadas y espines de cualquier par de partículas, sin embargo, la función de onda (I.4) en la aproximación de Hartree no obedece ésta condición. Por tanto, Fock y Slater (3) proponen una generalización al problema utilizando nuevamente el principio variacional pero partiendo ahora de una función de onda antisimétrica, que escribimos en forma de un determinante:

$$\Phi_k(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = N^{-1/2} \begin{vmatrix} \psi_{k_1}(\vec{r}_1) & \psi_{k_1}(\vec{r}_2) & \dots & \psi_{k_1}(\vec{r}_N) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \psi_{k_N}(\vec{r}_1) & \dots & \dots & \psi_{k_N}(\vec{r}_N) \end{vmatrix} \dots (I.6)$$

Esta generalización se le conoce como la aproximación de -- Hartree-Fock la cual sí cumple con los requerimientos de si metría del sistema.

Por medio del principio variacional, como se hace en la -- aproximación de Hartree, se extremaliza el valor esperado de H con respecto a los orbitales $\varphi_{k_i}(\vec{r}_i)$ usados en la función de onda determinantal. Sustituyendo (I.6) en la ecuación (I.5) obtenemos nuevamente N ecuaciones integro-diferenciales de la forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \varphi_{k_1}(\vec{r}_i) + \left[\sum_{k_2(oc)} \int |\varphi_{k_2}(\vec{r}_2)|^2 v(\vec{r}_2 - \vec{r}_i) d\vec{r}_2 \right] \varphi_{k_1}(\vec{r}_i) - \sum_{k_2(oc)} \int \varphi_{k_2}^*(\vec{r}_2) v(\vec{r}_2 - \vec{r}_i) \varphi_{k_1}(\vec{r}_2) d\vec{r}_2 \varphi_{k_2}(\vec{r}_i) = \epsilon_{k_1} \varphi_{k_1}(\vec{r}_i) \dots (I.7)$$

donde la suma $\sum_{k(\alpha)}$ corre sobre los estados ocupados del sistema. Estas ecuaciones se resuelven autoconsistentemente. Que un conjunto de funciones de onda sea solución autoconsistente a las ecuaciones de Hartree-Fock es equivalente a decir que diagonalizan el hamiltoniano de Hartree-Fock, es decir, es necesario encontrar un conjunto de soluciones $|K_i\rangle$ que satisfagan:

$$\langle K_i | -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 | K_i \rangle + \sum_{K_2(oc)} \langle K_i | K_2 | v_{12} | K_i K_2 - K_2 K_i \rangle = \epsilon_{K_i} \delta_{K_i K_i} \dots (I.8)$$

Estas ecuaciones se obtienen multiplicando las ecuaciones (I.7) por $\varphi_{k_i}^*(\vec{r}_i)$ por la izquierda e integrando. A las ecuaciones (I.8) las llamaremos la forma matricial de las ecuaciones de Hartree-Fock y es este punto de vista desde donde

vamos a analizar el problema.

El primer término en la ecuación (I.8) representa la energía cinética de una partícula, el segundo término (término directo) representa a una partícula moviéndose en un potencial promedio equivalente, debido a la presencia de las otras partículas y es la misma interpretación que en el caso de la aproximación de Hartree, el tercer término (término de intercambio) es debido a que ahora se está tomando en cuenta la antisimetría de la función de onda.

La energía total del estado base del sistema, una vez que se obtuvo una solución autoconsistente a las ecuaciones de Hartree-Fock, se encuentra a partir de:

$$E_{HF} = \langle \Phi | H | \Phi \rangle$$

Dado que Φ es una función de onda determinantal (3), se tiene que:

$$E_{HF} = \sum_{k_1(\uparrow\downarrow)} \langle k_1 | -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 | k_1 \rangle + \frac{1}{2} \sum_{k_1, k_2(\uparrow\downarrow)} \langle k_1 k_2 | \sigma_{12} | k_1 k_2 - k_2 k_1 \rangle \dots (I.9)$$

Tenemos que hacer notar que no existe ninguna restricción que nos diga que el conjunto de funciones de onda para "espín arriba" sea idéntica, ortogonal, ó tenga cualquier relación particular con el conjunto de funciones de onda para "espín abajo". Además no existe ningún teorema acerca de la unicidad de las soluciones, pero es obvio, que de existir varios tipos de soluciones completamente diferentes, solamente una está relacionada con el estado base real del sistema bajo consideración.

De acuerdo con el principio variacional, la energía que se calcula en esta aproximación, siempre va a ser mayor ó igual que la energía real del sistema, por tanto, si se encuentran varios tipos de soluciones a las ecuaciones de Hartree-Fock la solución que dé la menor energía va a ser la más cercana a la solución real.

I.2 MODELO DE JALEA.

El sistema de partículas que vamos a analizar es el de N electrones con espín total neto cero (caso paramagnético) en un fondo uniforme rígido de carga positiva, tal que el sistema sea eléctricamente neutro. A este sistema es el que llamaremos modelo de jalea.

El hamiltoniano de este sistema está dado por la ecuación:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^N \int d\vec{r} \frac{\rho_-(\vec{r}_i) \rho_+}{|\vec{r}_i - \vec{r}|} + \int d\vec{r} \int d\vec{r}' \frac{\rho_+ \rho_+}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (I.10)$$

$$+ \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

Aquí, el primer término corresponde a la energía cinética, el segundo, a la interacción electrón-fondo positivo V_{e-p} , y el tercero, a la interacción fondo positivo-fondo positivo V_{p-p} , ρ_+ es una constante que representa la densidad de carga del fondo positivo, $\rho_-(\vec{r})$ es la densidad de carga electrónica, y el último término es la repulsión electrón-electrón.

Existe una solución exacta a las ecuaciones de Hartree-Fock en este modelo y como es ya bien conocido (3), es la solución de ondas planas (solución trivial):

$$\varphi_{\vec{k},\sigma}(\vec{r},\sigma_2) = V^{1/2} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \chi_{\sigma}(\sigma_2) \quad \dots\dots\dots (I.11)$$

donde V es el volumen de normalización del sistema, χ es la función de espín y σ_2 es la variable de espín.

En este caso, la densidad electrónica es constante ya que:

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{k(\text{occ})} |\varphi_k(\vec{r})|^2 = \frac{1}{V} \sum_{k(\text{occ})} 1 = \frac{N}{V} \quad \dots\dots\dots (I.12)$$

Para referirnos a la densidad del sistema, es conveniente - definir el parámetro r_s de tal manera que $(\frac{4}{3}\pi r_0^3)N = V$ donde V es el volumen total del sistema y N es el número total de partículas, así: $\frac{4}{3}\pi r_0^3 = \frac{V}{N} = \frac{1}{\rho}$ Si medimos r_0 en radios de Bohr; $r_0 = a_0 r_s$ tenemos el parámetro adimensional r_s que nos da una medida de que tan denso es el sistema. Así, si $r_s \ll 1$ las partículas están muy cercanas unas de otras y el sistema es muy denso, por el contrario, si $r_s \gg 1$ las partículas están muy separadas y la densidad es baja. Se encuentra que para metales empíricos $2 \lesssim r_s \lesssim 6$.

Sustituyendo (I.11) en (I.9), la energía por partícula para este sistema, puede escribirse en términos del parámetro r_s en la forma:

$$\frac{E}{N} = \epsilon = \left\{ \frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s} \right\} (Rydberg) \quad \dots\dots\dots (I.13)$$

El primer término es la contribución de la energía cinética al sistema y el segundo término corresponde a la energía potencial dada por el término de intercambio. El término di-

recto se anula con los términos que corresponden a las interacciones V_{p-p} y V_{e-p} . Como podemos ver, el sistema es casi ideal (acoplamiento débil) a altas densidades ($r_s \ll 1$) ya que es el término en la energía cinética el que domina sobre la energía potencial, mientras que a bajas densidades ($r_s \gg 1$) vamos a tener un sistema no-ideal (acoplamiento fuerte) ya que la energía potencial domina sobre la energía cinética.

En el sistema que tomamos, el conjunto de funciones es idéntico para electrones con espín arriba y con espín abajo (— sistema paramagnético), pero como se hizo notar anteriormente, ésta no es una restricción, y ahora se va a analizar el caso en el que todos los electrones con espín arriba (ó abajo) tienen un conjunto de funciones de onda idénticamente — cero, y los electrones con espín-abajo (ó arriba), tienen — las soluciones de ondas planas (caso ferromagnético). La — energía por partícula para este sistema se encuentra que es — tá dada por:

$$\frac{E_{ferro}}{N} = \epsilon_{ferro} = \left[\left(\frac{2.21}{r_s^2} \right) 2^{2/3} - \left(\frac{0.916}{r_s} \right) 2^{1/3} \right] R_{yd} \dots (I.14)$$

Como podemos notar, la energía cinética va a aumentar con respecto a la energía cinética en el caso paramagnético — puesto que ahora vamos a tener el doble de estados ocupados pero el término de intercambio va a disminuir con respecto al del caso paramagnético, por lo que tenemos que analizar para que r_s la energía ferromagnética de ondas planas, ϵ_{ferro} va a ser menor que la energía paramagnética de ondas planas:

$$\epsilon_{\text{ferro}} < \epsilon_{\text{para}}$$

o sea:

$$\left(\frac{2.21}{r_s^2}\right) 2^{2/3} - \left(\frac{0.916}{r_s}\right) 2^{1/3} < \left(\frac{2.21}{r_s^2}\right) - \left(\frac{0.916}{r_s}\right) \quad \dots (I.15)$$

de aquí se encuentra que para $r_s > 5.45$, $\epsilon_{\text{para}} > \epsilon_{\text{ferro}}$, y ya que $r_s > 5.45$ está dentro del rango de densidades metálicas, la aproximación de Hartree-Fock predice una transición de - fase que no se observa en la naturaleza, puesto que los meta les ligeros no son ferromagnéticos. En realidad, el cálculo de la energía en la aproximación de Hartree-Fock es solo un cálculo aproximado, mientras que la energía real del sistema siempre va a ser menor que la calculada con Hartree-Fock.

A la diferencia de energías $E_{\text{HF}} - E_{\text{Real}}$ le llamaremos energía de correlación y se piensa (4) que en los efectos que dan lugar a dicha energía, se encuentra la explicación del por - qué no aparece en la naturaleza la transición de fase que - predice la aproximación de Hartree-Fock.

En un sistema real de cargas con interacción entre pares, se observa que existen dos tipos de "relación" entre ellas, una es debida a la interacción repulsiva que existe entre ellas y a la que llamaremos correlación dinámica, la cual no deja que dos partículas se acerquen, y la otra que se debe a la - antisimetría de la función de onda, a la que llamaremos correlación estadística, la cual no deja que dos partículas -- con el mismo espín se acerquen. En la aproximación de Hartree-Fock al tomar la función de onda como un producto de -

funciones de onda de una sola partícula, se está despreciando la correlación dinámica, pero sí estamos tomando en cuenta la correlación estadística debido a que se está tomando una función de onda antisimétrica.

La forma de analizar la correlación que existe en el sistema es por medio de la función de correlación de pares que nos dice, si tenemos una partícula en r_1 , que densidad de partículas existe en r_2 . La función de correlación de pares se define (5) de la siguiente forma:

$$D(\bar{r}_1, \bar{r}_2) = \frac{1}{P(\bar{r}_1)} \int d\bar{r}_3 d\bar{r}_4 \dots d\bar{r}_N |\Phi(\bar{r}_1, \bar{r}_2, \dots, \bar{r}_N)|^2 \dots \dots (I.16)$$

que resulta conveniente escribir como:

$$D(\bar{r}_1, \bar{r}_2) = \frac{1}{P(\bar{r}_1)} \int d\bar{r}_1' d\bar{r}_2' d\bar{r}_3 \dots d\bar{r}_N \delta(\bar{r}_1 - \bar{r}_1') \delta(\bar{r}_2 - \bar{r}_2') |\Phi(\bar{r}_1', \bar{r}_2', \dots)|^2 \dots (I.16')$$

donde $P(\bar{r}_1)$ es la densidad del sistema en $\bar{r}_1$ y $\Phi(\bar{r}_1, \bar{r}_2, \dots, \bar{r}_N)$ es su función de onda.

En nuestro caso, utilizamos la función de onda en la aproximación de Hartree-Fock, y así decimos que calculamos la función de correlación de pares en la aproximación de Hartree-Fock; se van a analizar los dos casos que se han estudiado - (solución de ondas planas paramagnética y ferromagnética).

La función de correlación de pares (I.16') en la aproximación de Hartree-Fock, dado que la función de onda es un determinante (3), resulta ser:

$$D(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\mathcal{V}(\vec{r}_1)} \sum_{K, l} \langle K, l | \mathcal{J}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \mathcal{J}(\vec{r}_2' - \vec{r}_2) | K, l - l, K \rangle \dots (I.17)$$

que en el caso de la solución de ondas planas está dada por:

$$D(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = P_0 \left\{ 1 - S_p \exp \left(\frac{\sin \frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{2} \cos \frac{\pi}{2}}{\frac{\pi}{2}} \right) \right\} \dots (I.18)$$

donde:

$$S_p = \begin{cases} 1/2 & \text{si tenemos un sistema paramagnético} \\ 1 & \text{si tenemos un sistema ferromagnético} \end{cases}$$

$$\mathcal{J} = K_b / |\vec{r}_2 - \vec{r}_1| \quad \text{y} \quad P_0 = \frac{N}{V}$$

Dado que el sistema es homogéneo, $D(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ solo depende de la separación entre partículas $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$.

En los límites, cuando la separación es infinita:

$$\lim_{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1| \rightarrow \infty} D(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \begin{cases} P_0 & \text{Paramagnético} \\ P_0 & \text{ferromagnético} \end{cases} \dots (I.19)$$

y cuando la separación es cero:

$$\lim_{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1| \rightarrow 0} D(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \begin{cases} P_0/2 & \text{Paramagnético} \\ 0 & \text{ferromagnético} \end{cases} \dots (I.20)$$

(ver figura I).

La interpretación que podemos darle a estos resultados es que en la aproximación de Hartree-Fock, solamente estamos tomando en cuenta la correlación estadística, por lo que en esta aproximación, para el sistema paramagnético, los electrones de diferente espín pueden estar en el mismo lugar lo --

cual es imposible debido a que en realidad la correlación dinámica no los deja acercarse, mientras que en el sistema ferromagnético, ya que todos los electrones tienen el mismo espín, la correlación estadística no los deja acercarse y ningún par de electrones pueden estar en el mismo lugar.

