

EL CAMPO MEDIO EN LA FISICA CUANTICA DE MUCHOS CUERPOS

Manuel de Llano de la Garza

Instituto de Física y Facultad de Ciencias
Universidad Nacional Autónoma de México
Apartado Postal 20-364
01000 México 20, D.F.

(recibido mayo 29, 1984; aceptado junio 19, 1984)

RESUMEN

A manera de introducción al problema cuántico de muchos cuerpos exponemos de forma panorámica la clase de teorías más elementales, llamadas de "campo medio". En ellas caben: i) la teoría del gas ideal de fermiones que implica de manera muy simple la estabilidad de estrellas enanas blancas y de neutrones, ii) la aproximación de Hartree-Fock para sistemas termodinámicos que se ilustra aquí en el contexto de la transición de fase a un cristal-líquido, y iii) la teoría de Thomas-Fermi que se aplica a la energía de amarre total de los átomos neutros.

ABSTRACT

As an introduction to the quantum problem of many bodies we

present a panoramic view of the most elementary theories called mean field theories. They comprise: i) the fermions ideal gas theory which implies, in a simple manner, the stability of white dwarf stars and of neutron stars, ii) the Hartree-Fock approximation for thermodynamical systems which is presented here in the context of a liquid-crystal phase transition, and iii) the Thomas-Fermi theory which is applied to the total binding energy of neutral atoms.

1. INTRODUCCION

Es bien sabido que la ecuación fundamental de la mecánica cuántica no-relativista, la ecuación de Schrödinger, admite solución analítica o bien por métodos gráficos, sólo para el problema de un solo cuerpo. Los poquísimos contra-ejemplos a esto lo constituyen algunos problemas de muchos cuerpos exactamente solubles, pero hasta la fecha éstos representan modelos (hamiltonianos) demasiado esquemáticos y en dimensionalidad menor que tres, y por tanto poco realistas. Gracias al advenimiento de computadoras electrónicas rápidas viene siendo factible resolver, por lo menos para el estado base, la ecuación de Schrödinger para centenares de partículas, principalmente bosones, que interactúan en tres dimensiones con fuerzas realistas. Estos métodos numéricos son los de Monte Carlo, basados en la función de Green (GFMC) del problema de N cuerpos,⁽¹⁾ y ofrecen una verdadera riqueza de "datos experimentales" frente a los cuales se puede comparar y comprobar la validez de las distintas teorías y aproximaciones de la ecuación de Schrödinger de muchos cuerpos en interacción. De todas estas teorías trataremos aquí sólo las más elementales, que son las que podrían llamarse de "campo medio", en analogía a la teoría de van der Waals para la descripción de fluidos clásicos. Esperamos que esta exposición sirva de introducción al problema cuántico de muchos cuerpos. En la sección 2 desarrollaremos algunos resultados algebraicos relacionados con la antisimetría de fermiones; en la 3 deducimos la ecuación de estado de los gases ideales fermiónicos y bosónicos en su estado fundamental; en la 4 aplicamos ideas de gas ideal (es decir, sin interacciones) de fermiones a la estructura estelar de enanas blancas y estrellas neutrónicas; en la 5 planteamos la aproximación de Hartree-Fock y la ilustramos con una aplicación a la transición de fase al cristal-líquido; en la 6 desarrollamos la

teoría de Thomas-Fermi, aplicándola a los átomos neutros; y en la 7 presentamos algunas conclusiones.

2. DETERMINANTES DE SLATER

Es conocido que si tenemos un sistema de N cuerpos idénticos, la función de onda (empíricamente) será simétrica o antisimétrica ante la trasposición en ella de todas las coordenadas de dos partículas cualesquiera. El caso simétrico deja la función de onda variante ante la trasposición y se refiere a partículas llamadas bosones (de espín intrínseco entero), en tanto que el caso antisimétrico hace que cambie de signo la función y describe partículas llamadas fermiones (de espín intrínseco semi-entero).

Si disponemos de un conjunto completo de funciones $\{\psi_k(\vec{r})\}$ (e.g., de ondas planas) en términos de los cuales podemos desarrollar, e.g., las eigenfunciones $\psi(\vec{r})$ de una partícula en un potencial cualquiera (si las eigenfunciones obedecen las mismas condiciones a la frontera que las funciones $\psi_k(\vec{r})$), el conjunto de todos los posibles determinantes

$$\begin{aligned} \Phi_{k_1 k_2 \dots k_N}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) &= (N!)^{-\frac{1}{2}} \sum_P (-)^P \psi_{k_1}(\vec{r}_1) \psi_{k_2}(\vec{r}_2) \dots \psi_{k_N}(\vec{r}_N) \\ &\equiv (N!)^{-\frac{1}{2}} \begin{vmatrix} \psi_{k_1}(\vec{r}_1) \psi_{k_2}(\vec{r}_1) \dots \psi_{k_N}(\vec{r}_1) \\ \psi_{k_1}(\vec{r}_2) \psi_{k_2}(\vec{r}_2) \dots \psi_{k_N}(\vec{r}_2) \\ \vdots \\ \psi_{k_1}(\vec{r}_N) \psi_{k_2}(\vec{r}_N) \dots \psi_{k_N}(\vec{r}_N) \end{vmatrix}, \end{aligned} \quad (1)$$

donde

P = permutación par o impar, $(-)^P = +$ ó $-$, sobre las coordenadas \vec{r}_i o los "estados" k_i ; e.g., $k_i \equiv (n_i, l_i, m_i)$,

será un conjunto completo en términos del cual podremos desarrollar una eigenfunción $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$, de un hamiltoniano de N cuerpos, que sea antisimétrica. Es fácil ver que los determinantes (1) estarán normalizados si las orbitales $\psi_k(\vec{r})$ lo están, es decir, si

$$\langle k_i | k_j \rangle \equiv \int d^3 r_1 \psi_{k_i}^*(\vec{r}_1) \psi_{k_j}(\vec{r}_1) = \delta_{ij} \quad (i, j = 1, 2, \dots, N), \quad (2)$$

