

Cálculo Monte Carlo de la energía del estado fundamental para un gas de electrones unidimensional

C. Stoico¹ y F. Vericat^{2,3}

⁽¹⁾Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas – Universidad Nacional de Rosario

⁽²⁾Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos (IFLYSIB) CONICET-UNLP

⁽³⁾Grupo de Aplicaciones Matemáticas y Estadísticas de la Facultad de Ingeniería (GAMEFI) Universidad Nacional de La Plata

cstoico@fbioyf.unr.edu.ar vericat@iflysib.unlp.edu.ar

Consideramos un gas de electrones unidimensional interactuando via un potencial efectivo propuesto por Hu y Das Sarma. Aplicamos a este sistema el método de Monte Carlo cuántico con el factor de Jastrow determinado utilizando la RPA. Calculamos así la energía del estado fundamental por partícula en función del parámetro de Wigner-Seitz.

A one dimensional electron gas, interacting via the effective potencial of Hu and Das Sarma, is considered. We apply quantum Monte Carlo method, with the Jastrow factor determined by using RPA, in order to calculate the ground state energy per particle as a function of the Wigner-Seitz parameter.

I. Introducción

El comportamiento de sistemas unidimensionales o casi-unidimensionales de electrones, tales como los cables cuánticos, es fuertemente dependiente de las correlaciones interpartículas y es bien sabido de las dificultades a que debe enfrentarse cualquier intento de descripción perturbativa en estas circunstancias. En este contexto, las técnicas de simulación del tipo de Monte Carlo cuántico pueden ser de gran utilidad, particularmente en la determinación de las propiedades de equilibrio. En este trabajo presentamos cálculos de la energía del estado fundamental en sistemas homogéneos de electrones limitados a moverse en una línea utilizando técnicas variacionales en simulaciones Monte Carlo⁽¹⁾.

En la próxima Sección describiremos brevemente el modelo, esto es, determinaremos el potencial efectivo entre electrones que usaremos en nuestros cálculos. En la Sección III haremos un resumen de los principios en que se basa el método de Monte Carlo cuántico. Mostraremos el algoritmo general así como algunos otros detalles relacionados con la actualización, en el proceso de cálculo, de las funciones de onda y los factores de Jastrow. También consideraremos el cálculo de la energía y otros aspectos relacionados. Finalmente en IV mostramos la curva que obtenemos para la energía del estado fundamental en función del parámetro de densidad

II. Modelo

En los alambres cuánticos, el movimiento electrónico está confinado en dos direcciones (digamos "y" y "z") y libre en la otra. En la aproximación más simple, suponemos que el espaciamiento de la energía de una partícula para el movimiento transversal es suficientemente grande de modo que sólo consideramos la menor energía con función de onda $\varphi(y,z) = \zeta(y)\xi(z)$. De este modo, la función de onda total del sistema de muchos electrones se puede factorizar en un término para el movimiento en la dirección x por el producto de las φ , una

para cada partícula. De lo dicho, la ecuación de Schrödinger nos lleva a un problema efectivo 1D con un potencial efectivo uni-dimensional. Evidentemente, diferentes modelos de confinamiento lleva a diferentes potenciales efectivos.

Nuestra aproximación para la función de onda de un electrón es

$$\Psi(x, y, z) = \frac{e^{ikx}}{\sqrt{L}} \zeta_n(y) \xi_l(z)$$

donde $\zeta(y)$ y $\xi_l(z)$ son funciones de onda indicando cuantización en las direcciones y y z y k es el vector de onda en la dirección de la longitud del alambre la cual está en la dirección x con L como la longitud macroscópica del alambre.

De este modo el potencial efectivo es⁽²⁾:

$$v^{\text{efectivo}}(x-x') = \int dy dy' dz dz' \frac{e^2}{\sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + (z-z')^2}} |\zeta_n(y)|^2 |\zeta_n(y')|^2 |\xi_l(z)|^2 |\xi_l(z')|^2$$

Tomando potenciales de confinamiento de modo tal que el movimiento de los electrones esté restringido a un movimiento en el plano z=0 y de ancho δ en la dirección del eje y las funciones de onda resultan tal que cuando son reemplazadas en el potencial efectivo su transformada de Fourier resulta:

$$\tilde{v}^{\text{efectivo}}(q; \delta) = 2e^2 \int_0^1 dx K_0(|q\delta|) (2 - (1-x) \cos(2\pi x) + 3(2\pi)^{-1} \sin(2\pi x))$$

Nuestro interés es calcular la energía E_0 del estado fundamental de un sistema unidimensional de electrones cuyo Hamiltoniano está dado por:

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i < j} v(|x_i - x_j|)$$

donde N es el número de electrones de masa m cuya posición es x_i ($i=1, 2, \dots, N$). Suponemos que los electrones

interactúan a través del potencial $v(x)$ cuya transformada de Fourier es el potencial efectivo anterior $\tilde{v}^{\text{efectivo}}(q; \delta)$.