Como resultado del análisis de estos dos sistemas, encontramos que:

$$E_{\text{cinética para}} < E_{\text{cinética ferro}}$$

$$E_{\text{pot inter ferro}} < E_{\text{pot inter para}}$$

en donde la energía cinética ferromagnética aumenta con respecto a la energía cinética paramagnética debido, como ya se dijo, a que vamos a tener el doble de estados ocupados en el caso ferromagnético, mientras que la energía de intercambio ferromagnética es menor que la paramagnética ya que en el caso ferromagnético, ningún par de electrones pueden estar en el mismo lugar, lo que disminuye la energía potencial en el caso de interacciones repulsivas.

I.3 SOLIDO DE WIGNER.

Por otra parte, Wigner (1) estudia el problema semiclásicamente suponiendo que a bajas densidades ($r_s \gg 1$), el sistema de electrones se cristaliza. El supone que cada electrón está rodeado por una esfera de carga positiva de radio r_0 , ($r_0 =$ distancia promedio entre partículas) equivalente a la carga del electrón de tal manera que el sistema electrón-esfera de carga positiva sea eléctricamente neutro, y de aquí que no existe interacción con las demás esferas. La energía potencial se determina calculando el trabajo neces-

rio para traer un electrón desde el infinito hasta el centro de la esfera de carga positiva. Por otra parte, la energía cinética corresponde a la energía del punto cero que se obtiene al considerar el potencial electrostático a que está sometido el electrón dentro de la esfera, el cual resulta ser de oscilador armónico.

La energía del sistema puede escribirse como:

$$E_{s0}/d_0 = \left(\frac{3}{\tau_8^{1/2}} - \frac{1.8}{\tau_5} \right) R_y d. \quad \dots (I.21)$$

donde el primer término representa la energía cinética y el segundo la energía potencial.

Si graficamos las ecuaciones: (I.13) que corresponde a la energía cinética de ondas planas en la aproximación de ---- Hartree-Fock, y (I.21), se tiene que a bajas densidades, la -- energía del sólido de Wigner siempre es mas baja que la de ondas planas (ver gráfica II).

Los resultados que obtiene Wigner al resolver el problema -- suponiendo desde el principio que a bajas densidades el sistema está en un estado cristalino, sugieren la posibilidad -- de encontrar soluciones localizadas que nos den una energía menor que la de ondas planas.

Es por este motivo que en el capítulo siguiente se analiza una nueva solución (localizada) a las ecuaciones de Hartree-Fock.

CAPITULO II

ORBITALES HARTREE-FOCK NO-TRIVIALES.

En este capítulo se van a analizar soluciones no triviales a las ecuaciones de Hartree-Fock cuyas densidades nos den una cristalización en el sistema. Se analiza la función de correlación de pares para tratar de entender los resultados.

II.1 SOLUCION TIPO OVERHAUSER.

Overhauser (6) es el primero en estudiar este problema y de muestra la existencia de soluciones localizadas a las ecuaciones de Hartree-Fock en forma matricial.

Ahora vamos a trabajar con soluciones a las ecuaciones de Hartree-Fock del tipo overhauser en un sistema de electrones en el modelo de jalea.

La función de onda que se propone está dada por:

$$\varphi_k = C e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}} (1 + \alpha e^{i \vec{g} \cdot \vec{r}}) \quad \dots (II.1)$$

$$C^{-2} = V(1 + \alpha^2) \quad \alpha = \alpha_0 e^{-i\theta} \quad 0 < k < k_0$$

que es una onda plana modulada por otra onda de longitud de onda $2\pi/g$ donde α y g son dos parámetros que pueden ser utilizados como parámetros variacionales, y k_0 es el radio de la esfera de Fermi que representa a todos los estados ocupados.

Se puede demostrar (ver apéndice I), que estas funciones son soluciones a las ecuaciones de Hartree-Fock (I.8) siempre y cuando $g \geq 2k_0$ lo que significa que diagonalizan solamente

te la parte de la matriz que corresponde a los estados ocupados, ya que los elementos de matriz que obtenemos, corresponden a términos que contienen $\delta_{K', K+nq}$ donde $n=0, 1, 2$, que en el caso en que $q \geq 2k_0$, $K+nq$ nunca será igual a K , --- excepto en el caso $n=0$ en el que tenemos $\delta_{K', K}$. Así decimos que las funciones (II.1) son soluciones a las ecuaciones de Hartree-Fock en forma matricial (ecuación I.8) para $q \geq 2k_0$, pero no resuelven las ecuaciones (I.7) que están en forma integro-diferencial, es decir, no diagonalizan toda la matriz hamiltoniana y esto es a lo que se llama una base mínima.

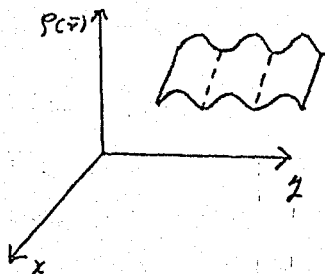
La densidad de partículas para esta función está dada por:

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{k(occ)} |\psi_{k,c}|^2 = \frac{N}{V} (1 + \mu \cos(\vec{q} \cdot \vec{r} + \theta)) \dots\dots (II.2)$$

donde: $\mu = \frac{2|\Delta|}{(1+|\Delta|^2)}$

como podemos notar, existe degeneración con respecto a θ ya que nos permite elegir el origen que se quiera; por simplicidad en el cálculo se escoge $\theta=0$.

La gráfica de la densidad se ve de la forma:



por lo que llamaremos a esta solución "Solución Tipo Lámina Corrugada $\psi_{k,c}$ ".

Como podemos observar, la densidad en este caso no es homogénea y de aquí que la función de onda propuesta supone implícitamente una localización en el sistema y se espera que a bajas densidades exista una transición de fase de la solución de ondas planas (que como ya se dijo, es casi ideal a altas densidades), a la solución de lámina corrugada, si la localización en el sistema es expresable como una solución a las ecuaciones de Hartree-Fock.

La energía por partícula que se encuentra para esta solución (ver apéndice II) está dada por:

$$\frac{E_{LC}}{N} = \epsilon_{LC} = \epsilon_{OP} + \Delta E \quad \dots (II.3)$$

donde :

$$\Delta E = \frac{\beta}{(1+\beta)} \frac{Q^2 (14.72)}{r_s} + \frac{0.407}{r_s} \frac{\beta}{(1+\beta)^2} \left[\frac{1}{Q^2} - f(Q) \right] \dots (II.4)$$

y:

$$f(Q) = 2.9975 \left[\left(\frac{11}{10} + \frac{Q^2}{5} \right) + \left(\frac{1}{5Q} - Q \right) \ln \left| \frac{Q+1}{Q-1} \right| + Q^2 \left(1 - \frac{Q^2}{5} \right) \ln \left| \frac{Q^2}{Q^2-1} \right| \right] \quad \dots (II.5)$$

con $Q \equiv \frac{r}{2k_0}$ y $\beta \equiv 121^2$

El primer término en (II.3), corresponde a la energía de ondas planas (ver ecuación I.13), y el segundo, ΔE , corresponde a la diferencia de energías $E_{LC} - E_{OP}$. En ΔE el primer término corresponde a la energía cinética, el término que va como $1/Q^2$ corresponde a la energía potencial del término direc

to, y el término que contiene a $f(q)$ es debido a la energía del término de intercambio.

Para encontrar a qué densidad se encuentra esta transición de fase, se sigue el criterio de mínima energía, y por lo tanto, la condición para un mínimo en (II.3) está dada por:

$$\epsilon'_{lc} = 0$$

$$\epsilon''_{lc} > 0$$

Estas condiciones determinan para qué τ_3 , la energía de lámina corrugada es menor que la energía de ondas planas E_{op} , esto es:

$$\Delta E = E_{lc} - E_{op} \leq 0 \quad \dots\dots\dots (II.6)$$

pero como podemos observar de la ecuación (II.4), el único término negativo corresponde al término de intercambio y de la gráfica (ver gráfica III) se puede ver que $\frac{1}{2}q^2$ siempre va a ser mayor y aproximadamente el doble que $f(q)$ por lo que concluimos que para cualquier valor de Q y de β -- que son nuestros parámetros variacionales, la energía de ondas planas siempre va a ser menor que la de lámina corrugada independientemente de la densidad del sistema.

Este resultado se puede interpretar observando que para esta solución (ecuación II.1), los electrones van a estar -- más cerca unos de otros conforme la densidad aumente y de esta manera se va a encontrar un aumento en su energía cinética, además, el término directo, que es positivo, en este caso no se va a eliminar totalmente, mientras que el término de intercambio que es el único término negativo en la

energía, no es suficiente para anular este aumento.

Para visualizar claramente estos resultados, se va a analizar la función de correlación de pares como en el capítulo anterior, para entender que tan correlacionado está nuestro sistema en este tipo de soluciones.

II.2 FUNCION DE CORRELACION DE PARES PARA LA "SOLUCION TIPO LAMINA CORRUGADA".

La función de correlación de pares en la aproximación de Hartree-Fock, está dada por la ecuación (I.17), y sustituyendo la ecuación (II.1) en (I.17), se encuentra que:

$$D(\bar{r}_1, \bar{r}_2) = \frac{\rho_0^2}{\rho(\bar{r}_1)} \left\{ 1 + \mu \cos(\bar{q} \cdot \bar{r}_1) \right\} \left\{ 1 + \mu \cos(\bar{q} \cdot \bar{r}_2) \right\} F(r) \quad (\text{II.7})$$

donde:

$$F(r) = \left\{ 1 - \frac{q}{2} \left(\frac{\sin r - r \cos r}{r^3} \right) \right\} \quad \dots\dots(\text{II.8})$$

$$\xi = k_0 / |\bar{r}_2 - \bar{r}_1| \quad \mu = \left(\frac{2/21}{1+1/21} \right)$$

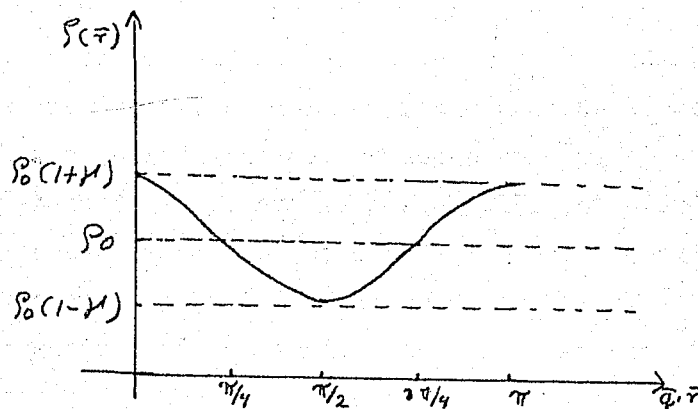
sustituyendo la ecuación (II.2) en (II.7), tomando $q = 2k_0Q$, $\xi_2 = k_0\tau_2$ escogiendo $Q=1$, para ilustrar el comportamiento de la función, se tiene que:

$$D(\bar{r}_1, \bar{r}_2) = \rho_0 \left\{ 1 + \mu \cos 2\xi_2 \right\} F(r) \quad \dots\dots\dots(\text{II.9})$$

de la ecuación (II.9), se puede observar que la función de correlación de pares para esta solución, no es independiente del origen que se escoja, esto se puede entender ya que la densidad de partículas no es homogénea; además existe u-

na dependencia en μ y por tanto depende de α que nos indica la amplitud de la onda modulante (ver ecuación II.1), como podemos observar, $\mu = \frac{2|\alpha|}{c(1+\alpha^2)}$ solamente toma valores entre cero y uno, $0 \leq \mu \leq 1$ y para $\mu=0$ el problema se reduce al caso de ondas planas que se revisó en el capítulo anterior.

Para ilustrar el comportamiento de la función de correlación de pares, vamos a escoger varios orígenes en la densidad la cual se puede ver en la siguiente figura:



escogemos dos orígenes diferentes, $r_1 = 0, r_2$ para ver que densidad de partículas existe en r_2 dada una partícula en r_1 . Fijamos el valor de μ en $\mu=1$.

Sustituyendo estos valores en (II.9), se encuentra que:

$$D_{\mu=1}(r_1=0, r_2) = \rho_0 (1 + \cos 2s) F(s) \quad \dots\dots (II.10)$$

$$D_{\mu=1}(r_1=\frac{\pi}{2}, r_2) = \rho_0 (1 - \cos 2s) F(s) \quad \dots\dots (II.11)$$

El comportamiento de D en función de ξ se ilustra en las gráficas IV y V. Como podemos observar de la gráfica V, para $\gamma = 1$ y $\xi_1 = \pi/2$ tenemos que la densidad de partículas en $\xi_2 = \xi_1$ es cero, esto es debido a que en este punto la densidad es cero, pero en general, como se puede ver de la ecuación (II.9), y en particular de la gráfica IV, la densidad de partículas en $\xi_2 = \xi_1$ dado que en ξ_1 exista una densidad de partículas $\rho(\xi_1)$ siempre es $\frac{1}{2} \rho(\xi_1)$ mientras que cuando la separación tiende a infinito, D tiende a $\rho(\xi_2)$. Este es el mismo comportamiento que en el caso de ondas planas, y es una característica de la aproximación de Hartree-Fock para el caso paramagnético, en donde como ya se dijo, solo se está tomando en cuenta la correlación estadística. Esto nos hace pensar en otro tipo de soluciones localizadas a las ecuaciones de Hartree-Fock en donde los electrones de diferente espín estén separados, y de esta manera, tomar en cuenta otro tipo de correlación estadística.

Como conclusión, tenemos que para la solución tipo lámina corrugada, el término de intercambio no es suficiente para que $\Delta E < 0$ y esto es debido a que la correlación estadística disminuye la energía de intercambio pero no lo suficiente para compensar el aumento que se obtiene al acercar las partículas.

Dados estos resultados, el caso en tres dimensiones no se trata ya que se espera un aumento en la energía.

II.3 OTRO TIPO DE SOLUCIONES.

Haciendo referencia a esto, M. de Llano y A. Plastino (7) -- proponen una modificación a la solución tipo lámina corruga

da, en donde las partículas con espín arriba y espín abajo, oscilan fuera de fase, lo que nos dá una estructura antiferromagnética.

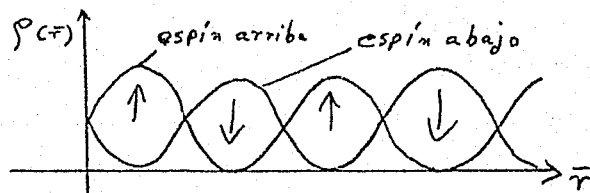
Se definen las orbitales ortonormalizadas:

$$\varphi_k(\vec{r}) = C e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} (1 + S_0 \alpha e^{i\vec{g}\cdot\vec{r}}) \quad \dots (II.12)$$

$$C^{-2} = V(1 + |\alpha|^2) \quad g > 2k_0$$

con $S_0 = \pm 1$ para espín arriba o abajo respectivamente, y demuestran que son soluciones a las ecuaciones de Hartree-Fock en forma matricial (ecuación I.9).