$$\delta_{ij} = 1 (i = j), = 0 (i \neq j) .$$

Un solo determinante Φ del conjunto (infinito) representado por la expresión (1) podría utilizarse para calcular el valor esperado $\langle \Phi | H | \Phi \rangle$ de un hamiltoniano H de N cuerpos cualquiera. Con esto tendríamos, por el teorema de Rayleigh-Ritz, una cota rigurosa superior a la energía del estado fundamental del sistema físico descrito por ese hamiltoniano. Como H en general está compuesto por operadores de uno y dos cuerpos, e.g., la energía cinética $-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2$ y la energía potencial $\sum_{i < j}^N V(r_{ij})$, calculemos los valores esperados de los operadores genéricos:

$$F \equiv \sum_{i=1}^N f_i, \quad G \equiv \sum_{i < j}^N g_{ij}, \quad (3)$$

donde $i, j = 1, 2, \dots, N$ son índices de partícula. Entonces, si P y P' se refieren a transposiciones que actúan sobre los conjuntos idénticos (salvo por orden) $\{k_i\}$ y $\{k'_i\}$ respectivamente,

$$\begin{aligned} \langle \Phi | F | \Phi \rangle &\equiv \int d^3 r_1 \dots \int d^3 r_N \Phi^*(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \sum_{i=1}^N f_i \Phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \\ &= \frac{1}{N!} \sum_{P, P'} (-)^{P+P'} \int d^3 r_1 \dots \int d^3 r_N \psi_{k_1}^*(\vec{r}_1) \dots \psi_{k_N}^*(\vec{r}_N) \cdot \\ &\quad \cdot \sum_{i=1}^N f_i \psi_{k_1}(\vec{r}_1) \dots \psi_{k_N}(\vec{r}_N) \\ &= \frac{N}{N!} \sum_{P, P'} (-)^{P+P'} \int d^3 r_1 \psi_{k_1}^*(\vec{r}_1) f_1 \psi_{k_1}(\vec{r}_1) \int d^3 r_2 \psi_{k_2}^*(\vec{r}_2) \psi_{k_2}(\vec{r}_2) \dots \\ &\quad \dots \int d^3 r_N \psi_{k_N}^*(\vec{r}_N) \psi_{k_N}(\vec{r}_N) \\ &= \frac{1}{(N-1)!} \sum_{P, P'} (-)^{P+P'} \langle k_1 | f_1 | k'_1 \rangle \delta_{k_2 k'_2} \dots \delta_{k_N k'_N}, \end{aligned}$$

donde en el penúltimo paso se usó el hecho que los índices i, j de \vec{r}_i, \vec{r}_j son mutuos y en el último paso se emplea la supuesta normalización (2). Luego

$$\langle \phi | F | \phi \rangle = \sum_{k_1, k'_1} \delta_{k_1, k'_1} \langle k_1 | f_1 | k'_1 \rangle = \sum_{k_1} \langle k_1 | f_1 | k_1 \rangle \quad , \quad (4)$$

es decir, el valor esperado, que al principio era una integral de orden $3N$, se reduce ahora a una suma de N términos de integrales de orden 3, pues

$$\langle k_1 | f_1 | k_1 \rangle \equiv \int d^3 r_1 \psi_{k_1}^*(\vec{r}_1) f_1 \psi_{k_1}(\vec{r}_1) \quad . \quad (5)$$

Análogamente, para el operador de dos cuerpos G tendremos

$$\begin{aligned} \langle \phi | G | \phi \rangle &= \frac{1}{N!} \sum_{P, P'} (-)^{P+P'} \int d^3 r_1 \dots \int d^3 r_N \cdot \\ &\cdot \psi_{k_1}^*(\vec{r}_1) \psi_{k_2}^*(\vec{r}_2) \dots \psi_{k_N}^*(\vec{r}_N) \sum_{i < j}^N g_{ij} \psi_{k'_1}(\vec{r}_1) \psi_{k'_2}(\vec{r}_2) \dots \psi_{k'_N}(\vec{r}_N) \\ &= \frac{1}{N!} \frac{1}{2} N(N-1) \sum_{P, P'} (-)^{P+P'} \langle k_1 k_2 | g_{12} | k'_1 k'_2 \rangle \delta_{k_3 k'_3} \dots \delta_{k_N k'_N} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k_1 k_2 k'_1 k'_2} (\delta_{k_1 k'_1} \delta_{k_2 k'_2} - \delta_{k_1 k'_2} \delta_{k_2 k'_1}) \langle k_1 k_2 | g_{12} | k'_1 k'_2 \rangle \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k_1 k_2} \{ \langle k_1 k_2 | g_{12} | k_1 k_2 \rangle - \langle k_1 k_2 | g_{12} | k_2 k_1 \rangle \} \quad , \quad (6) \end{aligned}$$

donde hemos definido la integral sextuple

$$\langle k_1 k_2 | g_{12} | k'_1 k'_2 \rangle \equiv \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \psi_{k_1}^*(\vec{r}_1) \psi_{k_2}^*(\vec{r}_2) g_{12} \psi_{k'_1}(\vec{r}_1) \psi_{k'_2}(\vec{r}_2) \quad . \quad (7)$$

Observamos que la integral original de orden $3N$ se ha reducido a una suma de $N(N-1)$ integrales de orden 6.

3. GAS IDEAL DE FERMIONES Y DE BOSONES EN SU ESTADO FUNDAMENTAL

Las eigenfunciones normalizadas de una partícula en una "caja" unidimensional de longitud L son

$$\begin{aligned} \psi_k(x) &= \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} \quad , \\ \langle k/k' \rangle &\equiv \int_0^L dx \psi_k^*(x) \psi_{k'}(x) \\ &= \frac{1}{L} \frac{e^{i(k'-k)L} - 1}{i(k' - k)} \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \delta_{kk'} \end{aligned} \quad (8)$$

Imponiendo a la caja condiciones a la frontera periódicas se tiene

$$\psi_k(x) \equiv \psi_k(x+L) \implies e^{ikL} = 1 \quad ,$$

por lo tanto

$$kL = 2\pi n \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad . \quad (9)$$

La suma sobre k de una función $f(k)$ será, como $\Delta n \equiv 1$,

$$\begin{aligned} \sum_k f(k) &\equiv \sum_{n=0, \pm 1, \pm 2, \dots} \Delta n f(n) = \frac{L}{2\pi} \sum_k \Delta k f(k) \\ &\xrightarrow{L \rightarrow \infty} \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk f(k) \quad . \end{aligned} \quad (10)$$

Como aplicación inmediata de este resultado tenemos que

$$\sum_k \psi_k^*(x) \psi_k(x') \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{1}{L} e^{ik(x' - x)} \equiv \delta(x - x') \quad , \quad (11)$$

es decir, la completitud para ondas planas.