III. Monte Carlo cuántico

En esta sección haremos un resumen de los principios en que se basa nuestro cálculo y diversos aspectos relacionados

Principios básicos

Los métodos de integración de Monte Carlo son muy útiles para calcular integrales en mecánica cuántica. En un sistema con N partículas en una dimensión éstas integrales son de la forma

$$\langle O \rangle = \frac{\int dx f(x) O(x)}{\int dx f(x)}$$

donde x es un vector N dimensional, $f(x)$ es una distribución de probabilidad y O es el observable. Estas integrales tienen dos características importantes: alta dimensionalidad y sólo una parte del espacio de las fases contribuye significativamente a la integral.

El error en esta evaluación es independiente de la dimensionalidad mientras que en los métodos basados en usar grillas depende fuertemente de esta elección.

Técnica de Metrópolis

El método de Metrópolis usa un proceso de Markov para generar muestras desde una función de distribución normalizada $f(x)/\int dx f(x)$. Estas muestras son usadas para estimar las integrales por

$$\langle O \rangle = \frac{1}{N} \sum_i O(x_i)$$

Un proceso de Markov toma una probabilidad de transición entre estados, $P(x \rightarrow x')$ y construye una serie de puntos x_1, x_2, \dots , llamado una cadena. Una característica importante de un proceso de Markov es que la elección del próximo estado en la cadena depende sólo del estado actual y no depende de los estados previos.

El método de Metrópolis construye una probabilidad de transición de modo que los estados generados son muestreados desde una deseada distribución. Para que esto funcione, la probabilidad de transición debe satisfacer la propiedad de ergodicidad. Esto significa que la cadena de Markov debe ser capaz de alcanzar cualquier estado en el sistema. Una condición suficiente para satisfacer la ergodicidad es el balance detallado

$$f(x)P(x \rightarrow x') = f(x')P(x' \rightarrow x)$$

El método de Metrópolis divide la probabilidad de transición en el producto de una distribución a priori

$T(x \rightarrow x')$ y una probabilidad de aceptación $A(x \rightarrow x')$. La elección para la probabilidad de aceptación es

$$A(x \rightarrow x') = \min \left[1, \frac{f(x')T(x \rightarrow x')}{f(x)T(x' \rightarrow x)} \right]$$

El procedimiento es muestrear un estado de prueba x' de acuerdo a $T(x \rightarrow x')$ y luego evaluar $A(x \rightarrow x')$. La probabilidad de aceptación se compara con un número tomado al azar de una distribución uniforme en $[0,1]$. Si A es mayor, el movimiento es aceptado, x' pasa a ser el nuevo x y es usado para calcular el valor medio del observable de interés. De otra manera, el movimiento no es aceptado, x no cambia y no se usa para calcular el valor medio.

El procedimiento de Metrópolis elige una posición de prueba como $x' = x + y$ donde y es un número al azar en el intervalo $\left[-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right]$ donde a es un parámetro ajustable. En este caso T es uniforme.

Monte Carlo variacional

El método de Monte Carlo variacional está basado en la evaluación de integrales que surgen de un principio variacional. Este principio establece que la energía calculada para un dado Hamiltoniano usando una función de onda de prueba, debe ser mayor o igual que la energía exacta del estado fundamental. La función de onda de prueba es parametrizada y luego optimizada con respecto a estos parámetros para encontrar el mínimo de energía.

Si la función de onda Ψ está normalizada podemos escribir la energía como:

$$E^* = \int \frac{1}{\Psi(\bar{x})} H \Psi(\bar{x}) |\Psi(\bar{x})|^2 d\bar{x}$$

La integral podemos calcularla usando el algoritmo de Metrópolis⁽³⁾:

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\frac{1}{\Psi(x_i)} H \Psi(x_i) \right)$$

y el error estadístico decae como $n^{-1/2}$ independientemente de la dimensión.

Función de onda

La función de onda usada en este trabajo es un determinante de Slater multiplicado por un factor de Jastrow. El determinante de Slater incorpora los efectos de intercambio para las partículas y el factor de Jastrow introduce las correlaciones. La función de onda es:

$$\Psi(\bar{x}) = \Psi_s(\bar{x}) D^\uparrow(\bar{x}) D^\downarrow(\bar{x})$$

donde D^\uparrow y D^\downarrow son los determinantes de Slater para cada spin electrónico y Ψ_s es el factor de Jastrow. Aunque el

separar el determinante de cada spin de esta manera significa que la función de onda no es antisimétrica ante el intercambio de partículas de espín opuesto, cuando el Hamiltoniano es independiente del spin, el valor esperado de la energía es el mismo del esperado para una función explícitamente antisimétrica. Usar dos determinantes separados es, computacionalmente, más eficiente.