La densidad se ve de la forma:



M. de Llano y A. Plastino utilizan estas funciones para una interacción delta repulsiva $v(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = v_0 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ $v_0 = c\epsilon$ y demuestran que $\Delta E = \epsilon(\beta) - \epsilon_{op} \leq 0$ donde $\epsilon_{op} = \epsilon(0)$ tomando el valor de β tal que $\epsilon'(\beta) = 0$ y $\epsilon''(\beta) > 0$ ya que teniendo una interacción repulsiva para que la energía disminuya es necesario que los electrones con espines diferentes se encuentren lo más separados posible.

La interacción delta repulsiva nos puede dar una idea de cómo se van a comportar sistemas con interacción entre partículas repulsivas como en el sistema de electrones (repulsivos) en el modelo de jalea en el que estamos interesados.

Además, Aguilera, M. de Llano, S. Peltier y A. Plastino (8) demuestran la existencia de dos familias de funciones que tam

bién son soluciones de Hartree-Fock en forma matricial:

$$\varphi_k^{(n)}(\vec{r}) = C e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} (1 + \alpha e^{i\vec{r}\cdot\vec{x}})^n (1 + \alpha e^{i\vec{r}\cdot\vec{y}})^n (1 + \alpha e^{i\vec{r}\cdot\vec{z}})^n \quad (\text{II.13})$$

$$\varphi_k^{(n)}(\vec{r}) = C e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} (1 + \alpha \cos \vec{r}\cdot\vec{x})^n (1 + \alpha \cos \vec{r}\cdot\vec{y})^n (1 + \alpha \cos \vec{r}\cdot\vec{z})^n \quad (\text{II.14})$$

donde n es un entero positivo, siempre y cuando $\vec{r} \geq 2k_0$.

En este caso se está tomando un cubo de fermi de lado $2k_0$ en lugar de tomar la esfera de fermi, esto se hace por simplicidad, debido a la forma de las ecuaciones (II.13) y --- (II.14) que son separables en las coordenadas (x, y, z) , y se demuestra (7) que la energía que se obtiene al tomar un cubo de fermi no difiere mucho de la que se obtiene al tomar una esfera de fermi.

Los autores demuestran que para una interacción delta atractiva $v_0 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$, dada una v_0 , existe un valor de α al que llaman α_c crítica tal que para valores mayores que α_c la energía correspondiente es menor que la de ondas planas.

En el capítulo siguiente vamos a extender el cálculo de Aguilera, M. de Llano, S. Peltier y A. Plastino para el caso de una interacción delta repulsiva utilizando la estructura de espín de las ecuaciones (II.12).

CAPITULO III

ORBITALES HARTREE-FOCK NO TRIVIALES CON ORDENAMIENTO DE ESPINES.

En este capítulo se calcula la energía Hartree-Fock para dos familias de funciones semejantes a las dadas por las ecuaciones (II.13) y (II.14), que son soluciones autoconsistentes a las ecuaciones matriciales de Hartree-Fock, pero ahora se toma un ordenamiento en los espines (estructura antiferromagnética) para una interacción delta repulsiva entre partículas. Se espera, como se analizó en el capítulo anterior, -- que al separar a las partículas de diferente espín, se tenga una disminución en la energía debido a que en este caso vamos a tener otro tipo de correlación estadística del que se toma en la aproximación de Hartree-Fock para el caso paramagnético.

Se calcula la energía Hartree-Fock del sistema para una interacción delta repulsiva de la forma $v(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = v_0 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ con $v_0 = \epsilon^2 \geq 0$.

III.1 FAMILIA I

La primera familia de funciones que se va a analizar, se construye tomando orbitales separados para cada coordenada cartesiana:

$$\Phi_K^{(n)}(\vec{r}) = \varphi_{k_1, r}^{(n)}(x) \varphi_{k_2, r}^{(n)}(y) \varphi_{k_3, r}^{(n)}(z) \dots \dots \dots (III.1)$$

donde:

$$\varphi_{k,r}^{(n)}(x) = C_x e^{ik_x x} (1 + \alpha S_r e^{i p x})^n \dots (III.2)$$

$$\alpha = 1d/e^{i\phi}$$

lo que refleja una dependencia en la selección del origen; y tenemos lo mismo para "y" y para "z",

$$S_r = \begin{cases} +1, & \text{si tenemos espín arriba} \\ -1, & \text{si tenemos espín abajo} \end{cases}$$

$$C_x^{-2} = L \sum_{l=0}^n \binom{n}{l}^2 \alpha^{2l} \quad y \quad \sum_{\sigma} S_{\sigma} = 0$$

donde $C = C_x C_y C_z$ nos da la normalización de $\Phi_k(\vec{r})$ dentro del volumen $V = L^3$; $\binom{n}{l} = \frac{n!}{(n-l)!l!}$ son los coeficientes binomiales.

Las funciones (III.1) son soluciones siempre y cuando $q \gg 2k_0$ (resuelven las ecuaciones de Hartree-Fock en forma matricial).

Nuevamente es conveniente tomar el cubo de fermi de lado $2k_0$ dada la estructura de las funciones (III.1).

La densidad resulta estar dada por:

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{k \text{ occ}} |\Phi_k(\vec{r})|^2 = \rho_0 \frac{\sum_{j=0}^{n/2} \binom{n}{2j} A^{n-2j}(\vec{r}) B^{2j}(\vec{r})}{\left(\sum_{l=0}^n \binom{n}{l}^2 \alpha^{2l} \right)^3} \quad (III.3)$$

donde:

$$A(\vec{r}) \equiv \left[(1 + \alpha^2)^3 + (2\alpha)^2 (1 + \alpha^2) (\cos q_x \cos q_y + \cos q_y \cos q_z + \cos q_z \cos q_x) \right] \dots (III.4)$$

$$B(\vec{r}) = \left[2\alpha (1 + |\alpha|^2)^2 (\cos \varphi_x + \cos \varphi_y + \cos \varphi_z) + (2\alpha)^3 \cos \varphi_x \cos \varphi_y \cos \varphi_z \right] \dots \quad (\text{III.5})$$

El cálculo de la energía Hartree-Pock que resulta de sustituir (III.1) en (I.9) donde:

$$E_{HF} = \sum_{K(\text{occ})} \langle K | T | K \rangle + \frac{1}{2} \sum_{K_1 K_2 (\text{occ})} \langle K_1 K_2 | V_{12} | K_1 K_2 - K_2 K_1 \rangle \dots \dots \dots (\text{I.9})$$

para una interacción delta repulsiva, se encuentra que está dado por (ver apéndice III):

$$\begin{aligned} E_n(\xi, \lambda, \alpha) = & 1 + \left(2 Q^2 \sum_{l=0}^n \binom{n}{l}^2 \alpha^{2l} \right) \left(\sum_{l=0}^n \binom{n}{l}^2 \alpha^{2l} \right)^{-1} \\ & + \frac{\lambda}{3} \left\{ \left(\sum_{s,l=0}^n \binom{n}{l} \binom{n}{s} (1 + |\alpha|^2)^{2n-(s+l)} (2\alpha)^{s+l} I_{s+l} \right)^3 \right. \\ & + \left(\sum_{s,l=0}^n \binom{n}{l} \binom{n}{s} (1 + \alpha^2)^{2n-(s+l)} (2\alpha)^{s+l} (-1)^l I_{s+l} \right)^3 \\ & \left. - \left(\sum_{l=0}^{2n} \binom{2n}{l}^2 \alpha^{2l} \right)^3 \right\} \left\{ \sum_{l=0}^n \binom{n}{l}^2 \alpha^{2l} \right\}^6 \dots \dots (\text{III.6}) \end{aligned}$$

donde $E_n = \frac{2mE}{\hbar^2 K_0^2 N}$ es la energía por partícula en n dimensional, y:

$$Q = \frac{2}{2K_0} \quad \lambda = \frac{3m v_0 K_0}{\hbar^2 \pi^3} \dots (\text{III.7})$$

$$I_\ell \equiv \frac{1}{\pi} \int_0^\pi dx \cos^\ell x = \frac{1}{2} [1 + (-1)^\ell] \frac{1}{2^\ell} \left(\frac{\ell}{\ell/2} \right) \dots (III.8)$$

El primero y segundo términos corresponden a la energía cinética, el tercero y cuarto a la energía del término directo y el quinto a la energía de intercambio.

En el caso en que $\alpha \rightarrow 0$ tenemos que (III.8) $\rightarrow (1 + \frac{\lambda}{3})$ — que nos dá el caso de ondas planas:

$$\epsilon_n(Q, \lambda, \alpha=0) = \epsilon_{op}(\lambda) = (1 + \frac{\lambda}{3}) \dots (III.9)$$

y queremos encontrar para que valor de α :

$$\Delta E = \epsilon^{(n)}(Q, \lambda, \alpha) - \epsilon_{op}(\lambda) \leq 0 \quad \dots (III.10)$$

Claramente se ve por inspección que como $q \geq 2k_0$, y debido a que el término que contiene a Q es positivo, que la energía se minimiza en el parámetro Q para $Q=1$.

Dado que α es un parámetro variacional, la energía se minimiza cuando se encuentra el valor de alfa dado por:

$$\frac{\partial \epsilon_n(\lambda, \alpha)}{\partial \alpha} = 0 \quad y \quad \frac{\partial^2 \epsilon_n(\lambda, \alpha)}{\partial \alpha^2} > 0 \quad \dots (III.11)$$

para cada n y λ . Debido a la estructura de las ecuaciones (III.6) este calculo se puede realizar numéricamente.

En el caso $n=1$ los resultados de la energía coinciden con los encontrados por M. de Llano y A. Plastino (7), quienes

encuentran por medio de un análisis numérico, que para $\lambda > \lambda_c = 6$ esta solución es más estable ($\Delta E < 0$) que la de ondas planas. Se espera que para $n \geq 1$ se tenga también que $\Delta E < 0$ ya que, como ya se dijo, esta familia de soluciones nos da una estructura antiferromagnética, y como se puede ver de la tabla I, al aumentar el valor de n , la densidad va a dar zonas más localizadas y las partículas con espín antiparalelo van a estar más separadas.

Tabla I

	$n=1$	$n=7$	$n=15$
$\rho(0,0,0)$	3.65	44.9214	
$\rho(\pi/2, \pi/4, \pi/2)$	1.245	3.915×10^{-7}	
$\rho(\pi, \pi, \pi)$	3.65	44.9214	

El hecho de que esta familia nos da una estructura antiferromagnética se puede ver analizando la densidad neta de espín en los puntos $(0,0,0)$ y (π, π, π) que es donde tenemos nuestros máximos en la densidad (ver tabla I). Este análisis se puede hacer calculando la densidad de espín "arriba" y la densidad de espín "abajo" en estos dos puntos:

$$\rho_{\uparrow}(\vec{r}) = \sum_{k \in \text{occ}} |\varphi_{k,\uparrow}(\vec{r})|^2 = \sum_{k \in \text{occ}} |c|^2 (1 + d e^{i8x})^{2n} \times$$

$$\times (1 + d e^{i8y})^{2n} (1 + d e^{i8z})^{2n}$$

$$\rho_{\uparrow}(0,0,0) = \frac{N}{2} |c|^2 (1+d)^{6n}$$

$$\rho_{\uparrow}(\pi, \pi, \pi) = \frac{N}{2} |c|^2 (1-d)^{6n}$$

$$\rho_{\downarrow}(\vec{r}) = \sum_{k \in \text{occ}} |c|^2 (1 - d e^{i8x})^{2n}$$

$$(1 - d e^{i8y})^{2n} (1 - d e^{i8z})^{2n}$$

$$\rho_{\downarrow}(0,0,0) = \frac{N}{2} |c|^2 (1-d)^{6n}$$

$$\rho_{\downarrow}(\pi, \pi, \pi) = \frac{N}{2} |c|^2 (1+d)^{6n}$$

por lo tanto, la densidad neta de espín en $(0,0,0)$ esta dada por:

$$\rho_{\uparrow}(0,0,0) - \rho_{\downarrow}(0,0,0) = \frac{N}{2} |c|^2 \left\{ (1+d)^{6n} - (1-d)^{6n} \right\}$$

$$= \frac{1}{2} \rho_0 \frac{\sum_{s=0}^{3n-1} \binom{6n}{2s+1} d^{2s+1}}{\left[\sum_{s=0}^n \binom{n}{s}^2 d^{2s} \right]^3}$$

mientras que en (π, π, π) tenemos el mismo resultado pero con signo contrario lo que nos dice, que independientemente de los valores de α y n , se encuentra que esta familia de soluciones, como era de esperarse, nos da una estructura -- antiferromagnética.

El proceso de minimización de la energía para esta familia de soluciones (ecuación III.6) se está llevando a cabo actualmente y se esperan encontrar resultados próximamente.

$$\begin{aligned}
 \text{Nótese: } \alpha=1: \quad P_{\uparrow}(0,0,0) - P_{\downarrow}(0,0,0) &= \frac{1}{2} \rho_0 \left[\frac{2^{2n}}{\sum_{s=0}^n \binom{n}{s}^2} \right]^3 \\
 &= \frac{1}{2} \rho_0 \frac{1}{I_{2n}^3} \\
 &\xrightarrow{n \gg 1} \frac{1}{2} \rho_0 (2\pi n)^{3/2}
 \end{aligned}$$

III.2 FAMILIA II

De acuerdo con la ecuación (II.14) del capítulo anterior, -- la segunda familia de funciones que nos dá un ordenamiento en los espines se ve de la forma:

$$\varphi_{k_x}^{(n)}(x) = C_x e^{ik_x x} [1 + S_\sigma \alpha \cos qx]^n \quad \dots (III.12)$$

$$\Phi_K^{(n)}(\vec{r}) = \varphi_{k_x}^{(n)}(x) \varphi_k^{(n)}(y) \varphi_{k_z}^{(n)}(z) \quad \dots (III.13)$$

donde:

$$C_x^{-2} = L \sum_{l=0}^n \binom{2n}{2l} \alpha^{2l} I_{2l}$$

$$S_\sigma = \begin{cases} +1 & \text{espín arriba} \\ -1 & \text{espín abajo} \end{cases}$$

I_l está dado por la ecuación (III.8), y nuevamente son soluciones a las ecuaciones de Hartree-Fock siempre y cuando $q \gg 2k_0$.