En tres dimensiones tendremos, en vez de la (9),

$$k_i = \frac{2\pi}{L} n_i \quad (i = x, y, z) \quad \text{con} \quad n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad \text{Entonces, en}$$

vez de la Ec. (10), se tiene que

$$\sum_{\vec{k}} f(k) \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int d^3k f(k) \quad . \quad (12)$$

Consideremos ahora N partículas libres de spin $1/2$ descritas por un sólo determinante (1) compuesto por N orbitales ortogonales. El principio de Pauli queda entonces automáticamente satisfecho, ya que el determinante se anula si dos columnas cualesquiera son idénticas, es decir, si dos partículas ocupan el mismo estado cuántico. El número N de partículas, que es el orden del determinante, será ahora la suma finita dada por el número de órbitas ocupadas:

$$N = \sum_{\sigma} \sum_{\vec{k}(\text{occ})} 1 \equiv \sum_{\vec{k}(\text{occ})} 1 \xrightarrow{L \rightarrow \infty} v \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int_{k < k_F} d^3k = \frac{vV}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} k_F^3 \quad . \quad (13)$$

Aquí v es la ocupación máxima de cada órbita especial, y sería 1 para electrones o neutrones polarizados, 2 para neutrones o electrones no polarizados (por las 2 posibles orientaciones de su espín), 4 para nucleones (pues cada nucleón puede ser neutrón o protón), etc. Y k_F será el radio máximo (llamado de Fermi) que se ocupa en el espacio (k_x, k_y, k_z) en tanto que $V \equiv L^3$ es el volumen total ocupado por los N fermiones. La densidad de número n_0 será entonces

$$n_0 \equiv N/V = vk_F^3/6\pi^2 \quad . \quad (14)$$

Por otro lado, la energía total del sistema de fermiones libres es por definición energía cinética pura, o bien

$$\begin{aligned} \langle T \rangle &\equiv \langle \Phi | -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 | \Phi \rangle \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\vec{k}_1, \sigma} \langle \vec{k}_1, \sigma | \nabla_1^2 | \vec{k}_1, \sigma \rangle \quad , \end{aligned} \quad (15)$$

donde en el último paso usamos la Ec. (4). Ahora bien, por la Ec. (8)

$$\begin{aligned}
 \langle \vec{k}_1, \sigma | \nabla_1^2 | \vec{k}_1, \sigma \rangle &\equiv \frac{1}{V} \int_V d^3r_1 e^{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1} \nabla_1^2 e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1} \\
 &= - \frac{k_1^2}{V} \int_V d^3r_1 \equiv -k_1^2
 \end{aligned} \tag{16}$$

Por consiguiente, la energía (cinética) por partícula se reduce, si empleamos la (12), a

$$\begin{aligned}
 \langle T \rangle / N &= N^{-1} \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\vec{k}_1, \sigma} k_1^2 \xrightarrow{V \rightarrow \infty} N^{-1} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{k_1 < k_F} d^3k_1 k_1^2 \\
 &= N^{-1} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{5} k_F^5 = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \equiv \frac{3}{5} \epsilon_F,
 \end{aligned} \tag{17}$$

donde en el penúltimo paso se usó la Ec. (14). La energía ϵ_F se llama la energía de Fermi y es la energía cinética máxima que puede poseer una partícula; la energía promedio es entonces 3/5 de este valor máximo. Finalmente, la energía por partícula en función de la densidad $n_0 \equiv \frac{N}{V}$, es decir, la ecuación de estado del gas ideal de fermiones será, usando la Ec. (14) en la Ec. (17),

$$\langle T \rangle / N = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{6\pi^2 n_0}{v} \right)^{2/3} \equiv C_v n_0^{2/3}. \tag{18}$$

Notemos que este resultado riguroso se entiende heurísticamente en términos de la relación de incertidumbre de Heisenberg ($\Delta p \Delta x \gtrsim \hbar/2$) pues la energía cinética por partícula sería entonces $\sim \frac{(\Delta p)^2}{2m} \sim \frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2} \sim \frac{\hbar^2 n_0^{2/3}}{8m}$, si identificamos la longitud Δx disponible a una partícula con la separación promedio entre partículas $\sim (V/N)^{1/3} \equiv n_0^{-1/3}$. La Ec. (18) es entonces la ecuación de estado referida a temperatura absoluta cero, es decir, al estado fundamental del gas ideal de fermiones. Para bosones en vez de los determinantes (1) tendríamos permanentes, o sea un arreglo de orbitales parecido al (1) salvo que al desarrollar todos los $N!$ términos (de N factores orbitales cada uno) llevan signo positivo. El permanente es entonces simétrico ante el intercambio de dos columnas cualesquiera, es decir, ante la transposición de dos partículas entre dos estados k_i, k_j cualesquiera. Pe

ro además, no hay ahora principio de exclusión de modo que podemos colocar todos los N bosones en el estado orbital (8) de menor energía, a saber $k=0$. Así, vemos que el resultado para el gas ideal de bosones correspondiente a la Ec. (18) será

$$\langle T \rangle / N \equiv 0 \quad \forall \quad n_0 \equiv N/V \quad . \quad (19)$$

Queda claro, pues, que la energía cinética finita (18) que existe en el caso de fermiones se debe a la "repulsión estadística" proporcionada por el principio de exclusión de Pauli. La presión termodinámica correspondiente es $P \equiv - (\partial F / \partial V)_{N,T}$ donde $F \equiv E - TS$ es la energía libre de Helmholtz, dada en términos de la energía interna E (que aquí es la energía cinética $\langle T \rangle$) y la entropía S veces la temperatura absoluta T . Como ésta es cero, $F = E = \langle T \rangle$ y entonces

$$P = n_0^2 \frac{\partial \langle T \rangle / N}{\partial n_0} = \frac{2}{3} C_V n_0^{\frac{5}{3}} \quad (20)$$

que es la llamada presión de Fermi. Para bosones, claro está, $P \equiv 0$ para toda n_0 .