El factor de Jastrow el cual es normalmente usado es:

$$\Psi_J(\vec{x}) = \text{Exp}\left(-\frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N u(x_i, x_j)\right)$$

Actualización de la función de onda

Cada vez que un electrón se mueve, la función de onda cambia completamente. Recalcular la función de onda a cada paso es un proceso computacionalmente costoso.

Describimos un proceso para el movimiento de un electrón con spin \uparrow de la posición $x_{i,\text{viejo}}$ a la posición $x_{i,\text{nueva}}$.

Las dos cantidades que debemos calcular son el cociente de los determinantes nuevos y viejos y el cociente de los factores de Jastrow nuevo y viejo.

Cociente de determinantes

El determinante $D^\downarrow(\vec{x})$ tiene electrones con espín \downarrow y no cambia; el que cambia es $D^\uparrow(\vec{x})$. La matriz asociada tiene elementos

$$D_{jk,N}^\uparrow = \varphi_j(x_i)$$

Cuando un electrón se mueve, la i -ésima columna de la matriz es la que cambia:

$$D_{jk,N}^\uparrow = D_{jk,N}^\uparrow + \delta_{ik}(\varphi_j(x_{i,N}) - \varphi_j(x_{i,V})),$$

donde denotamos con el subíndice N si es un nuevo elemento de la matriz de Slater o con V si es un elemento viejo.

El cociente de determinantes se puede escribir como:

$$q_i = \frac{D_N^\uparrow}{D_V^\uparrow} = \sum D_{i,N}^T \bar{D}_{i,V}$$

donde \bar{D}^\uparrow es la inversa transpuesta de la matriz de Slater.

Si el movimiento del i -ésimo electrón es aceptado la matriz \bar{D}^\uparrow es actualizada de la siguiente manera:

Si $k=i$

$$\bar{D}_{i,N} = \frac{1}{q_i} \bar{D}_{i,V}$$

Si $k \neq i$

$$\bar{D}_{jk,N} = \bar{D}_{jk,V} - \frac{\bar{D}_{jk,V}}{q_i} \sum_{m=1}^N \varphi_m(x_{i,N}) \bar{D}_{mk,V}$$

Cociente de los factores de Jastrow

En el caso de que el electrón i se mueva

$$\frac{\Psi_{J,N}}{\Psi_{J,V}} = \text{Exp}\left(-\sum_{j(i \neq j)} (u(x_{ij,N}) - u(x_{ij,V}))\right)$$

Determinación del factor de Jastrow

Para determinar el factor de Jastrow utilizamos la "random phase approximation" (RPA). Como estamos interesados en describir las correlaciones de largo alcance debido a la interacción electrón-electrón queremos ver la conexión entre el Hamiltoniano y las fluctuaciones de densidad de larga longitud de onda conocidas como plasmones. Para ello dividimos el Hamiltoniano en un término electrónico de interacción de corto alcance y un término de plasmones que está débilmente acoplado a los electrones.

Queremos aproximar el estado fundamental $|\Psi_0\rangle$ con energía E_0 del siguiente Hamiltoniano:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_i \hat{p}_i^2 + \sum_i \hat{V}(x_i) + \frac{1}{2} \sum_k v(k) \hat{n}_k \hat{n}_k^\dagger - \frac{N}{2L} \sum_k v(k)$$

donde

$$\hat{n}_k = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_i e^{ikx_i}$$

y escribimos el potencial $\hat{v}^{\text{efectivo}}(k; \delta)$ simplemente como $v(k)$, siendo $V(x)$ un potencial externo cualquiera.

Rescribimos el Hamiltoniano de la siguiente manera:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_i \hat{p}_i^2 + \sum_i \hat{F}(x_i) + \frac{1}{2} \sum_k v(k) \hat{n}_k \hat{n}_k^\dagger - \frac{N}{2L} \sum_k v(k) + \frac{1}{2} \sum_{|k| < k_c} \hat{\Pi}_k \hat{\Pi}_{-k} - \sum_{|k| < k_c} \sqrt{v(k)} \hat{\Pi}_k \hat{n}_k^\dagger$$

donde:

$$F(x_i) = V(x_i) - \frac{1}{2N} \sum_{|k| < k_c} \hat{\Pi}_k^0 \hat{\Pi}_{-k}^0 + \sum_{|k| < k_c} \sqrt{\frac{v(k)}{L}} \hat{\Pi}_k^0 e^{-ikx_i}$$

$$[\hat{\Pi}(x), \hat{q}(y)] = -i\delta(x-y)$$

$$[\hat{\Pi}_k, \hat{q}_k] = -i\delta_{kk}$$

y $\hat{\Pi}; \hat{q}$ conmutan con \hat{x} y \hat{p} .

