

COMPORTAMIENTO ASINTÓTICO DE LOS FACTORES DE ESTRUCTURA PARCIALES EN MEZCLAS DE FERMIONES CARGADOS A T=0

A. A. Melgarejo*, F. Vericat**

Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos (IFLYSIB), La Plata y Departamento de Fisicomatemática, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata. (1900) La Plata, Argentina.

En este trabajo consideramos los factores de estructura parciales a longitudes de ondas largas y cortas, correspondientes a un plasma multicomponente degenerado. El comportamiento a distancias cortas es analizado considerando en la ecuación de Goldstone solamente diagramas de escalera. Por su parte, la forma dominante de los factores de estructura parciales a números de onda pequeños surge de considerar que, en ese límite, predominan modos colectivos correspondientes a plasmones y fonones, encontrándose una relación lineal en vez de la característica forma cuadrática propia del gas de electrones.

I. INTRODUCCIÓN

Los factores de estructura y sus transformadas de Fourier, las funciones de correlación de pares, constituyen herramientas muy adecuadas para describir, desde el espacio de los momentos y desde el espacio real, respectivamente, el comportamiento de sistemas de muchas partículas¹⁻³. Además de constituir un verdadero puente entre las interacciones microscópicas y el comportamiento termodinámico, se relacionan directamente con experimentos de difracción de Rayos X o de neutrones permitiendo el contraste de resultados teóricos⁴.

El comportamiento de los factores de estructura a números de onda grandes y pequeños o, equivalentemente, el comportamiento asintótico a distancias pequeñas y largas, respectivamente, han recibido una atención especial. Esto es debido a que en esos extremos la física es en general más transparente que en regiones intermedias, donde la suma de efectos de diverso origen y de semejante importancia pueden llegar a oscurecerla.

En particular, el comportamiento asintótico del factor de estructura y la función de correlación de pares del gas de electrones (jellium) han sido bastante estudiados con la idea de disponer de una guía en el diseño de teorías aproximadas que lo describan⁵⁻¹¹.

En este trabajo consideramos un sistema multicomponente (en particular binario) de fermiones cargados en un fondo neutralizante a $T=0$, esto es, consideramos la extensión a varias componentes del modelo de electrones libres de Sommerfeld (jellium).

Para este sistema estudiamos el comportamiento asintótico (en ambos extremos) de los factores de estructura parciales y de las funciones de correlación entre las diversas componentes.

II. MODELO

Consideramos un sistema de N especies de fermiones cargados moviéndose en un fondo neutralizante. Suponemos que el sistema ocupa un volumen V y que se encuentra a una temperatura $T=0$. Indicamos con N_i , el número de partículas de la especie i ($i=1, 2, \dots, N$), de manera que $n_i = N_i/V$ es la correspondiente densidad numérica. En el modelo, las partículas de tipo i se representan como puntos de masa m_i y carga $Z_i e$, donde e es la carga de un electrón.

El Hamiltoniano del sistema es:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} \sum_{i=1}^N \epsilon_{\vec{k}}^i \hat{a}_{\vec{k}}^{i*} \hat{a}_{\vec{k}}^i + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{q}} \sum_{ij} v_{ij}(\vec{q}) (\hat{n}_{\vec{q}}^i \hat{n}_{-\vec{q}}^j - \hat{N}_i \delta_{ij}) \quad (1)$$

donde $\epsilon_{\vec{k}}^i$ denota la energía cinética de partículas de tipo i cuando su momento es \vec{k} y $v_{ij}(\vec{q})$ es la interacción coulombiana entre partículas de tipo i y j .