Para temperaturas elevadas, o sea $T > 0$, tanto la energía (18) y la presión (20) se verán aumentados, a una densidad fija, por efectos térmicos (2). Esto se deberá a que entonces habrá en la Ec. (13) una mezcla de todos los estados $V^{-\frac{1}{2}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$ en las sumas respectivas sobre \vec{k} , y no nada más sobre los que tienen magnitud menor o igual a un valor máximo k_F . La "distribución" de estados \vec{k} será ahora el "escalón liso" (en k) dado por

$$n_{\vec{k}}(T) = \left\{ 1 + e^{[\hbar^2 k^2 / 2m - \mu(T)] / kT} \right\}^{-1} \quad , \quad (21)$$

donde $\mu(T)$ es el llamado potencial químico que para $T = 0$ coincide con la energía de Fermi definida en la Ec. (17). Es decir,

$$\mu(0) \equiv \epsilon_F \equiv \hbar^2 k_F^2 / 2m \quad . \quad (22)$$

O sea, que el escalón liso (21) se vuelve un "escalón abrupto" en este límite:

$$n_k(0) = \theta(k_F - k) \equiv \begin{cases} 1 & (k \leq k_F) \\ 0 & (k > k_F) \end{cases} \quad (23)$$

Esta última distribución es la que se supone tácitamente en las sumas e integrales de las Ecs. (13) y (17).

4. ESTRELLAS ENANAS BLANCAS, ESTRELLAS DE NEUTRONES Y AGUJEROS NEGROS

Una estrella "normal" (de la llamada "secuencia principal") como nuestro sol produce energía principalmente por la fusión de núcleos ligeros como el H a núcleos más pesados como el He. La presión térmica, proveniente de la energía cinética de las partículas constituyentes, más la presión de radiación, se equilibran con la compresión gravitacional de las masas en atracción, y la estrellas mantienen una cierta estabilidad de tamaño, o radio, R_\odot que es del orden de 7×10^{10} cm. Al agotarse este mecanismo de fusión de producción de energía, y después de pasar por una etapa de gigante roja en que la estrella se enfrió y se expandió enormemente, ocurre la muerte de la estrella. Esta puede acabar como: i) una enana blanca, compuesta principalmente por núcleos de helio-4 (o carbono-12, o hierro-56) sumergidos en un mar de electrones liberados, todo el sistema a temperaturas absolutas entre 10^5 y 10^7 °K, y densidades entre 10^6 y 10^8 gm/cm³ (contra ~ 1 gm/cm³ en el sol); o bien, ii) una estrella de neutrones con una densidad 10^{14} gm/cm³ (aproximadamente la densidad de un núcleo pesado como el ^{208}Pb) compuesta en un 99% por los neutrones que restan después de la conversión de los protones y electrones de la enana blanca en neutrones por el proceso de decaimiento beta inverso $p + e^- \rightarrow n + \nu$; o finalmente, iii) un agujero negro en que la contracción gravitacional redujo el tamaño del cuerpo a un límite tal que la velocidad de escape es igual a la velocidad de la luz, c , y ni un fotón puede escapar. Este radio R_s , llamado de Schwarzschild, está entonces definido por $\frac{1}{2} mc^2 = \frac{GmM}{R_s}$, o bien $R_s = 2GM/c^2$, donde G es la constante gravitacional, M y m las masas estelar y de una "partícula" cualquiera, respectivamente. El tipo (i) de "cadáver" de estrella "normal" con que empezamos ocurre generalmente cuando la masa de és

ta es del orden de magnitud de una masa solar M_{\odot} , el (ii) cuando es diez veces y el (iii) cuando es cien o más veces (al grado tal que ningún mecanismo de presión es capaz de contrarrestar la contracción gravitacional). La Fig. 1 compara los tamaños relativos de una gigante roja, nuestro sol, una enana blanca, una estrella de neutrones y el agujero negro. Los radios de Schwarzschild R_S para cuerpos con la masa de la Tierra y el Sol serían, respectivamente, 1 cm y 3 km. Una enana blanca típica con una masa M_{\odot} es de un radio $R \approx 10$ km, poco por encima del $R_S = 3$ km correspondiente.

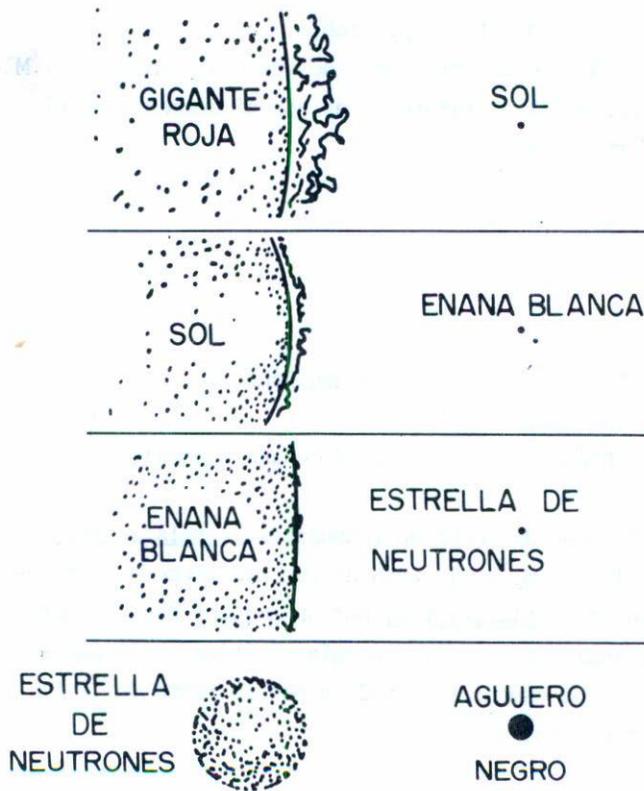


Figura. 1

La presión que equilibra la compresión gravitatoria en la enana

blanca es básicamente la presión del gas (degenerado, es decir a temperatura $T=0$) de fermiones formado por los electrones liberados, en tanto que en la estrella de neutrones es esencialmente la de los fermiones neutrones. Que estos dos sistemas puedan considerarse a temperatura absoluta cero, a pesar de encontrarse a temperaturas tan elevadas, está claro ya que estas temperaturas son varios órdenes de magnitud menores que la "temperatura", llamada de Fermi, T_F definida por las Ecs. (17), (22) y (14), a saber:

$$kT_F \equiv \epsilon_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{6\pi^2}{v} n_0 \right)^{2/3} \quad (24)$$

Por lo tanto, la desviación del escalón abrupto (23) que describe sistemas a $T=0$ será completamente despreciable.