La densidad está dada por:

$$\rho(\vec{r}) = \frac{\sum_{s=0}^n \binom{2n}{2s} D^{2(n-s)}(\vec{r}) E_1^{2s}(\vec{r})}{\left[\sum_{l=0}^n \binom{2n}{2l} \alpha^{2l} I_{2l} \right]^3} \quad \dots (III.14)$$

donde:

$$D(\vec{r}) \equiv [1 + |\alpha|^2 (\cos qx \cos qy + \cos qy \cos qz + \cos qz \cos qx)] \quad (III.15)$$

$$E_1(\vec{r}) \equiv [\alpha (\cos qx + \cos qy + \cos qz) + |\alpha|^2 \cos qx \cos qy \cos qz] \quad (III.16)$$

donde por simplicidad se supone α real.

El cálculo de la energía, al sustituir (III.13) en (I.9), resulta estar dada por (ver apéndice IV):

$$\epsilon_m(Q, \lambda, \alpha) = 1 + \frac{12Q^2 n^2 \sum_{l=0}^{n-1} \binom{2n-2}{2l} I_{2l} \alpha^{2l}}{\sum_{l=0}^n \binom{2n}{2l} \alpha^{2l} I_{2l}} + \frac{\lambda}{3} \left\{ \frac{\sum_{s=0}^{2n} \binom{2n}{s} \binom{2n}{l} \alpha^{l+s} (-1)^l I_{5l}}{\left(\sum_{s=0}^n \binom{2n}{2s} \alpha^{2s} I_{2s} \right)^3} \right\} \dots (III.17)$$

donde

$$\epsilon_m(Q, \lambda, \alpha) = \frac{2mE}{\hbar^2 k_0^2 N}, \quad \lambda = \frac{3m v_0 k_0}{\hbar^2 \pi^3}, \quad Q = \frac{q}{2k_0}$$

El primero y segundo términos corresponden a la energía cinética y el tercero corresponde a una parte de la energía a debido al término directo, la otra parte se eliminó con el correspondiente a la energía del término de intercambio.

Por inspección se ve que la energía se minimiza en Q para

$Q=1$ y se reduce al caso de ondas planas :

$$\epsilon_m(1, \lambda, \alpha=0) = \epsilon_{op}(\lambda) = \left(1 + \frac{\lambda}{2}\right)$$

para $\alpha=0$, que es la misma que encontramos en la primera familia como era de esperarse.

Para ilustrar la forma de la densidad en esta familia, se han escogido valores para $n = 1, 7, 15, 50$ y se ha tomado

el caso en que $\alpha = \frac{1}{2}$ (ver gráficas VI, VII, VIII, IX, X, XI). Como podemos observar, el comportamiento de la densidad al aumentar n , va a dar nuevamente zonas mas localizadas y las partículas con espín antiparalelo van a estar mas separadas. Esto se puede ver mas claramente en la tabla II donde damos algunos valores de la densidad en los puntos donde se encuentran máximos o mínimos:

Tabla II

	$n=1$	$n=7$	$n=16$
$\rho(0,0,0)$	4.00548	79.20931	248.9122
$\rho(\pi/2, \pi/2, \pi/2)$	0.7023	0.0000064	0.00000
$\rho(\pi, \pi, \pi)$	4.00548	79.20931	248.9122

y es por esto que se espera que para esta familia de soluciones existan valores de α tales que $\Delta E < 0$.

Nuevamente, el hecho de que esta familia nos de una estructura antiferromagnética se puede ver analizando la densidad neta de espín en los puntos $(0,0,0)$ y (π, π, π) que es donde tenemos nuestros máximos (ver gráficas de la VI a la XI). Este análisis se puede hacer calculando la densidad de espín "arriba"

$$\rho_{\uparrow}(\vec{r}) = \sum_{K(0c)} |\varphi_{K,\uparrow}(\vec{r})|^2 = \sum_{K(0c)} |C|^2 (1 + \alpha \cos qx)^{2n}$$

$$\cdot (1 + \alpha \cos \theta_1)^{2n} (1 + \alpha \cos \theta_2)^{2n}$$

$$\rho_{\uparrow}(0,0,0) = \frac{N}{2} |C|^2 (1 + \alpha)^{6n}$$

$$\rho_{\uparrow}(\pi, \pi, \pi) = \frac{N}{2} |C|^2 (1 - \alpha)^{6n}$$

en estos dos puntos, y calculando la densidad de espín "abajo" nuevamente en estos dos puntos:

$$\rho_{\downarrow}(\vec{r}) = \sum_{k(\text{occ})} |C|^2 (1 - \alpha \cos \theta_x)^{2n} (1 - \alpha \cos \theta_y)^{2n} (1 - \alpha \cos \theta_z)^{2n}$$

$$\rho_{\downarrow}(0,0,0) = \frac{N}{2} |C|^2 (1 - \alpha)^{6n}, \quad \rho_{\downarrow}(\pi, \pi, \pi) = \frac{N}{2} |C|^2 (1 + \alpha)^{6n}$$

de aquí, que la densidad neta de espín en estos dos puntos está dada por:

$$\begin{aligned} \rho_{\uparrow}(0,0,0) - \rho_{\downarrow}(0,0,0) &= \frac{N}{2} |C|^2 \left\{ (1 + \alpha)^{6n} - (1 - \alpha)^{6n} \right\} \\ &= - \left\{ \rho_{\uparrow}(\pi, \pi, \pi) - \rho_{\downarrow}(\pi, \pi, \pi) \right\} \end{aligned}$$

lo que nos da una estructura antiferromagnética en donde al aumentar el valor de n , la densidad va a dar nuevamente zonas mas localizadas y las partículas con espín antiparalelo van a estar más separadas.

Nuestro resultado final para el valor de la energía está da

do en términos del parámetro α (ver ecuación III.17) y como ya se dijo, actualmente se está realizando un análisis numérico para minimizar dicha energía con respecto al parámetro variacional α .

Nótese: $\alpha = 1$: $\rho_{\uparrow}(0,0,0) - \rho_{\downarrow}(0,0,0) =$

$$= \frac{1}{2} \rho_0 \left[\frac{2^{2n}}{\sum_{s=0}^n \binom{2n}{2s} I_{2s}} \right]^3 > \frac{1}{2} \rho_0 \left[\frac{2^{2n}}{\sum_{s=0}^n \binom{n}{s}^2} \right]^3$$

$$> \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \frac{1}{2} \rho_0 (2\pi n)^{3/2}$$

EXPLICACION DE LAS GRAFICAS.

Gráfica I:

En esta figura se grafica la función de correlación de pares para la solución de ondas planas a las ecuaciones de Hartree-Fock en los casos ferromagnético y paramagnético. Se puede hacer notar, que en el caso ferromagnético la curva parte de cero, mientras que en el caso paramagnético la curva parte de $\frac{1}{2} S_0$.

Gráfica II:

En esta figura se grafica la energía por partícula que se obtiene de la solución de ondas planas a las ecuaciones de Hartree-Fock en la región de bajas densidades, también se grafica la energía que obtiene Wigner de su cálculo semiclásico a bajas densidades, y se observa que la energía del sólido siempre va a ser menor que la de ondas planas.

Gráfica III:

En esta figura se grafican $\frac{1}{Q}$ del término directo en el cálculo de la energía para la solución tipo lámina corrugada, y $f(q)$ del término de intercambio. Se puede notar que $\frac{1}{Q}$ siempre va a ser mayor que $f(q)$ por lo que se concluye que la energía de lámina corrugada siempre va a ser mayor que la de ondas planas.

Gráficas IV y V:

Acuí se grafica la función de correlación de pares para la solución tipo lámina corrugada, en la gráfica IV se escoge el origen en $\xi_1 = 0$ mientras que en la gráfica V se escoge $\xi_1 = \pi/2$, en general, el resultado que se obtiene es que en $\xi_1 = \xi_2$ siempre vamos a encontrar $1/2 P(\xi_1)$.

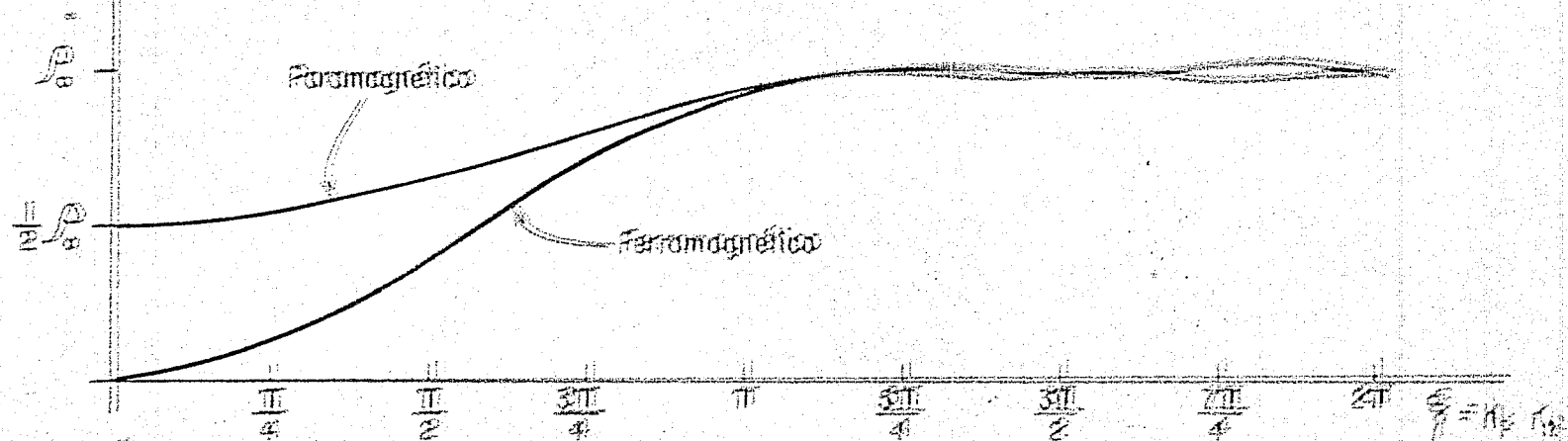
Gráficas VI, VII, VIII.:

En estas gráficas se dibuja la densidad de partículas para la familia II del tercer capítulo - para $n=1$ en tres planos diferentes; $z=0, \pi/2, \pi$, se puede notar que el valor de la densidad en el punto $(0,0,0)$ coincide con el del punto (π, π, π) .

Gráficas IX, X, XI :

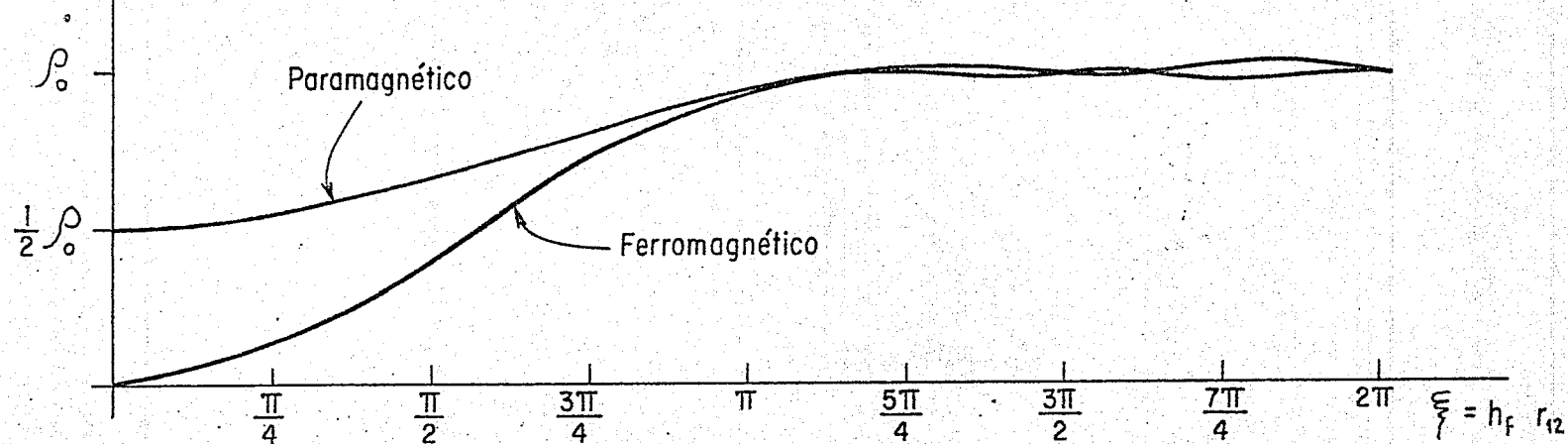
En esta figura se grafica la densidad de partículas para la segunda familia tomando el valor $n=7$, y como podemos observar al comparar las gráficas VI, VII, y VIII con estas gráficas, al aumentar el valor de n , se va a aumentar la localización en las partículas.