En la ecuación (1), $\hat{N}_i = \hat{n}_{\vec{q}=0}^i$ indica el operador número de partículas correspondiente a la especie i , siendo $\hat{n}_{\vec{q}}^i$ el operador densidad de partículas

* Becario del CONICET

** Investigador del CONICET

del tipo i con momento \vec{q} :

$$\hat{n}_{\vec{q}}^i = \sum_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}+\vec{q}}^{i*} \hat{a}_{\vec{k}}^i$$

Aquí $\hat{a}_{\vec{k}}^{i*}$ y $\hat{a}_{\vec{k}}^i$ representan los operadores de creación y aniquilación, respectivamente, para la especie i .

Los principales objetos de interés en este trabajo son los factores de estructura parciales, definidos

$$S_{ij}(\vec{q}) = \frac{1}{(n_i n_j)^{1/2}} \frac{\langle \hat{n}_{\vec{q}}^i \hat{n}_{-\vec{q}}^j \rangle}{V} \quad (2)$$

y las correspondientes transformadas de Fourier, es decir, las funciones de correlación de pares:

$$g_{ij}(r) = 1 + \frac{1}{(n_i n_j)^{1/2}} \int \frac{d^3 \vec{q}}{(2\pi)^3} e^{i\vec{q}\vec{r}} (S_{ij}(\vec{q}) - \delta_{ij}) \quad (3)$$

III. CORRELACIONES DE CORTO ALCANCE

La Fórmula de Kimball-Niklasson⁵⁻⁶, relaciona las correlaciones electrón-electrón, en el gas de electrones, con el correspondiente factor de estructura a longitudes de onda cortas. Tosi y colaboradores¹² han extendido a sistemas multicomponentes el resultado de Kimball⁵. En particular ellos encuentran que la derivada de las funciones de correlación al contacto en el sistema multicomponente verifican

$$\left. \frac{\partial g_{ij}(r)}{\partial r} \right|_{r=0} = \frac{2Z_i Z_j e^2 \mu_{ij}}{\hbar^2} g_{ij}(r=0) \quad (4)$$

con

$$\mu_{ij} = m_i m_j / (m_i + m_j)$$

De esta expresión y de la ecuación (3) obtenemos, usando propiedades de las transformadas de Fourier, la extensión a sistemas multicomponentes de la fórmula Kimball-Niklasson:

$$\lim_{q \rightarrow \infty} [q^4 (S_{ij}(\vec{q}) - \delta_{ij})] = -\frac{16\pi (n_i n_j)^{1/2} e^2 Z_i Z_j \mu_{ij}}{\hbar^2} g_{ij}(r=0) \quad (5)$$

Podemos apreciar que, al igual que en el caso del jellium, el término dominante en los factores de estructura parciales a longitudes de onda pequeñas es de orden q^{-4} .

Las funciones de correlación al contacto que aparecen en las ecuaciones (4) y (5), pueden ser evaluadas aproximadamente generalizando a varias componentes la conocida fórmula de Yasuhara⁷⁻⁹ para la correlación electrón-electrón al contacto en el gas de electrones.

Con ese fin consideramos la fórmula de Goldstone¹³ para el corrimiento de la energía producida por la perturbación coulombiana y la aproximamos restringiéndonos a los diagramas de escalera (Fig. 1). Estos diagramas representan el proceso virtual por el cual una partícula del tipo i y otra del tipo j son excitadas fuera de sus esferas de Fermi por interacciones coulombianas mutuas y, luego de dejar una un agujero en su lugar, repiten las interacciones coulombianas hasta que, finalmente, son dispersadas a sus posiciones previas dentro de las correspondientes esferas de Fermi.

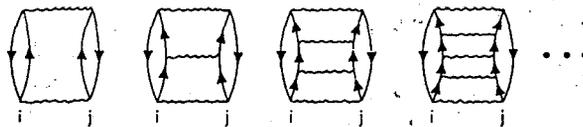


Fig. 1: Diagrama de escalera usados en la ecuación de Goldstone.