Tratándose de una esfera de radio R y masa total M tendremos que la energía potencial gravitatoria es aproximadamente igual a la energía cinética de Fermi, o sea

$$GM^2/R \approx N \epsilon_F \quad , \quad (25)$$

donde

$$\epsilon_F = \begin{cases} \hbar^2 k_F^2 / 2m_N & \text{(estrella neutrónica)} \\ \sqrt{\hbar^2 k_F^2 c^2 - m_e^2 c^4} - m_e c^2 & \text{(enana blanca).} \end{cases} \quad (26)$$

Aquí m_N es la masa del neutrón (supuestos no-relativistas y, por tanto, se usa la Ec. (17)) y m_e es la masa de los electrones liberados de la enana blanca (supuestos relativistas, por su pequeña masa, y por tanto se usa la expresión relativista para la energía cinética). En ambos casos, los fermiones son de dos especies ($v = 2$) y por lo tanto de la Ec. (14) con $V = 4\pi R^3/3$ tendremos que

$$k_F = \left(\frac{9\pi}{4} \frac{N}{R^3} \right)^{1/3} \quad . \quad (28)$$

Consideraremos explícitamente el caso de las enanas blancas. Combinando las Ecs. (25) y (27) se tiene la ecuación

$$\left(\frac{GM^2}{RN}\right)^2 + 2m_e c^3 \frac{GM^2}{RN} = (\hbar c)^2 \left(\frac{9\pi}{4} \frac{N}{R^3}\right)^{2/3}, \quad (29)$$

con N el número de electrones liberados. Como la masa total es principalmente la de los nucleones de los núcleos ionizados:

$$M \cong \mu m_N N, \quad (30)$$

con μ el número de nucleones por electrón. Para la enana blanca compuesta de helio-4 examinaremos aquí, $\mu = 2$. Como el número de nucleones en el sol es $N_\odot \cong 10^{38}$ y

$$N_\odot^{2/3} \cong \frac{\hbar c}{Gm_N^2} \cong 10^{38}, \quad (31)$$

la Ec. (29) se vuelve

$$N^2 + 2N_\odot^{2/3} \frac{R}{\lambda_c} N = N_\odot^{4/3} N^{2/3}, \quad (32)$$

$$\lambda_c \cong \hbar/m_e c \cong 3 \times 10^{-11} \text{ cm}.$$

Dividiendo por $N^{4/3}$ tendremos que

$$\frac{R}{N^{1/3}} = \frac{1}{2} \lambda_c \left[\left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{1}{x} - x \right] \geq 0, \quad (33)$$

$$x \equiv (N/N_\odot)^{2/3} \equiv (M/2M_\odot)^{2/3},$$

donde la última igualdad se debe a que $M_\odot \cong N_\odot m_N$ y a la Ec. (30) con $\mu = 2$. La desigualdad en (33) es idéntica a la desigualdad

$$M \lesssim 5.2 M_\odot, \quad (34)$$

que es llamada el límite de Chandrasekhar. Un análisis menos burdo⁽³⁾ da $M \leq 1.45 M_\odot$. El límite sugiere que para poder morir como una estrella degenerada, una estrella con masas superior a $1.45 M_\odot$ deberá despojarse por al

gún mecanismo (por ejemplo, una explosión de supernova) de su masa excesiva. De no ser así, se piensa en la actualidad, la estrella acabará como un agujero negro, o sea un objeto casi totalmente colapsado por la gravitación, como veremos más adelante. De las aproximadamente 200 enanas blancas identificadas, unas diez tienen medidas sus masas y radios. El valor típico de x en la Ec. (33) es tal que

$$R_{EB} \cong \lambda_c N^{1/3} \cong 5 \times 10^{-3} R_{\odot} \cong R_{tierra} \quad . \quad (35)$$

El análisis burdo que parte de las Ecs. (26) y (27) nos lleva, para el caso de una estrella neutrónica con radio de 13 km, a la masa $M = 0.026 M_{\odot}$.

Si nuestra estrella normal empezó con masas bien superiores, entonces, a la masa solar M_{\odot} , y no se despojó durante su vida del exceso de masa permitiendo que acabe ya sea como una enana blanca o como una estrella neutrónica, la compresión gravitacional seguirá su curso hasta producir el llamado colapso gravitacional. Pese a que las fuerzas gravitacionales entre dos masas son las más débiles de la naturaleza (siendo $\sim 10^{-38}$ veces la intensidad de las fuerzas nucleares), no hay nada que detenga el colapso que producen si la masa del cuerpo (estrella) es suficientemente grande. Esbozemos aquí el colapso inevitable de la materia debido a la gravitación, en el límite $N \rightarrow \infty$, que produce una energía total $\sim N^3$ para bosones y $\sim N^{7/3}$ para fermiones. La energía total será un equilibrio entre la energía potencial gravitacional $\sim GN^2/R$ y la cinética (por el principio de incertidumbre de Heisenberg) $\sim N/(\Delta x)^2$, donde R es el radio global del sistema y Δx es una dimensión lineal en que puede moverse cada partícula. Esta dimensión lineal es $\sim R$ para bosones pero $(\Delta x)^3 \sim R^3/N$ para fermiones, debido a que el principio de exclusión de Pauli impide que se sobrepongan las partículas. Entonces, sustituyendo tenemos que la energía total es

$$E(R) \sim \begin{cases} \frac{N}{R^2} - G \frac{N^2}{R} & (\text{bosones}) \\ \frac{N^{5/3}}{R^2} - G \frac{N^2}{R} & (\text{fermiones}) \end{cases} \quad . \quad (36)$$

Minimizando en R encuéntrese que $E'(R_0) = 0$ para

$$R_0 \sim \begin{cases} 2/GN & (\text{bosones}) \\ 2/GN^{1/3} & (\text{fermiones}) \end{cases}, \quad (37)$$

lo que deja, al sustituir en la Ec. (36), el resultado

$$E(R_0) \sim \begin{cases} -\left(\frac{G}{2}\right)^2 N^3 & (\text{bosones}) \\ -\left(\frac{G}{2}\right)^2 N^{7/3} & (\text{fermiones}) \end{cases}. \quad (38)$$

En ambos casos la energía por partícula diverge a $-\infty$ cuando $N \rightarrow \infty$, y la "densidad media" $N^{4\pi/3} R_0^3$ diverge como N^4 para bosones y N^2 para fermiones. La exactitud asintótica de la teoría de Thomas-Fermi para neutrones ha sido establecida por Hertel, Narnhafer y Thirring (1972)⁽⁴⁾ quienes rigurosamente encuentran que $E_{N \rightarrow \infty} \sim -N^{7/3}$, quedando corroborada la estimación (38).