$D(\vec{r}, \vec{r})$

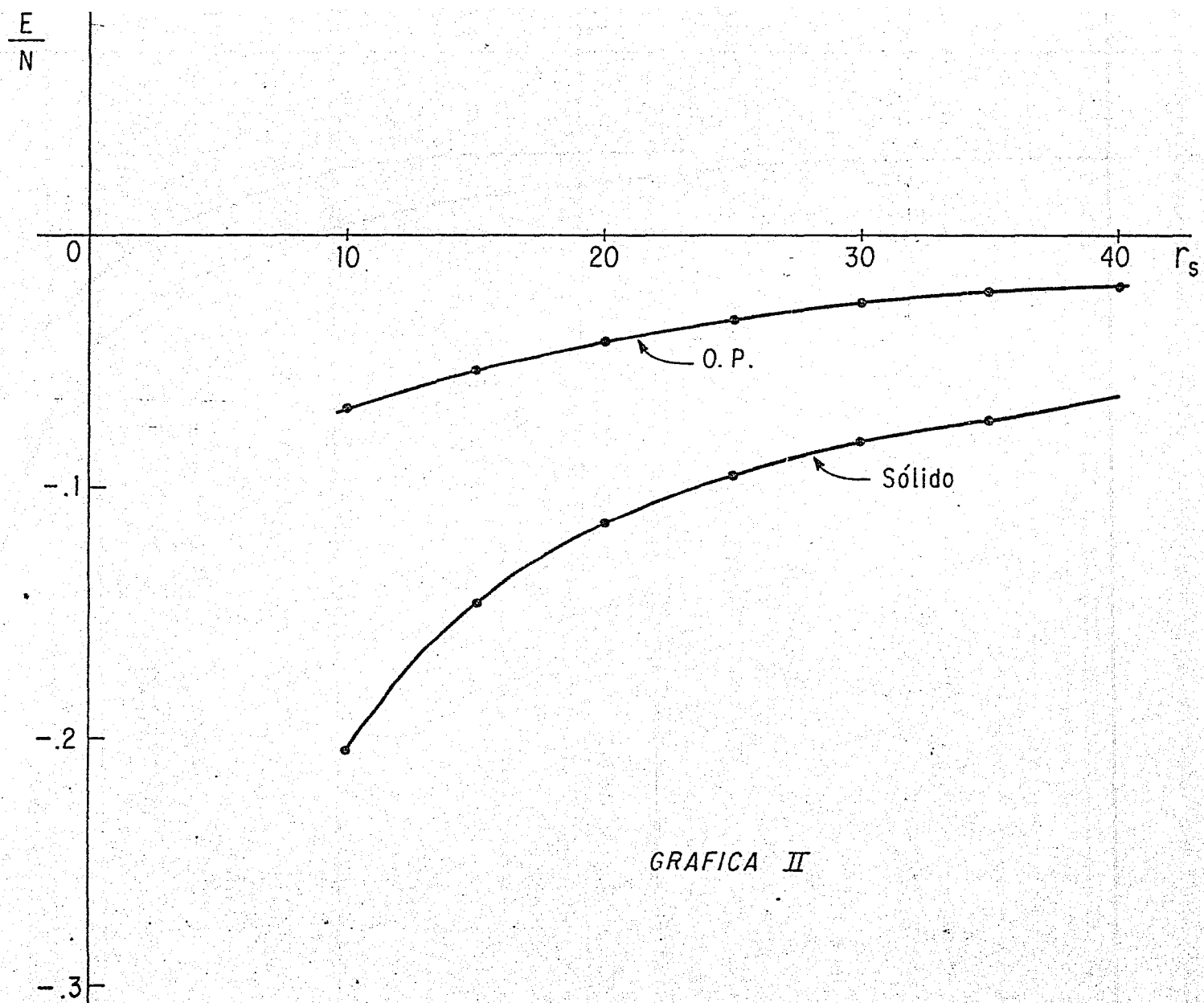


GRAFICA II

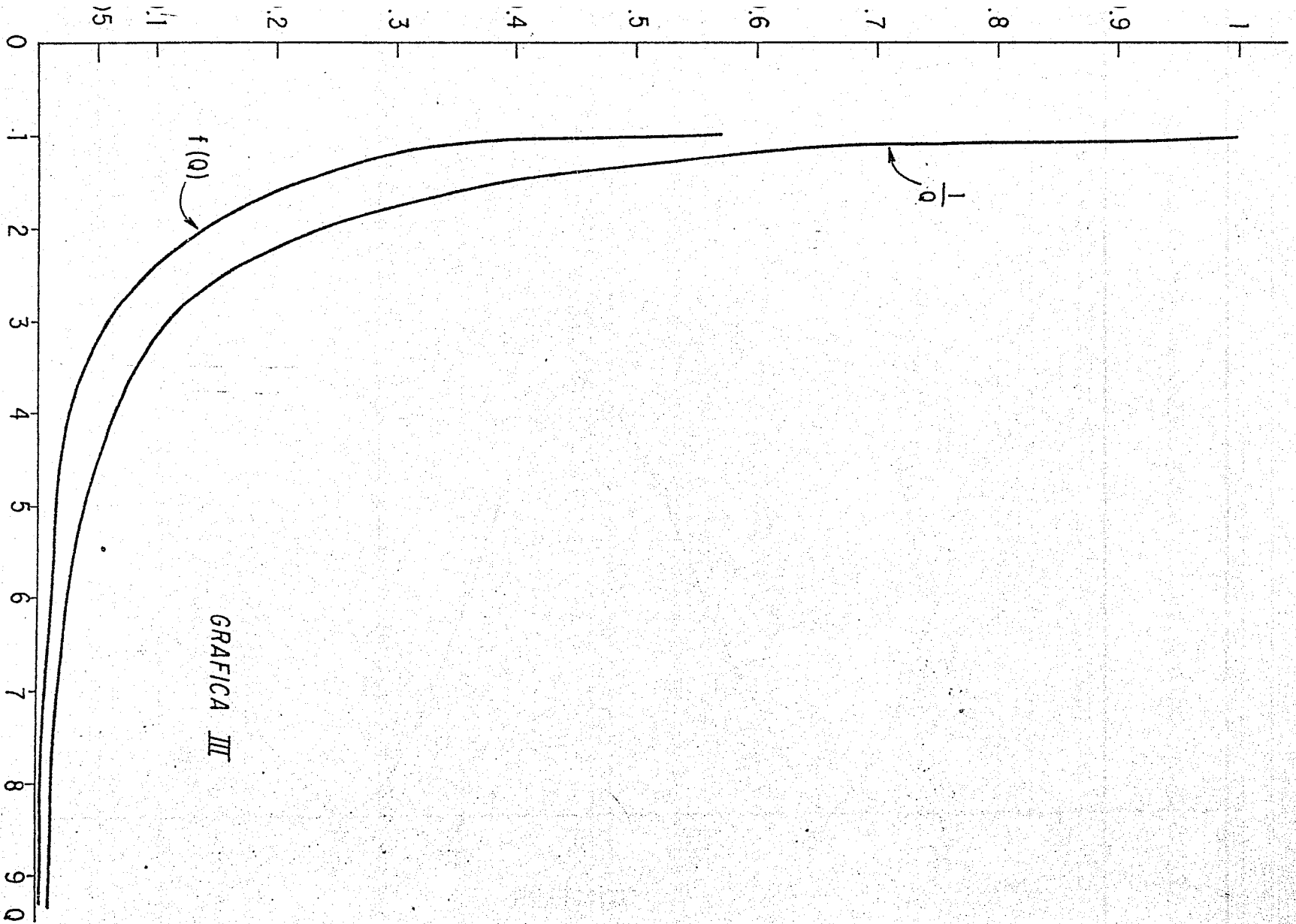
$D(\bar{r}_1, \bar{r}_2)$



GRAFICA I



GRAFICA II

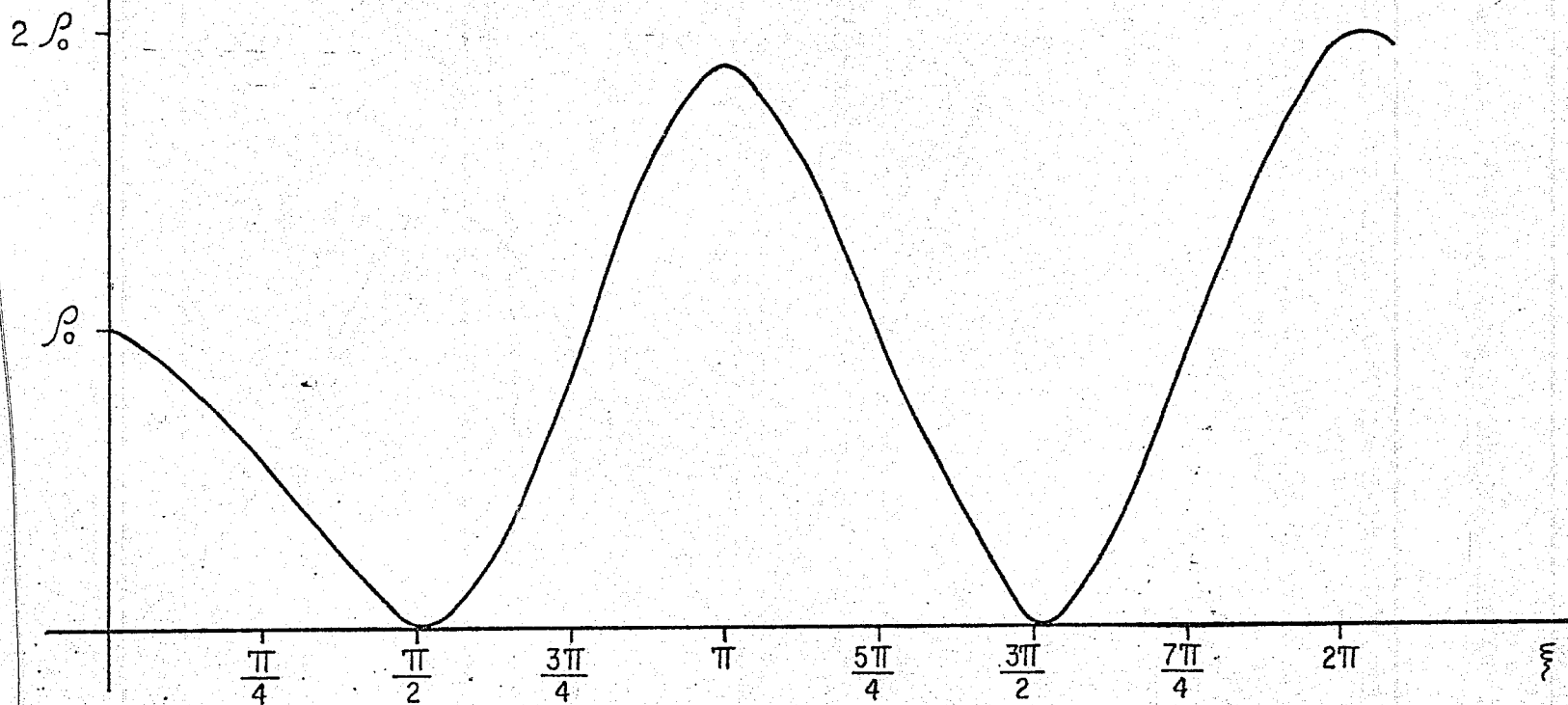


GRAFICA III

$D(r_1, r_2)$

$$\beta = 1$$

$$r_1 = 0$$

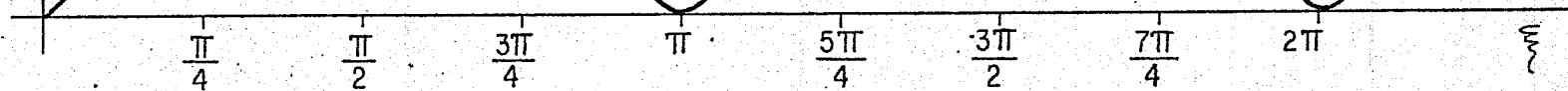


GRAFICA IV

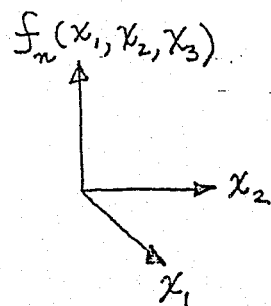
$D(r_1, r_2)$

$$\beta = 1$$

$$\xi_1 = \frac{\pi}{2}$$

 $2\rho_0$ ρ_0 

GRAFICA V

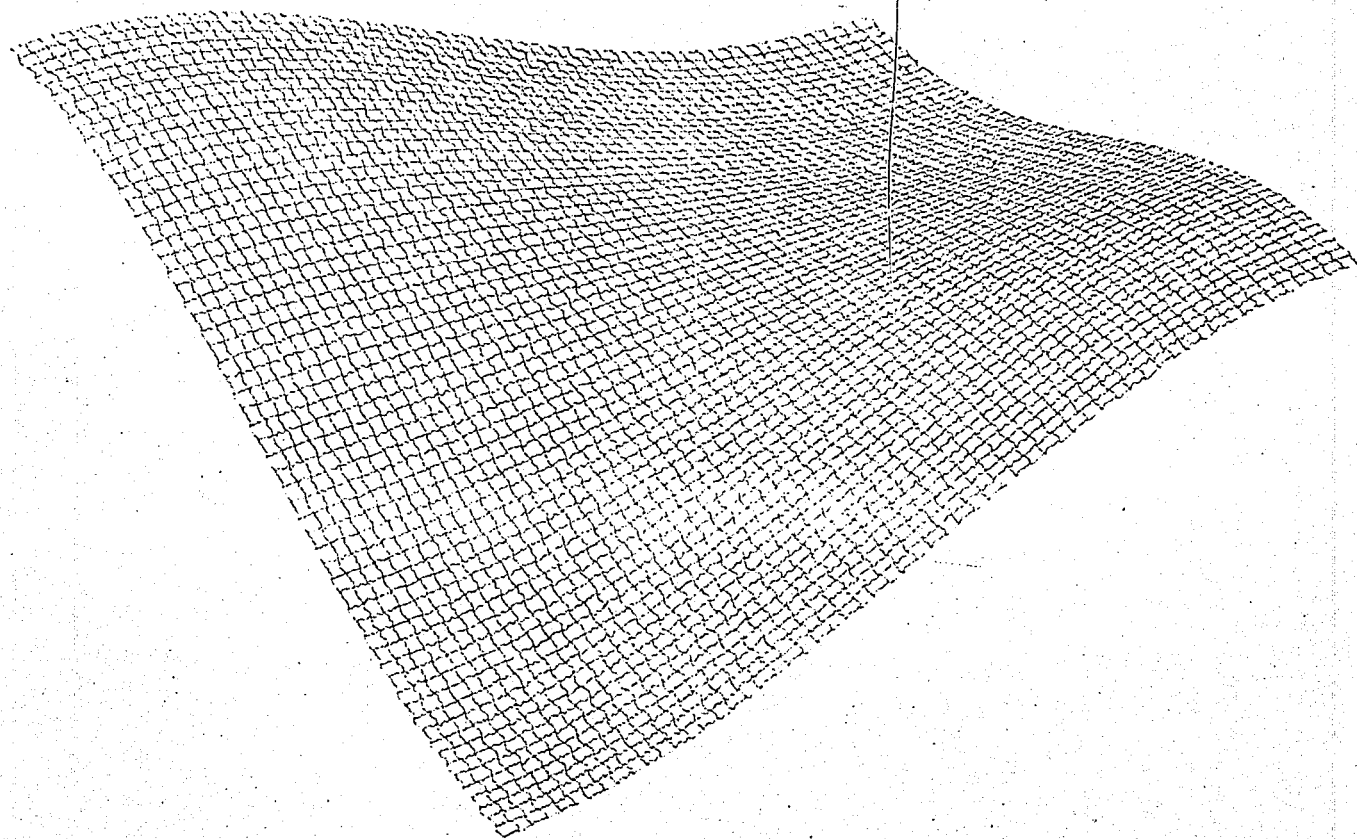


DENS1

N = 1

ALF = .5