Resolución del Hamiltoniano extendido

Realizando la transformación

$$\hat{S} = \text{Exp}(-i \sum_{|k| < k_c} \sqrt{v(k)} \hat{q}_k \hat{n}_k)$$

obtenemos el nuevo Hamiltoniano:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \frac{1}{2} \sum_i \hat{p}_i^2 + \sum_i F(x_i) + \frac{1}{2} \sum_{|k| > k_c} v(k) \hat{n}_k \hat{n}_k^+ - \\ & - \frac{N}{2L} \sum_k v(k) + \frac{1}{2} \sum_{|k| < k_c} \hat{\Pi}_k \hat{\Pi}_{-k} + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{k, k' < k_c} \sqrt{\frac{v(k)}{L}} \sqrt{\frac{v(k')}{L}} \hat{q}_k \hat{q}_{-k} \hat{n}_{k-k} \hat{n}_{k+k'} + \\ & + i \sum_{|k| < k_c} \sum_i \sqrt{\frac{v(k)}{L}} q_k k (p_i - \frac{k}{2} e^{ikx_i}) \end{aligned}$$

Definiendo $A_{-k, k'} = \sqrt{v(k)} \sqrt{v(k')} \hat{n}_{k-k} \hat{n}_{k+k'}$ y despreciando el último término del Hamiltoniano obtenemos:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{RPA} = & \frac{1}{2} \sum_i \hat{p}_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{|k| > k_c} v(k) \hat{n}_k \hat{n}_k^+ - \\ & - \frac{N}{2L} \sum_k v(k) + \sum_i F(x_i) + \frac{1}{2} \hat{\Pi} \hat{\Pi}^+ + \\ & + \frac{1}{2} \hat{q} A \hat{q}^+ . \end{aligned}$$

El estado fundamental de los plasmones será:

$$\Psi_{plaz} \propto \text{Exp}(-\frac{1}{2} \sum_{|k| < k_c} \hat{\Pi}_k^+ A_{-k, k'}^{-1/2} \hat{\Pi}_k)$$

y $\Phi_{RPA} = \Psi_{plaz} D$ donde D es el determinante de Slater. En el caso homogéneo es

$$A_{-k, k'} = \frac{N}{L} k^2 v(k) \delta_{k, k'}$$

Antitransformando, utilizando el operador

$$\hat{P}_{proyector} = \prod_{|k| < k_c} |\Pi^0\rangle \langle \Pi^0|$$

obtenemos

$$\Phi \propto e^{-\frac{1}{2} \sum_{i,j} f(x_i, x_j)}$$

donde

$$u(x_i, x_j) = \sum_{k, k'} \sqrt{\frac{v(k)}{L}} \sqrt{\frac{v(k')}{L}} e^{-ikx_i} A_{-k, k'}^{-1/2} e^{ik'x_j}$$

y, en el caso homogéneo,

$$u(x_i, x_j) = \sqrt{\frac{L}{N}} \frac{1}{L} \sum_{|k| < k_c} \sqrt{\frac{v(k)}{k^2}} e^{-ik(x_i - x_j)}$$

IV. Resultados

Los resultados obtenidos para la energía del estado fundamental por partícula en función del parámetro de acoplamiento r_s se muestran en la Figura 1.

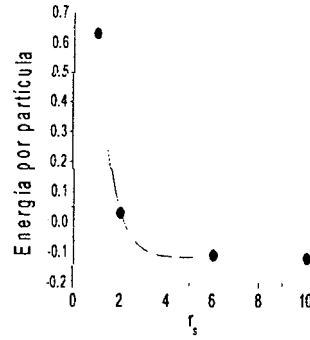


Figura 1: Energía por partícula del estado fundamental en función del parámetro de Wigner-Seitz.

La energía está en unidades de $e^2/2\epsilon a_B$ donde a_B es el radio de Bohr y el parámetro r_s está definido en una dimensión como $\rho = N/L = 1/2r_s a_B$

Agradecimientos

Los autores agradecen a las Universidades Nacionales de Rosario y La Plata, al CONICET y a la ANPCyT por la ayuda económica que permite llevar adelante los proyectos de los cuales este trabajo forma parte. F.V. es miembro del CONICET

Referencias

1. Ceperley, D.M. y Kalos, M.H. en *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, (Ed. K. Binder) (Springer, Berlin, 1979)
2. Hu, B. y Das Sarma, S., *Phys. Rev. B*, **48**, 5469 (1993).
3. Metrópolis, N. y Ulam, S., *The Monte Carlo method*, J. Amer. Stat. Assoc., **44**, 335 (1953).