El cuerpo que se colapsa irremediamente es el agujero negro, y representa una verdadera singularidad espeluznante.

5. APROXIMACION DE HARTREE-FOCK

El tratamiento de estructura estelar acabado de ver se basa sobre un gas de fermiones a temperatura absoluta cero y sin interacciones entre las partículas. La función de onda correspondiente es por tanto un solo determinante (1) compuesto por "orbitales" que son ondas planas, como en las Ecs. (15) a (17). Preguntemos si puede irse más allá del caso del gas ideal pero aún limitándonos a la aproximación del determinante único: esto lleva a la aproximación de Hartree-Fock (1929) que en realidad puede considerarse como un primer paso en una teoría perturbativa. Tómese para un sistema de N cuerpos de masas idénticas m el hamiltoniano la suma de operadores de uno y dos cuerpos

$$H \equiv T + v \equiv \sum_{i=1}^N T_i + \sum_{i < j}^N v_{ij}. \quad (39)$$

La interacción entre pares v_{ij} , e.g., podría ser la repulsión interelectrónica e^2/r_{ij} en un átomo, molécula o cristal. El operador T_i puede ser la suma de energía cinética $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$ y atracción electrón-núcleo $-Ze^2/r_i$, o inclusive el potencial periódico en un metal, etc. Sea ϕ_0 el determinante único

$$\phi_0 = (N!)^{-\frac{1}{2}} \det[\psi_{k_i}(r_j)] \quad , \quad (40)$$

cuyas orbitales $\psi_{k_i}(r_j)$ ($i, j = 1, 2, \dots, N$) son desconocidas, pero que exigiremos ser ortogonales, a saber,

$$\int d^3r \psi_{k_i}^*(\vec{r}) \psi_{k_j}(\vec{r}) = \delta_{k_i, k_j} \quad . \quad (41)$$

El valor esperado del hamiltoniano (39) será por las Ec. (4), (6) y (7), si etiquetamos los N estados $k_i = 1, 2, \dots, N$,

$$E = \langle \phi_0 | H | \phi_0 \rangle = \sum_{k=1}^N \langle \psi_{k_1} | T_1 | \psi_{k_1} \rangle + \sum_{k_1 < k_2}^N \langle \psi_{k_1} \psi_{k_2} | v_{12} | \psi_{k_1} \psi_{k_2} - \psi_{k_2} \psi_{k_1} \rangle \quad , \quad (42)$$

donde en el último paso empleamos una abreviación obvia para los elementos de matriz llamados "directo" e "intercambio". El extremal (es decir, mínimo, máximo o punto de inflexión) de la energía ϵ , considerada como una funcional $E[\psi_{k_1}^*, \psi_{k_1}]$ de las orbitales desconocidas $\psi_{k_1}^*$, sujeta la extremal a la condición (41), se obtiene de

$$\frac{\delta}{\delta \psi_e} \left\langle E[\psi_k^*, \psi_k] - \sum_{k_1, k_2} \lambda_{k_1 k_2} \langle \psi_{k_1} | \psi_{k_2} \rangle \right\rangle = 0 \quad , \quad (43)$$

donde $\lambda_{k_1 k_2}$ son constantes llamadas multiplicadores de Lagrange. Para calcular la Ec. (43) usamos el hecho de que

$$\frac{\delta}{\delta \psi_e(\vec{r})} \psi_k^*(\vec{r}') = \delta_{k\ell} \delta(\vec{r}' - \vec{r}) \quad . \quad (44)$$

Por ejemplo,

$$\frac{\delta}{\delta \psi_{\ell}^*(\vec{r})} \sum_{k_1} \int d^3 r_1 \psi_{k_1}^*(\vec{r}_1) T_1 \psi_{k_1}(\vec{r}_1) \equiv T_1 \psi_{\ell}(\vec{r}) \quad , \quad (45)$$

y así sucesivamente. La Ec. (43) se reduce entonces a

$$\begin{aligned} T_1 \psi_{\ell}(\vec{r}_1) + \sum_k \int d^3 r_2 \psi_{k_2}^*(\vec{r}_2) V_{12} \psi_{k_2}(\vec{r}_2) \cdot \psi_{\ell}(\vec{r}_1) - \\ - \sum_{k_2} \int d^3 r_2 \psi_{k_2}^*(\vec{r}_2) V_{12} \psi_{\ell}(\vec{r}_2) \psi_{k_2}(\vec{r}_1) - \sum_k \lambda_{\ell k_2} \psi_{k_2}(\vec{r}_1) = 0 \quad . \end{aligned} \quad (46)$$

Multiplicando la Ec. (46) por $\psi_k^*(\vec{r}_1)$ e integrando sobre \vec{r}_1 queda la ecuación matricial

$$\langle \psi_k | T_1 | \psi_{\ell} \rangle + \sum_k \langle \psi_k \psi_{k_2} | V_{12} | \psi_{\ell} \psi_{k_2} - \psi_{k_2} \psi_{\ell} \rangle \equiv \langle \psi_k | H_{01} | \psi_{\ell} \rangle = \lambda_{\ell k} \quad . \quad (47)$$

donde es fácil comprobar que el operador H_{01} es un hamiltoniano de una sola partícula, actuando sobre la partícula # 1, proveniente del hamiltoniano total (39),

$$\begin{aligned} H = H_0 + V \quad , \\ H_0 \equiv \sum_{i=1}^N H_{0i} \equiv \sum_{i=1}^N (T_i + U_i); \quad V \equiv \sum_{i < j}^N v_{ij} - \sum_{i=1}^N U_i \quad , \quad (48) \end{aligned}$$

que ahora está compuesto de un hamiltoniano de partícula independiente H_0 más una interacción residual V . En el hamiltoniano independiente correspondiente a la i -ésima partícula,