Z = .0000

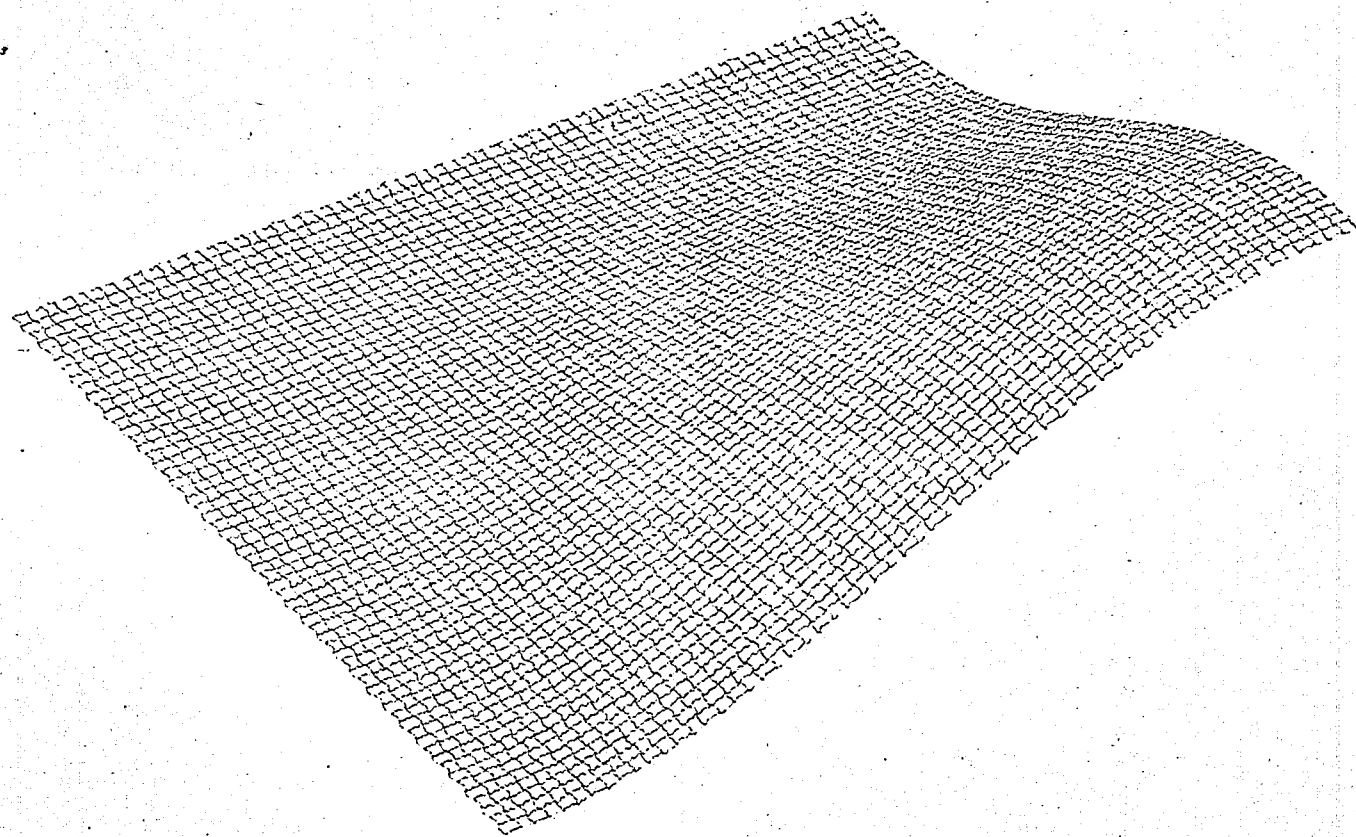


DENS1

N = 1

ALF = .5

Z = 1.5708



DENS1

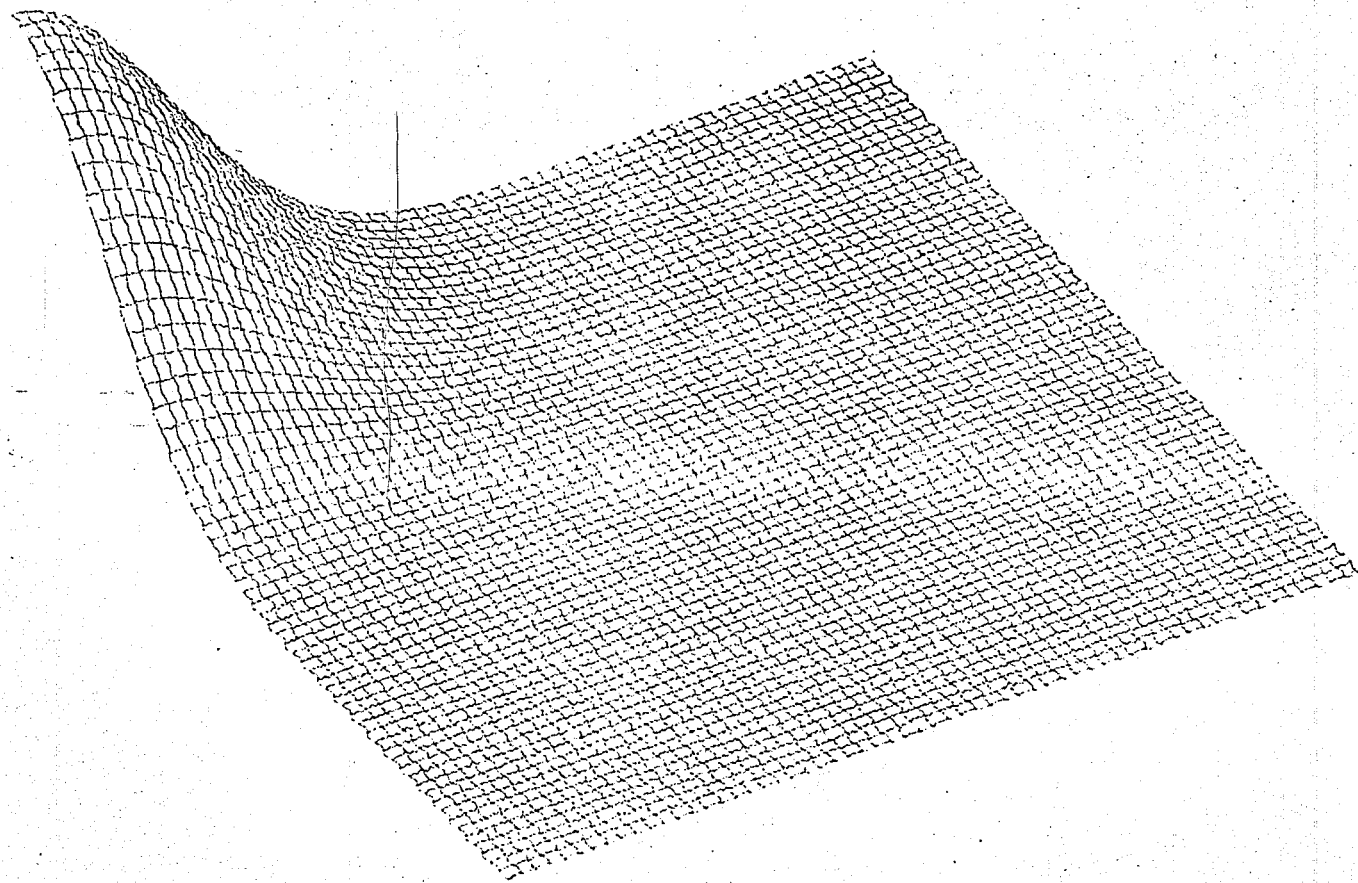
N = 1

ALF =

.5

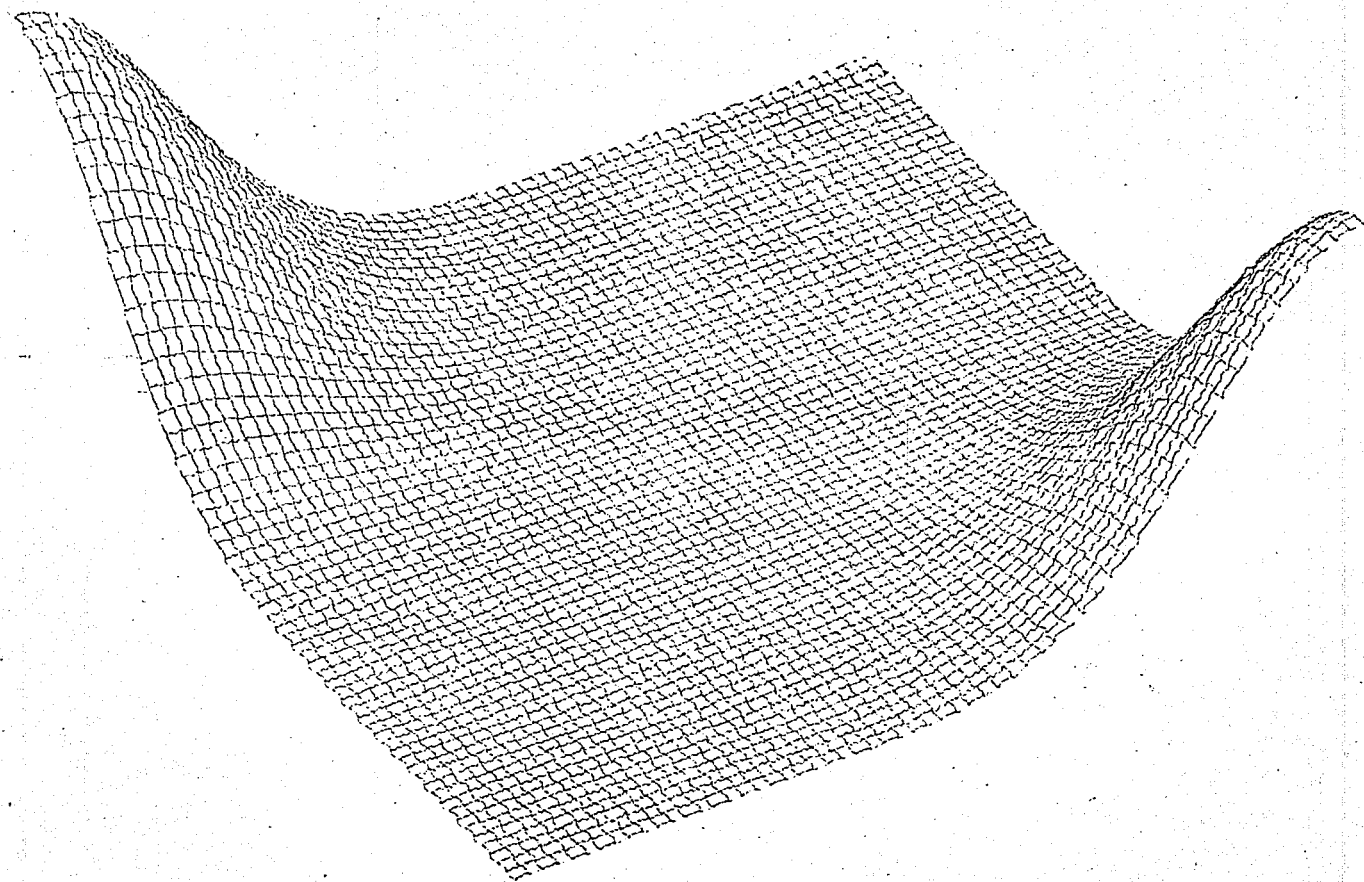
Z =

3.1416



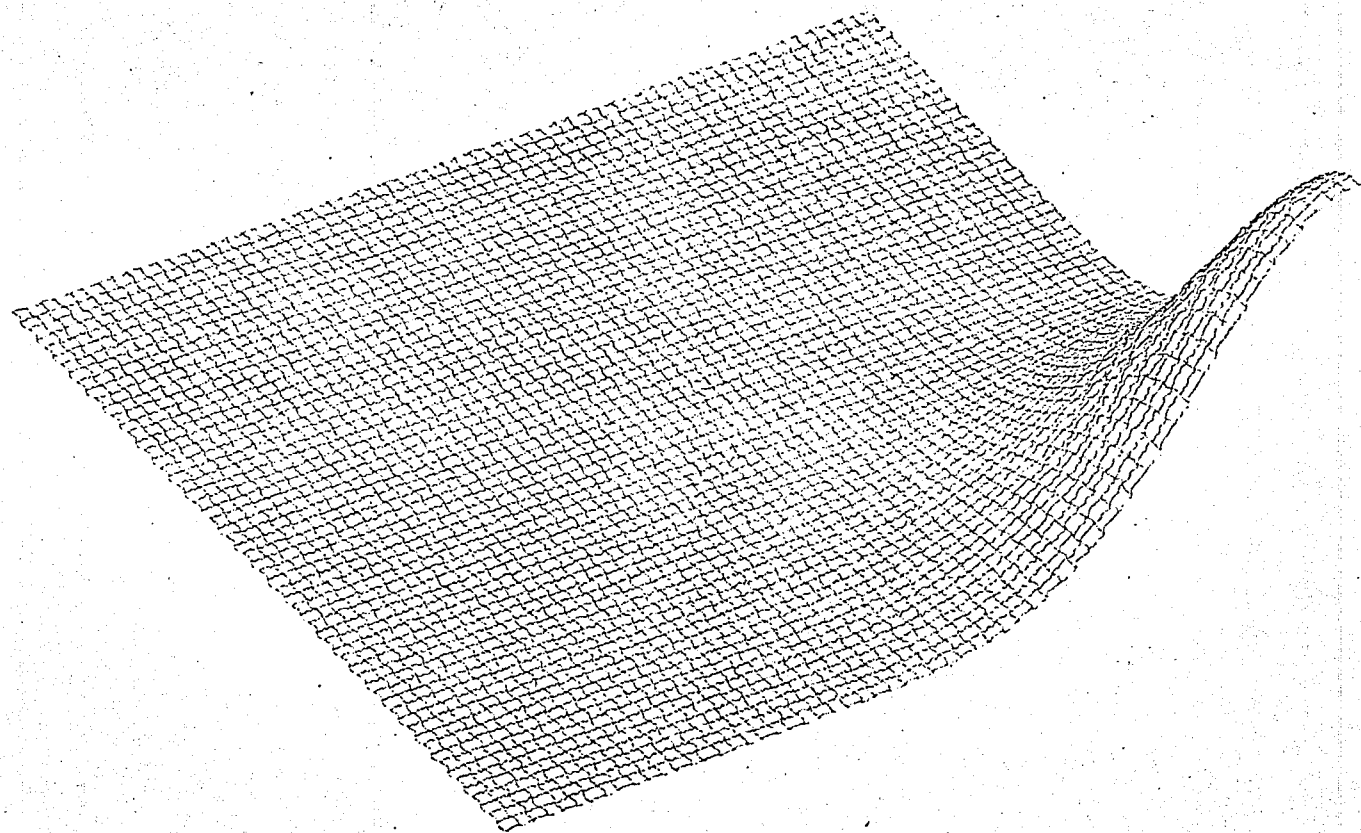
DENS1

N = 7 ALF = .5 Z = .0000



DENS1

N = 7 ALF = .5 Z = 1.5708



DENS1

N = 7

ALF = .5

Z = 3.1416

APENDICE I

Un breve bosquejo de la prueba de que el conjunto de funciones dado por la ecuación (II.1) es solución a las ecuaciones de Hartree-Fock en forma matricial.