Con el objeto de generalizar la fórmula de Yasuhara usamos el hecho que

$$S_{ij}(\vec{q}) - \delta_{ij} = \frac{2}{(n_i n_j)^{1/2}} \frac{\Delta E}{\delta v_{ij}(\vec{q})} \quad (6)$$

donde $\Delta E \equiv E(e^2) - E(0)$, con $E(0)$ la energía de una mezcla de fermiones ideales (descargados) y $E(e^2)$ la energía completa del sistema.

En la fórmula resultante incluimos explícitamente el apantallamiento eléctrico considerando cierto momento de corte K_c , como tal utilizamos el momento de Thomas-Fermi. La expresión final para las funciones de correlación al contacto son¹⁴

$$g_{ij}(r=0) = \begin{cases} \frac{1}{2s_i+1} [F(\tilde{\lambda}_{ii})]^2 & \text{para } i=j \\ [F(\tilde{\lambda}_{ij})]^2 & \text{para } i \neq j \end{cases} \quad (7)$$

donde

$$F(\tilde{\lambda}_{ij}) = \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!(n+1)!} (4\tilde{\lambda}_{ij})^n \right]^{-1} \quad (8)$$

Estamos considerando un sistema paramagnético de fermiones con spins arbitrarios y con S_i indicamos el spin de las partículas de tipo i .

En las ecuaciones (7) y (8), el parámetro de acoplamiento apantallado $\tilde{\lambda}_{ij}$ viene dado por

$$\tilde{\lambda}_{ij} = \frac{\lambda_{ij}}{1 - (2sk_c / k_F^e r_{ij}) \lambda_{ij}} \quad (9)$$

dónde

$k_F^e = \text{Max}(k_F^1, k_F^2, \dots, k_F^N)$, con k_F^i el momento de Fermi para la especie i y

$$r_{ij} = [x_i^{2/3} + x_j^{2/3} + 2x_i^{1/3} x_j^{1/3} \delta_{ij}]^{1/2} \quad (10)$$

con $x_i = n_i / n_e$ y n_e dado por $n_e = (k_F^e)^3 / 3\pi^2$. El parámetro de acoplamiento desnudo en la ecuación (9) es

$$\lambda_{ij} = \frac{2Z_i Z_j \mu_{ij}}{r_{ij} m_e} \lambda$$

con $\lambda = \frac{\alpha r_s}{\pi}$. El radio de Wigner-Seitz r_s se define:

$$r_s = (k_F^e a_0 \alpha)^{-1}; \quad \alpha = (4/9\pi)^{1/3}$$

con a_0 el radio de Bohr para partículas de la especie

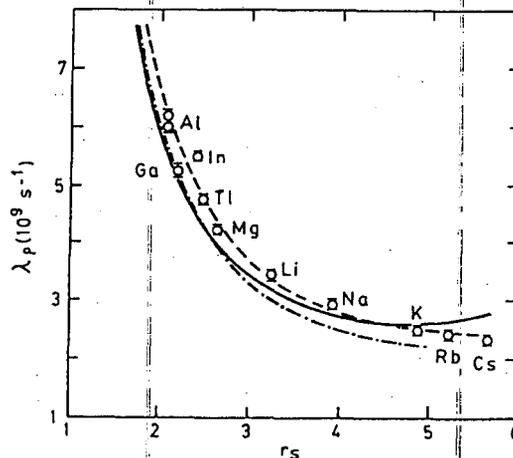


Fig. 2! Régimen de aniquilación de positrones en jellium en función de la densidad de electrones. La línea sólida corresponde a la fórmula (7). La línea de trazos y de trazos son los resultados de Arponen y Pajanne (Ref. 17) y de Lantto (Ref. 18), respectivamente, y han sido reproducidas, al igual que los datos experimentales, de la Fig. 5 de la Ref. 18.

e . Finalmente, en la ecuación (9), s es un número que toma valores entre .1 y .2.

Vale la pena señalar que la sencilla fórmula (7) cuando se aplica a un solo positrón en un mar de electrones, reproduce aceptablemente bien datos experimentales para la aniquilación de positrones en metales¹⁴ (Fig. 2).