$$H_{0i} = T_i + U_i \quad , \quad (49)$$

aparece ahora un campo medio U_i agregado a los campos antes existentes en el operador T_i , que por la Ec. (47) está definido en términos de la interacción V_{12} original por

$$\langle \psi_k | U_1 | \psi_\ell \rangle = \sum_{k_2} \langle \psi_k \psi_{k_2} | v_{12} | \psi_\ell \psi_{k_2} - \psi_{k_2} \psi_\ell \rangle, \quad (50)$$

es decir, en forma llamada autoconsistente. Tomando N combinaciones lineales, digamos ϕ_k , de las N orbitales originales $\{\psi_\ell | \ell = 1, 2, \dots, N\}$ de tal manera que queda diagonalizada la matriz (47), es decir, $\lambda_{\ell\lambda} \rightarrow \epsilon_k \delta_{k\ell}$, nos transformará el problema en

$$\langle \phi_k | H_{01} | \phi_\ell \rangle = \epsilon_k \delta_{k\ell}. \quad (51)$$

Suponiendo que las N nuevas ϕ_k son parte de un conjunto (infinito) completo, de modo que $\sum |\phi_k\rangle \langle \phi_k| = 1$, la Ec. (51) se vuelve, al multiplicarse por $|\phi_k\rangle$ y sumarse sobre k:

$$\begin{aligned} T_1 \phi_{k_1}(\vec{r}_1) + \left[\sum_{k_2} \int d^3 r_2 \phi_{k_2}^*(\vec{r}_2) v_{12} \phi_{k_2}(\vec{r}_2) \right] \phi_{k_1}(\vec{r}_1) \\ - \sum_{k_2} \int d^3 r_2 \phi_{k_2}^*(\vec{r}_2) v_{12} \phi_{k_1}(\vec{r}_2) \phi_{k_2}(\vec{r}_1) = \epsilon_{k_1} \phi_{k_1}(\vec{r}_1), \end{aligned} \quad (52)$$

que representa N ecuaciones ($k_1, k_2 = 1, 2, \dots, N$) no lineales acopladas integro-diferenciales de eigenvalores de partícula independiente. Estas son las ecuaciones de Hartree-Fock (HF). Para cada eigenestado k_1 se trata pues de una ecuación tipo Schrödinger de una partícula (la # 1) que se encuentra en el campo (medio) producido por todas las demás partículas. Por ejemplo, el primer corchete es la contribución directa a este campo; el último término del miembro izquierdo es la llamada contribución de intercambio pero su interpretación deja de ser heurística.

Finalmente, la energía de Hartree-Fock (el valor esperado (42)) calculado con las orbitales de HF $\phi_k(\vec{r})$ que satisfacen la Ec. (52) será, recordando la Ec. (39),

$$E = \langle \phi_0 | H | \phi_0 \rangle \equiv \langle H \rangle \equiv \langle T \rangle + \langle v \rangle. \quad (53)$$

Ahora, de la Ec. (48)

$$E = \langle H \rangle = \langle T \rangle + \frac{1}{2} \langle U \rangle, \quad (54)$$

donde usamos el resultado, que sigue de la Ec. (50) (con $k = \ell$ y sumando sobre k) y de la Ec. (42) (si reconocemos que $\sum_{k_1 < k_2}^N = \frac{1}{2} \sum_{k_1, k_2}^N$), de que la autoconsistencia exige que

$$\langle U \rangle = 2 \langle v \rangle \quad . \quad (55)$$

Luego, como $\langle H_0 \rangle = \langle T \rangle + \langle U \rangle$ de la Ec. (48), podemos escribir la Ec. (54) alternativamente como

$$E = \frac{1}{2} \langle T \rangle + \frac{1}{2} \langle H_0 \rangle = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N (\langle \phi_k | T_1 | \phi_k \rangle + \epsilon_k) \quad , \quad (56)$$

donde en el último paso usamos la Ec. (52) con $k = \ell$ y sumada sobre k .

i) Soluciones de HF triviales

Mostremos que para un sistema de N fermiones encerrados en una caja de volumen V , e interactuando entre sí a través de cualquier potencial del tipo $v_{12} \equiv v(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ (no necesariamente central) las ondas planas

$$\phi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (57)$$

proporcionan una solución (trivial) a las ecuaciones de HF (52). Primero notamos que en la Ec. (52) $T_1 \phi_{\vec{k}_1}(\vec{r}_1) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\vec{r}_1}^2 \phi_{\vec{k}_1}(\vec{r}_1) = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} \phi_{\vec{k}_1}(\vec{r}_1)$.

El término directo de la Ec. (52) será, además

$$\frac{1}{V} \sum_{k_2} \int d^3 r_2 e^{-i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2} v_{12} e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2} \phi_{\vec{k}_1}(\vec{r}_1) \equiv \frac{N}{V} v(0) \phi_{\vec{k}_1}(\vec{r}_1) \quad , \quad (58)$$

$$v(q) \equiv \int d^3 r e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} v(\vec{r}) \quad , \quad (59)$$

donde hemos definido la transformada de Fourier $v(\vec{q})$ de la interacción $v(\vec{r})$, siendo $\vec{r} \equiv \vec{r}_1 - \vec{r}_2$. Por otro lado, el término de intercambio de la Ec. (52) se vuelve, multiplicando por $e^{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1} e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1} \equiv 1$,

$$\begin{aligned}
& \sum_{\vec{k}_2} \int d^3 r_2 \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2} v_{12} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_2} \phi_{\vec{k}_2}(\vec{r}_1) e^{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1} e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1} = \\
& = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}_2} \int d^3 r_2 e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} v(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \phi_{\vec{k}_1}(\vec{r}_1) \quad (60) \\
& \equiv \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}_2} v(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \phi_{\vec{k}_1}(\vec{r}_1) \quad ,
\end{aligned}$$

donde en el último paso hemos interpretado $\int d^3 r_2$ como $\int d^3 r$ y usando la Ec. (59). Como todos los términos del miembro izquierdo de la Ec. (52), con las soluciones (57), equivalen a un número de veces la solución $\phi_{\vec{k}_1}(\vec{r}_1)$, se satisface la Ec. (52). Q.E.D. En el presente caso este número es