Tenemos que la ecuación (II.1) está dada por:

$$\varphi_k = c e^{i\bar{k} \cdot \bar{r}} (1 + \alpha e^{i\bar{g} \cdot \bar{r}}) \quad (\text{II.1})$$

con $q \geq 2k_0$ $\alpha = 1/e^{iq}$

Sustituyendo (II.1) en (I.8) se encuentra que :

1) El término en la energía cinética está dado por:

$$\begin{aligned} \langle k'_1 | T | k_1 \rangle &= \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} |c|^2 \int e^{-i\bar{k}'_1 \cdot \bar{r}} (1 + \alpha^* e^{-i\bar{g} \cdot \bar{r}}) e^{i\bar{k}_1 \cdot \bar{r}} d\bar{r} \\ &+ \hbar^2 (\bar{k}_1 + \bar{g})^2 |c|^2 \alpha \int e^{-i\bar{k}'_1 \cdot \bar{r}} (1 + \alpha^* e^{-i\bar{g} \cdot \bar{r}}) e^{i(\bar{k}_1 + \bar{g}) \cdot \bar{r}} d\bar{r} \end{aligned}$$

que al integrar cuando el volumen tiende a infinito, nos que dan términos que contienen $V \delta_{k'_1, k_1 + nq}$ donde $n = 0, 1$ y dado que $q \geq 2k_0$, $\delta_{k'_1, k_1 + q} = 0$ por lo tanto:

$$\langle k'_1 | T | k_1 \rangle = (\dots) \delta_{k'_1, k_1}$$

2) Para completar la prueba tenemos que demostrar un resultado similar en la parte de la energía potencial de la ecuación (I.8).

El término directo:

$$\begin{aligned}
 D &\equiv \sum_{k_{102}} \langle k_1' k_2 | \psi_{12} | k_1 k_2 \rangle \\
 \langle k_1' k_2 | \psi_{12} | k_1 k_2 \rangle &= |C|^4 \int_{\sigma_{k_1} \sigma_{k_1'}} \int_V d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 e^{-i\vec{k}_1' \cdot \vec{r}_1} (1 + \alpha^* e^{-i\vec{g} \cdot \vec{r}_1}) \\
 &\quad e^{-i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2} (1 + \alpha^* e^{-i\vec{g} \cdot \vec{r}_2}) \psi_{12} e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1} (1 + \alpha e^{i\vec{g} \cdot \vec{r}_1}) e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2} (1 + \alpha e^{i\vec{g} \cdot \vec{r}_2}) \\
 &= |C|^4 \int_{\sigma_{k_1} \sigma_{k_1'}} \int_V e^{i(\vec{k}_1 - \vec{k}_1') \cdot \vec{r}_1} (1 + \alpha^* e^{-i\vec{g} \cdot \vec{r}_1}) (1 + \alpha e^{i\vec{g} \cdot \vec{r}_1}) \\
 &\quad v(\vec{r}_1, \vec{r}_2) (1 + \alpha^* e^{-i\vec{g} \cdot \vec{r}_2}) (1 + \alpha e^{i\vec{g} \cdot \vec{r}_2}) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \\
 &= |C|^4 \int_{\sigma_{k_1} \sigma_{k_1'}} \left\{ \int_V d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 (1 + |\alpha|^2)^2 e^{i(\vec{k}_1' - \vec{k}_1) \cdot \vec{r}} v(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right. \\
 &\quad + \int_V d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 e^{i(\vec{k}_1' - \vec{k}_1) \cdot \vec{r}} (1 + |\alpha|^2) v(\vec{r}_1, \vec{r}_2) [\alpha e^{i\vec{g} \cdot \vec{r}_2} + \alpha^* e^{-i\vec{g} \cdot \vec{r}_2}] \\
 &\quad + \int_V d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 e^{i(\vec{k}_1' - \vec{k}_1) \cdot \vec{r}} [\alpha e^{i\vec{g} \cdot \vec{r}_1} + \alpha^* e^{-i\vec{g} \cdot \vec{r}_1}] v(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \\
 &\quad (1 + |\alpha|^2) + \int_V d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 e^{i(\vec{k}_1' - \vec{k}_1) \cdot \vec{r}} [\alpha e^{i\vec{g} \cdot \vec{r}_1} + \alpha^* e^{-i\vec{g} \cdot \vec{r}_1}] v(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \\
 &\quad \left. + \int_V d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 e^{i(\vec{k}_1' - \vec{k}_1) \cdot \vec{r}} [\alpha e^{i\vec{g} \cdot \vec{r}_2} + \alpha^* e^{-i\vec{g} \cdot \vec{r}_2}] v(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\}
 \end{aligned}$$

tomando:

$$\vec{r} = \vec{r}_1, \vec{r}_2; \quad R = \frac{1}{2} (\vec{r}_1 + \vec{r}_2)$$

y utilizando el hecho de que:

$$\lim_{V \rightarrow 0} \int_V d\vec{r} e^{i(\mathbf{K}-\mathbf{K}') \cdot \vec{r}} = V \delta_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'}$$

se encuentra que:

$$D = |C|^4 \left\{ V \delta_{\mathbf{K}', \mathbf{K}} v(0) (1 + |\alpha|^2) + (1 + |\alpha|^2) \left[V \delta_{\mathbf{K}', \mathbf{K} + \mathbf{q}} \alpha v(-\mathbf{q}) \right. \right. \\ \left. \left. + V \delta_{\mathbf{K}', \mathbf{K} - \mathbf{q}} \alpha^* v(\mathbf{q}) + \alpha^* V \delta_{\mathbf{K}', \mathbf{K} + 2\mathbf{q}} v(-\mathbf{q}) \right. \right. \\ \left. \left. + |\alpha|^2 V \delta_{\mathbf{K}', \mathbf{K}} v(\mathbf{q}) \right] \right\}$$

donde $v(\mathbf{q})$ es la transformada de fourier de $v(\vec{r})$:

$$V(\mathbf{K}) = \int d\vec{r} e^{-i\mathbf{K} \cdot \vec{r}} v(\vec{r})$$

y ya que $q \gg 2K_0$ se tiene que $\delta_{\mathbf{K}, \mathbf{K}' + n\mathbf{q}} = 0$

para $n \neq 0$ de aquí que:

$$D = (\dots) \delta_{\mathbf{K}', \mathbf{K}}$$

El término de intercambio:

$$I \equiv \sum_{\mathbf{K}(\text{occ})} \langle \mathbf{K}_1' \mathbf{K}_2' | v_{12} | \mathbf{K}_2 \mathbf{K}_1 \rangle$$

$$\langle \mathbf{K}_1' \mathbf{K}_2' | v_{12} | \mathbf{K}_2 \mathbf{K}_1 \rangle = |C|^4 \int_{\mathbf{K}_1', \mathbf{K}_2'} \int_{\mathbf{K}_2, \mathbf{K}_1} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 e^{-i\vec{K}_1' \cdot \vec{r}_1} (1 + \alpha^* e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_1}) \\ e^{i\vec{K}_2 \cdot \vec{r}_2} (1 + \alpha e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_2}) v(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) e^{-i\vec{K}_2' \cdot \vec{r}_1} (1 + \alpha e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_1})$$

$$e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_2} (1 + \alpha e^{i\vec{g} \cdot \vec{r}_2})$$

$$= |C|^4 \int_{\vec{r}_1, \vec{r}_2} \left\{ (1 + |\alpha|^2)^2 \int_V d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 e^{i(\vec{k}_2 - \vec{k}_1) \cdot \vec{r}_1} \right.$$

$$v(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) e^{i(\vec{k}_1' - \vec{k}_2) \cdot \vec{r}_2} + (1 + |\alpha|^2) \int_V d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 e^{i(\vec{k}_2 - \vec{k}_1) \cdot \vec{r}_1} v(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

$$e^{i(\vec{k}_1' - \vec{k}_2) \cdot \vec{r}_2} (\alpha^* e^{-i\vec{g} \cdot \vec{r}_2} + \alpha e^{i\vec{g} \cdot \vec{r}_1}) +$$

$$+ (1 + |\alpha|^2) \int_V d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 e^{i(\vec{k}_2 - \vec{k}_1) \cdot \vec{r}_1} [\alpha^* e^{-i\vec{g} \cdot \vec{r}_1} + \alpha e^{i\vec{g} \cdot \vec{r}_1}]$$

$$\frac{v(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) e^{i(\vec{k}_1' - \vec{k}_2) \cdot \vec{r}_2} + \int_V d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 e^{i(\vec{k}_2 - \vec{k}_1) \cdot \vec{r}_1} (\alpha^* e^{-i\vec{g} \cdot \vec{r}_1} + \alpha e^{i\vec{g} \cdot \vec{r}_1})}{v(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) e^{i(\vec{k}_1' - \vec{k}_2) \cdot \vec{r}_2} (\alpha^* e^{-i\vec{g} \cdot \vec{r}_2} + \alpha e^{i\vec{g} \cdot \vec{r}_2})}$$

desarrollando y sustituyendo:

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \quad ; \quad R = \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)$$

se encuentra que:

$$I = (\dots) \delta_{K', K+nq}$$

y ya que $q \gg 2K_0$ se tiene que:

$$\delta_{K', K+nq} = 0 \quad \text{para} \quad n \neq 0 \quad \therefore I = (\dots) \delta_{K', K}$$

APENDICE II

La energía total del sistema se obtiene sustituyendo (II.1) en la ecuación (I.9) y de esta manera encontramos que:

$$\begin{aligned}
 E = & 2 \sum_{\vec{k}_1} \frac{\hbar^2 \vec{k}_1^2}{2m} + \frac{2\beta}{(1+\beta)} \sum_{\vec{k}_1} (2\vec{k}_1 \vec{q} + \vec{q}^2) \frac{\hbar^2}{2m} \\
 & + \sum_{\vec{k}_1} \left[\rho_0 \mathcal{V}(0) + \frac{\beta}{(1+\beta)^2} \rho_0 (\mathcal{V}(-\vec{q}) + \mathcal{V}(\vec{q})) \right] \\
 & - \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \left\{ \frac{1}{V} \mathcal{V}(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) - \frac{1}{V} \frac{\beta}{(1+\beta)} [\mathcal{V}(\vec{k}_1 - \vec{k}_2 + \vec{q}) \right. \\
 & \left. + \mathcal{V}(\vec{k}_1 - \vec{k}_2 - \vec{q})] \right\} - \frac{1}{2} N \rho_0 \mathcal{V}(0)
 \end{aligned}$$

donde: $\mathcal{V}(\vec{k}) = \int d\vec{r} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} v(\vec{r})$

es la transformada de fourier de $v(\vec{r})$.

Después de un largo desarrollo, y tomando en cuenta que:

$$N = \sum_{\vec{k}(oc)} (1) = V \left(\frac{k_0^3}{3\pi^2} \right)$$

(tomando una esfera de fermi)

$$k_0 = (3\pi^2 \rho_0)^{1/3}$$

además: $\frac{4}{3} \pi r_0^3 = \frac{1}{\rho_0}$

$$r_s = \frac{r_0}{a_0} \quad \text{donde} \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \quad (\text{radio de Bohr})$$

$$K_0 = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{1}{r_0} = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{1}{r_s} \frac{me^2}{\hbar^2}$$

se encuentra que:

$$\begin{aligned} \frac{E_{Lc}}{N} = & \frac{E_{op}}{N} + \frac{\beta}{(1+\beta)} Q^2 \frac{14.72}{r_s^2} + \frac{0.407}{r_s} \frac{\beta}{(1+\beta)^2} \frac{1}{Q^2} \\ & - \frac{\beta}{(1+\beta)^2} \left(\frac{1.22}{r_s} \right) \left[\left(\frac{11}{10} + \frac{Q^2}{5} \right) + \left(\frac{1}{5Q} - Q \right) \ln \left| \frac{Q+1}{Q-1} \right| \right. \\ & \left. + Q^2 \left(1 - \frac{Q^2}{5} \right) \ln \frac{Q^2}{Q^2-1} \right]. \end{aligned}$$

APENDICE III

Se revisarán algunos de los pasos para el cálculo de la energía en la aproximación de Hartree-Fock para la familia I.

$$\Phi_K^{(n)}(\vec{r}) = \varphi_{K_x}^{(n)}(x) \varphi_{K_y}^{(n)}(y) \varphi_{K_z}^{(n)}(z)$$

$$\varphi_{K_x}^{(n)}(x) = C_x e^{iKx} (1 + 5\sigma \alpha e^{i\frac{1}{2}x})^n$$

$$\alpha = |\alpha| e^{i\theta}$$

$$C_x^{-2} = L \sum_{\ell=0}^n \binom{n}{\ell}^2 \alpha^{2\ell} \quad ; \quad L^3 = V$$

1) La energía cinética:

$$t = \sum_{K(\text{occ})} \langle K | T | K \rangle$$

se puede demostrar, dado que $\Phi_K^{(n)}$ es separable en (x, y, z) , que:

$$t = 3L^2 \sum_{K_x(\text{occ})} \langle K_x | T_x | K_x \rangle$$

$$\langle K_x | T_x | K_x \rangle = \frac{\hbar^2 C_x^2}{2m} \sum_{\ell, \ell'} \binom{n}{\ell} \binom{n}{\ell'} \alpha^{\ell+\ell'} (K_x + \ell' \frac{1}{2})^2 5\sigma^{\ell+\ell'}$$

$$\int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} dx e^{i(\ell-\ell')\frac{1}{2}x} = \frac{\hbar^2 C_x^2 L}{2m} \sum_{\ell} \binom{n}{\ell}^2 \alpha^{2\ell} (K_x + \ell \frac{1}{2})^2$$

por lo tanto:

$$\sum_{K(oc)} \langle K | T | K \rangle = \frac{3\hbar^2 c^2 V}{2m} \sum_{K(oc)} \sum_l \binom{n}{l}^2 \alpha^{2l} (K_x + lq)^2$$

sumando sobre todos los estados ocupados se tiene que:

$$t = 1 + 12 Q^2 \frac{\sum_l \binom{n}{l}^2 \alpha^{2l} l^2}{\sum_l \binom{n}{l}^2 \alpha^{2l}} ; Q \equiv \frac{q}{2K_0}$$

2) El término directo:

$$D \equiv \sum_{K_1 K_2(oc)} \langle K_1 K_2 | \mathcal{V}_{12} | K_1 K_2 \rangle$$