IV. CORRELACIONES DE LARGO ALCANCE

Con el objeto de estudiar el comportamiento a largo alcance de las funciones de correlación, es decir el comportamiento a longitudes de onda largas de los factores de estructura parciales $S_{ij}(\vec{q})$, consideramos las reglas de suma para momento cero y para momento 1 o regla de suma f^{4-15} , en términos de la parte imaginaria de la función de respuesta de la densidad éstas se leen:

$$S_{ij}(\vec{q}) = -\frac{\hbar}{\pi(n_i n_j)^{1/2}} \int_0^{\infty} d\omega \text{Im} \chi_{ij}(\vec{q}, \omega) \quad (11)$$

y

$$\sum_{ij} Z_i Z_j \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \omega \text{Im} \chi_{ij}(\vec{q}, \omega) = -q^2 \sum_{i=1}^N \frac{n_i Z_i^2}{m_i} \quad (12)$$

Con el objeto de obtener formas explícitas para los términos dominantes de los factores de estructura parciales a longitudes de ondas largas, suponemos que en ese límite las excitaciones de partícula simple y multipartículas son despreciables frente a los modos colectivos. En particular suponemos que los modos colectivos dominantes son plasmones y fonones. Entonces las funciones de respuesta parciales pueden ser aproximadas en la forma

$$\text{Im}\chi_{ij}(\vec{q}, \omega) = -\frac{\pi}{2}(n_i n_j)^{1/2} \left\{ \alpha_{ij} q^2 [\delta(\omega - \omega_p) - \delta(\omega + \omega_p)] + \beta_{ij} q [\delta(\omega - qv_s) - \delta(\omega + qv_s)] \right\} \quad (13)$$

donde δ es la función delta de Dirac, ω_p es la frecuencia de plasma y v_s la velocidad del sonido.

Sustituyendo (13) en (11) obtenemos

$$S_{ij}(\vec{q}) \underset{q \rightarrow 0}{\approx} \frac{\hbar}{2} [\beta_{ij} q + \alpha_{ij} q^2] \quad (14)$$

También, usando ec. (13) para $\chi_{ij}(\vec{q}, \omega)$ en la regla de suma-f, obtenemos las siguientes relaciones que deben ser verificadas por los coeficientes α_{ij} y β_{ij} .

$$4\pi e^2 \sum_{ij} (n_i n_j)^{1/2} Z_i Z_j \alpha_{ij} = 1 \quad (15)$$

$$\sum_{ij} (n_i n_j)^{1/2} Z_i Z_j \beta_{ij} = 0 \quad (16)$$

En el resto del trabajo nos restringiremos a mezclas binarias del tipo electrón-positrón en las que ambas especies tiene igual masa ($m_+ = m_- = m$), carga ($Z_+ = -Z_- = 1$) y densidad ($n_+ = n_- = n$). Debido a la simetría entre especies tenemos

$$S_{++}(\vec{q}) \equiv S_{--}(\vec{q}) \equiv S_0(\vec{q}) \quad (17)$$

$$S_{+-}(\vec{q}) \equiv S_{-+}(\vec{q}) \equiv S_1(\vec{q})$$

Los parámetros α_{ij} y β_{ij} en el modelo fonón-plasmon se reducen a

$$\alpha_{++} \equiv \alpha_{--} \equiv -\alpha_{+-} \equiv \alpha = \frac{1}{2\omega_p m} \quad (18)$$

$$\beta_{++} \equiv \beta_{--} \equiv -\beta_{+-} \equiv n\beta = \frac{3}{4\hbar k_F} \quad (19)$$

donde la frecuencia de plasma ω_p y el momento de Fermi k_F son

$$\omega_p^2 = \frac{8\pi e^2 n}{m} \quad (20)$$

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} \quad (21)$$

Entonces el comportamiento asintótico de los factores de estructura parciales queda

$$S_0(\vec{q}) \underset{q \rightarrow 0}{\approx} \frac{3}{8} \frac{q}{k_F} + \frac{1}{4} \frac{q^2}{k_S^2} \quad (22)$$

$$S_1(\vec{q}) \underset{q \rightarrow 0}{\approx} \frac{3}{8} \frac{q}{k_F} - \frac{1}{4} \frac{q^2}{k_S^2} \quad (23)$$

con *

$$k_S^2 = \frac{8\pi e^2 n}{\hbar \omega_p}$$

A partir de los factores de estructura parciales podemos evaluar los factores de estructura partícula-partícula y carga-carga⁴ para sistemas 1-1 cuyos comportamientos asintóticos son:

$$S_{NV}(\vec{q}) \equiv S_0(\vec{q}) + S_1(\vec{q}) \underset{q \rightarrow 0}{\approx} \frac{3}{4} \frac{q}{k_F} \quad (24)$$

$$S_{QQ}(\vec{q}) \equiv 2[S_0(\vec{q}) - S_1(\vec{q})] \underset{q \rightarrow 0}{\approx} \frac{q}{k_S^2} \quad (25)$$

Podemos observar que el factor de estructura carga-carga, a igual que el factor de estructura del jellium está dominado por modos plasmónicos. El

factor de estructura partícula-partícula, en cambio, se comporta como un gas ideal de fermiones.

Es interesante comparar el límite para números de onda pequeños que hemos encontrado para los factores de estructura parciales en mezclas tipo electrón-positrón (ecs. (22) y (23)), con los correspondientes comportamientos encontrados en metales líquidos. En estos últimos el comportamiento esencialmente clásico de los iones positivos, conjuntamente con la electroneutralidad hacen que tanto el factor de estructura ión-ión como electrón-electrón y electrón-ión estén dominados a longitudes de ondas largas por un término constante proporcional a la compresibilidad isotérmica¹⁶.

REFERENCIAS

1. Mahan, G. D. *Many-particle Physics*. Plenum Press, New York. 1981.
2. March, N. M. y M. P. Tosi. *Coulomb Liquids*. Academic Press, London. 1984.
3. Hansen, J. P. y I. R. McDonald. *Theory of Simple Liquids*. Academic Press, London (1986).
4. March, N. H. y M. P. Tosi. *Atomic Dynamics in Liquids*. MacMillan Press Ltd., London (1976).
5. Kimball, J. C. *Phys. Rev.*, **A7**, 1648 (1973).
6. Niklasson, G. *Phys. Rev.*, **B10**, 3052 (1974).
7. Yasuhara, H. *Solid State Commun.* **11**, 1481 (1972).
8. Yasuhara, H. *J. Phys. Soc. Japan* **36**, 361 (1974).
9. Yasuhara, H. *Physica* **78**, 420 (1974).
10. Bedell, K. y G. E. Brown. *Phys. Rev.* **B17**, 4512 (1978).
11. Rajagopal, A. K ; Kimball, J. C. y M. Banerjee. *Phys. Rev.* **B18**, 2339 (1978).
12. Pastore, G.; Senatore, G. y M. P. Tosi. *Phys. Lett.* **A84**, 369. (1981).
13. Fetter, A. L. y J. D. Walecka. *Quantum Theory of Many-particle System*. McGraw Hill Book Company, New York. 1981.
14. Vericat, F. y A. A. Melgarejo. Enviado a publicar.
15. Martin, P. C. *Phys. Rev.* **161**, 143 (1967).
16. Watanabe y H. Hasegawa. *The Properties of Liquids Metals*. Sakae Takeuchi ed. Taylor and Francis Ltd. London, p 133 (1973).
17. Arponen, J. y E. Pajanne. *Ann. Phys.*, **121**, 343 (1979). New York.
18. Lantto, L. J. *Phys. Rev.* **B36**, 5160 (1987).