Nota:

$$\langle K_1 K_2 | \mathcal{V}_{12} | K_1 K_2 \rangle = \int_{\sigma_1, \sigma_1} \int_{\sigma_2, \sigma_2} \langle \bar{K}_1 \bar{K}_2 | \mathcal{V}_{12} | \bar{K}_1 \bar{K}_2 \rangle$$

Por otra parte

$$\langle \bar{K}_1 \bar{K}_2 | \mathcal{V}_{12} | \bar{K}_1 \bar{K}_2 \rangle = v_0 \int d\bar{r}_1 \frac{|\varphi_{K_1}(\bar{r}_1)|^2}{|\varphi_{K_2}(\bar{r}_2)|^2}$$

pero:

$$|\varphi_k(\bar{r})|^2 = |\varphi_{k_1}(x)|^2 |\varphi_{k_2}(y)|^2 |\varphi_{k_3}(z)|^2$$

por lo tanto, solo se tiene que calcular:

$$\begin{aligned} \int dx |\varphi_{k_1}(x)|^2 |\varphi_{k_2}(x)|^2 &= C_x^4 \int dx (1 + s_{\sigma_1} \alpha e^{-i(2x+\theta)})^n \\ &\quad (1 + s_{\sigma_1} \alpha e^{i(2x+\theta)})^n (1 + s_{\sigma_2} \alpha e^{-i(2x+\theta)})^n (1 + s_{\sigma_2} \alpha e^{i(2x+\theta)})^n \\ &= C_x^4 \int \sum_{s,l=0}^n \binom{n}{s} \binom{n}{l} (1 + |\alpha|^2)^{2n-(s+l)} (2\alpha)^{s+l} s_{\sigma_1}^s s_{\sigma_2}^l I_{s+l} \end{aligned}$$

$$\text{donde } I_s \equiv \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos^s x \, dx = \frac{1}{2} [1 + (-1)^s] \frac{1}{2^s} \binom{s}{s/2}$$

sustituyendo en D , utilizando una regla de suma que se puede encontrar en (8) la cual está dada por:

$$\sum_{K_1, K_2, \dots, K_n} \binom{z_1}{K_1} \binom{z_2}{K_2} \dots \binom{z_n}{K_n} G_{K_1 + K_2 + \dots + K_n} =$$

$$\sum_K \binom{z_1 + z_2 + \dots + z_n}{K} G_K$$

y que se va a seguir utilizando en todos los siguientes cálculos.

y tomando en cuenta que:

$$\sum_{\sigma_1 \sigma_2} S_{\sigma_1}^{s_1+s_2+s_3} S_{\sigma_2}^{l_1+l_2+l_3}$$

$$= [1 + (-1)^{s_1+s_2+s_3}] [1 + (-1)^{l_1+l_2+l_3}]$$

ademas:

$$\sum_{k_1 k_2 (00)} (1) = V^2 \left(\frac{\rho_0}{2}\right)^2 = V^2 \left(\frac{k_0}{\pi}\right)^6$$

multiplicando el término directo por $\frac{2m}{\hbar^2 k_0^2 N}$ se encuentra que:

$$\frac{2m}{\hbar^2 k_0^2 N} \left[\frac{1}{2} \sum_{k(00)} \langle k_1 k_2 | v_{12} | k_1 k_2 \rangle \right]$$

$$= \frac{\lambda}{3} \left[\left\{ \left(\sum_{s,l}^n \binom{n}{l} \binom{n}{s} \right) \right\} \right]$$

$$\cdot (1+d^2)^{2m-(s+l)} (2d)^{s+l} I_{s+l} \Big\}^3 + \left\{ \sum_{s,l}^m \binom{m}{s} \binom{m}{l} \right\}$$

$$\cdot (1+d^2)^{2m-(s+l)} (2d)^{s+l} (-1)^l I_{s+l} \Big\}^3 \left[\sum_{l=0}^m \binom{m}{l}^2 d^{2l} \right]^6$$

3) El término de intercambio:

$$I \equiv \frac{1}{2} \sum_{K_1 K_2 (oc)} \langle K_1 K_2 | \mathcal{V}_{12} | K_2 K_1 \rangle$$

nota:

$$\langle K_1 K_2 | \mathcal{V}_{12} | K_2 K_1 \rangle = S_{\sigma_1, \sigma_2} \langle \bar{K}_1 \bar{K}_2 | \mathcal{V}_{12} | \bar{K}_2 \bar{K}_1 \rangle$$

por lo que: $S_{\sigma_1} = S_{\sigma_2}$

por otra parte:

$$\langle \bar{K}_1 \bar{K}_2 | \mathcal{V}_{12} | \bar{K}_2 \bar{K}_1 \rangle = v_0 \int d\bar{r}_1 |\varphi_{K_1}(\bar{r})|^2 |\varphi_{K_2}(\bar{r})|^2$$

como:

$$|\varphi_K(\bar{r})|^2 = |\varphi_{K_x}(x)|^2 |\varphi_{K_z}(z)|^2 |\varphi_{K_y}(y)|^2$$

se calcula:

$$\int dx \left| \psi_{k_1}(x) \right|^2 \left| \psi_{k_2}(x) \right|^2 = C_x^4 \int dx (1 + S_0 \alpha e^{-i(qx+\theta)})^{2n}$$

$$(1 + S_0 \alpha e^{-i(qx+\theta)})^{2n} = C_x^4 \sum_{s,l=0}^{2n} \binom{2n}{l} \binom{2n}{s} S_0^{(l+s)} \cdot$$

$$\cdot |\alpha|^{l+s} e^{i(l+s)\theta} L_{l,s}$$

que si se escoge $\theta=0$;

$$= C_x^4 \sum_{l=0}^{2n} \binom{2n}{l}^2 S_0^{2l} \alpha^{2l} L$$

sustituyendo en I para x,y,z , se tiene que:

$$\frac{2m}{\hbar^2 k_0^2 N} \left(\frac{1}{2} \sum_{K_1 K_2 (oc)} \langle K_1 K_2 | \psi_{12} | K_2 K_1 \rangle \right) = \frac{1}{3} \left[\frac{\sum_{l=0}^{2n} \binom{2n}{l}^2 \alpha^{2l}}{\left(\sum_{l=0}^{2n} \binom{2n}{l}^2 \alpha^{2l} \right)^2} \right]^3$$

$$\lambda \equiv \frac{3m\alpha_0 k_0}{\hbar^2 \pi^3}$$

APENDICE IV

Se revisarán algunos de los pasos para el cálculo de la energía en la aproximación de Hartree-Fock para la familia I.

$$\Phi_K^{(n)}(\vec{r}) = \varphi_{K_x}^{(n)}(x) \varphi_{K_y}^{(n)}(y) \varphi_{K_z}^{(n)}(z)$$

$$\varphi_K^{(n)}(x) = C_x^{(n)} e^{iKx} [1 + S_0 \alpha \cos qx]^n$$

para α real:

$$C_x^{(n)-2} = L \sum_{s=0}^n \binom{2n}{2s} \alpha^{2s} I_{2s}$$

1) La energía cinética:

$$t \equiv \sum_{K(\text{occ})} \langle K | T | K \rangle = 3L^2 \sum_{K(\text{occ})} \langle K_x | T_x | K_x \rangle$$

$$t_x \equiv \langle K_x | T_x | K_x \rangle = \int_{-L/2}^{L/2} dx \varphi_K^{(n)}(x) \frac{d^2}{dx^2} \varphi_K^{(n)}(x)$$

integrando por partes se tiene:

$$-t_x = \int_{-L/2}^{L/2} \left\{ -iK_x \varphi_K^{(n)}(x) - nS_0 \alpha^* q \frac{C_x^{(n)*}}{C_x^{(n+1)*}} \operatorname{sen} qx \varphi_K^{(n+1)*}(x) \right\} dx$$

$$\cdot \left\{ i k_x \varphi_k^{(n)}(x) - n \sigma_0 d q \frac{C_x^{(n)}}{C_x^{(n-1)}} \varphi_k^{(n-1)}(x) \sin q x \right\} dx$$

$$-t_x = \int_{-1/2}^{1/2} dx \left\{ k_x^2 |\varphi_k^{(n)}|^2 + n^2 |d|^2 q^2 \frac{|C_x^{(n)}|^2}{|C_x^{(n-1)/2}|^2} \sin^2 q x |\varphi_k^{(n-1)}|^2 \right\}$$

desarrollando y utilizando el hecho de que:

$$I_{i+i} - I_{i+i+2} = \frac{I_{i+i}}{(i+i+2)}$$

se tiene que:

$$t_x = \frac{-k^2 - n^2 |d|^2 q^2 \sum_{s,l=0}^{n-1} \binom{n-1}{s} \binom{n-1}{l} d^{*s} d^l I_{s+l} / (s+l+2)}{\sum_{s=0}^n \binom{2n}{2s} I_{2s} \beta^s}$$

utilizando la regla de suma se encuentra que:

$$t_x = \frac{-k^2 - n^2 \beta q^2 \sum_{s=0}^{n-1} \binom{2n-5}{2s} I_{2s} d^{2s} / (2s+2)}{\sum_{s=0}^n \binom{2n}{2s} I_{2s} d^{2s}}$$

de aquí, sustituyendo en t y sumando sobre todos los estados ocupados se encuentra que la energía cinética está dada por:

$$t = \frac{1 + 12 Q n^2 |d|^2 \sum_{s=0}^{n-1} \binom{2n-2}{2s} I_{2s} \alpha^{\frac{2s}{2s+2}}}{\sum_{s=0}^n \binom{2n}{2s} I_{2s} \alpha^{2s}}$$

2) El término directo:

$$D \equiv \frac{1}{2} \sum_{K_1, K_2 (oc)} \langle K_1 K_2 | v_{12} | K_1 K_2 \rangle = \frac{1}{2} \sum_{K_1, K_2 (oc)} \left(d\vec{r}_1 / \varphi_{K_1}(\vec{r}_1) \right)^2 / \left(\varphi_{K_2}(\vec{r}_1) \right)^2$$

por lo que solo tenemos que integrar:

$$\begin{aligned} \int dx |\varphi_{K_{x1}}(x)|^2 / |\varphi_{K_{x2}}(x)|^2 &= C_x^4 \int dx (1 + S_{\sigma_1} d \cos \varphi x)^{2n} \\ (1 + S_{\sigma_2} d \cos \varphi x)^{2n} &= C_x^4 \sum_{s_1, l_1=0}^{2n} \binom{2n}{s_1} \binom{2n}{l_1} S_{\sigma_1}^{l_1} S_{\sigma_2}^{s_1} \alpha^{l_1+s_1} \int \cos \varphi x dx \\ &= C_x^4 \sum_{s_1, l_1=0}^{2n} \binom{2n}{s_1} \binom{2n}{l_1} S_{\sigma_1}^{l_1} S_{\sigma_2}^{s_1} \alpha^{l_1+s_1} I_{s_1+l_1} \end{aligned}$$

sustituyendo en D para x, y, z , y haciendo la suma sobre todos los estados ocupados:

$$\frac{2m}{\hbar^2 K_0^2 N} \frac{1}{2} \sum_{K_1, K_2 (oc)} \langle K_1 K_2 | v_{12} | K_1 K_2 \rangle = \frac{m C^4 V^3 v_0 \rho_0^2}{2 \hbar^2 K_0^2 N} \left\{ \sum_{s=0}^{2n} \binom{2n}{s} \alpha^{2s} \right\}$$

$$\begin{aligned}
 & \left. \alpha^{l+s} I_{s+l} \right]^3 + \left[\sum_{s,l}^{2n} \binom{2n}{s} \binom{2n}{l} \alpha^{l+s} (-1)^l I_{s+l} \right]^3 \Bigg\} = \\
 & = \frac{\lambda}{3} \left\{ \left(\sum_{s,l=0}^{2n} \binom{2n}{s} \binom{2n}{l} \alpha^{l+s} I_{s+l} \right)^3 \right. \\
 & \left. + \left(\sum_{s,l=0}^{2n} \binom{2n}{s} \binom{2n}{l} \alpha^{l+s} (-1)^l I_{s+l} \right)^3 \right\} \left\{ \sum_{s=0}^n \binom{2n}{2s} \alpha^{2s} I_{2s} \right\}^6
 \end{aligned}$$

3) El término de intercambio:

$$I = \sum_{K_1, K_2(\omega)} \langle K_1 K_2 | \psi_{12} | K_2 K_1 \rangle$$

pero:

$$\langle \bar{K}_1 \bar{K}_2 | \psi_{12} | K_2 K_1 \rangle = \psi_0 \int d\vec{r} \left| \varphi_{K_1}^{(n)}(\vec{r}) \right|^2 / \left| \varphi_{K_2}^{(n)}(\vec{r}) \right|^2$$

de aquí que solo tenemos que integrar:

$$\int d\vec{x} \left| \varphi_{K_1}^{(n)}(\vec{x}) \right|^2 / \left| \varphi_{K_2}^{(n)}(\vec{x}) \right|^2 = C x^4 \int dx (1 + S_0 d \cos 9x)^{4n} =$$

$$= C_x \sum_{p=0}^{2n} \binom{4n}{2p} s_0^{2p} d^{2p} I_{2p} L$$

sustituyendo en I para x, y, z , y sumando sobre todos los estados ocupados se tiene que la energía del término directo está dada por:

$$\frac{2m}{\hbar^2 k_0^2 N} \frac{1}{2} \sum_{K_1, K_2 (0G)} \langle K_1 K_2 | v_{12} | K_2 K_1 \rangle =$$

$$= \frac{m v_0 k_0}{\hbar^2 \pi^3} \left\{ \frac{\sum_{p=0}^{2n} \binom{4n}{2p} d^{2p} I_{2p}}{\left(\sum_{p=0}^{2n} \binom{2n}{2p} d^{2p} I_{2p} \right)^2} \right\}^3$$

REFERENCIAS:

- (1) E.P.Wigner, Trans. Faraday Soc. 34 (1938) 678.
- (2) N.H.March, W.H.Loung and S; Sampenthar. The Many Body Problem in Quantum Mechanics. London Cambridge 1967 - (Cambridge Monographs Physics).
- (3) Raimes S. Waves Mechanics of Electrons in Metals. 1961. North-Holland.
- (4) E.P. Wigner. Physics Rev. 46, 1002 (1934); A.W. Overhauser Phys. Rev. 167, 691 (1968).
- (5) Hill Terrell . Statistical Mechanics. New York Mc. Graw Hill. 1956.
- (6) A.W. Overhauser Phys. Rev. Letters 4, 415 (1960).
- (7) M. de Llano, A. Plastino Phys. Rev. A 13 1633 (1976)
- (8) V.C. Aguilera-Navarro, M de Llano, S. Peltier, A. Plastino. (por publicarse).