$$\epsilon_{\vec{k}_1} = \hbar^2 k_1^2 / 2m + \frac{N}{V} v(0) - \frac{1}{V} \sum v(\vec{k}_1 - \vec{k}) \quad . \quad (61)$$

ii) Soluciones HF no-triviales

Como mera ilustración de la posibilidad de soluciones no-triviales, es decir, no onda plana, analicemos el siguiente ejemplo muy sencillo de un crystal-líquido. Supóngase, como generalización de las orbitales de onda plana (57), las orbitales⁽⁵⁾

$$\phi_{\vec{k}}(\vec{r}) \equiv \phi_{\vec{k}\sigma}(\vec{r}, \sigma_z) \equiv C e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \left[1 + \alpha e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \right] \chi_{\sigma}(\sigma_z) \quad (62)$$

que ocuparán el determinante

$$\Phi_0 = (N!)^{-\frac{1}{2}} \det [\phi_{\vec{k}}(\vec{r})], \quad k < k_F, \quad q \geq 2k_F, \quad (63)$$

y que siguen obedeciendo la ortogonalidad (41), la que tomando en cuenta el espín se escribe

$$\sum_{\sigma_z} \int_V d^3 r \phi_{\vec{k}}^*(\vec{r}) \phi_{\vec{k}'}(\vec{r}) = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \quad , \quad (64)$$

$$C = [(1 + \alpha^2)V]^{-\frac{1}{2}} \quad (65)$$

En la Ec. (62) $\chi_C(\sigma_z)$ es una función de espín con variable $\sigma_z = \pm \frac{1}{2}$ y estado $\sigma = \pm \frac{1}{2}$. Aquí α y q serán parámetros variacionales adicionales al parámetro k_F (que por la Ec. (14) está relacionado a la densidad $n_0 \equiv N/V$ de partículas). Empleando condiciones periódicas para las orbitales (62) tendremos integrales del tipo

$$\int_V d^3r e^{i\vec{Q} \cdot \vec{r}} \xrightarrow{V \rightarrow \infty} V \delta_{\vec{Q}, 0} \quad ,$$

donde

$$Q_x = \frac{2\pi}{L} n_x \quad , \quad n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \dots ; \quad Q_y = \text{etc.}$$

Definiremos lo que podríamos llamar la densidad local (a diferencia de la global $n_0 \equiv \frac{N}{V}$), en el punto \vec{r} ,

$$n(\vec{r}) \equiv \sum_k |\phi_k(\vec{r})|^2 = v C^2 \sum_k |1 + \alpha e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}|^2 \quad , \quad (67)$$

donde se emplea la Ec. (62) y el hecho de que $\sum_{\sigma} \langle \chi_{\sigma} | \chi_{\sigma} \rangle = \sum_{\sigma} 1 = v$. El sumando es independiente del índice de suma y la suma sobre \vec{k} da N/v ; por lo tanto

$$n(\vec{r}) = n_0 \left\{ 1 + \frac{2\alpha}{1 + \alpha^2} \cos \vec{q} \cdot \vec{r} \right\} \quad , \quad (68)$$

es decir, la densidad local tiene una variación cosenoidal en una dirección del espacio (la que se elige para el vector \vec{q}) para la solución no-trivial (62), en contraste con el caso especialmente homogéneo $n(\vec{r}) = n_0$ que tenemos para la solución trivial (57), a la que se reduce la (67) cuando $\alpha \rightarrow 0$.

La Fig. 2 contrasta estos dos casos que podríamos identificar como un "líquido" (desorden posicional completo) y con un "cristal-líquido", la llamada fase *sméctica-A* (ordenado en "láminas", paralelas entre sí y perpendiculares al vector \vec{q} , cada una de las cuales se comporta como un líquido bi-dimensional) (ver Fig. 3). Para analizar la transición del

"líquido" al "cristal-líquido" basta considerar un hamiltoniano (39) independiente del espín para el cual la energía de HF, llamado $|\vec{k}\sigma\rangle$ a la Ec. (62), será, de las Ecs. (4) y (6),

$$E = \langle \Phi_0 | H | \Phi_0 \rangle = \sum_{\vec{k}} v \langle \vec{k} | -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 | \vec{k} \rangle + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \left\{ v^2 \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | v_{12} | \vec{k}_1 \vec{k}_2 \rangle - v \langle \vec{k}_1 \vec{k}_2 | v_{12} | \vec{k}_2 \vec{k}_1 \rangle \right\} \quad (69)$$

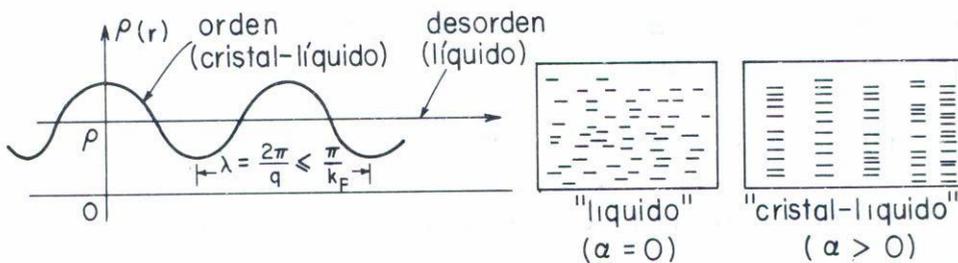


Fig. 2

donde usamos las sumas sobre espines antes vistas. Tomemos para la interacción la tipo delta

$$v_{12} \equiv v_0 \delta(\vec{r}), \quad v_0 = \text{cte}, \quad \vec{r} \equiv \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \quad (70)$$

con la que la Ec. (69) se reducirá a la energía por partícula adimensional, con $\beta \equiv \alpha^2$, $\tilde{q} \equiv q/2k_F \geq 1$ y $v = 2$,

$$\epsilon(\tilde{q}, \beta) \equiv \frac{2mE}{\hbar^2 k_F^2 N} = \frac{3}{5} \left\{ 1 + \frac{20}{3} \frac{\beta}{1+\beta} \tilde{q}^2 \right\} + \frac{3}{4} \frac{mv_0^0}{\hbar^2 k_F^2} \left[1 + \frac{2\beta}{(1+\beta)^2} \right]. \quad (71)$$

si $\alpha \rightarrow 0$, $\beta \rightarrow 0$ y caemos en el caso trivial de ondas planas (OP) que es

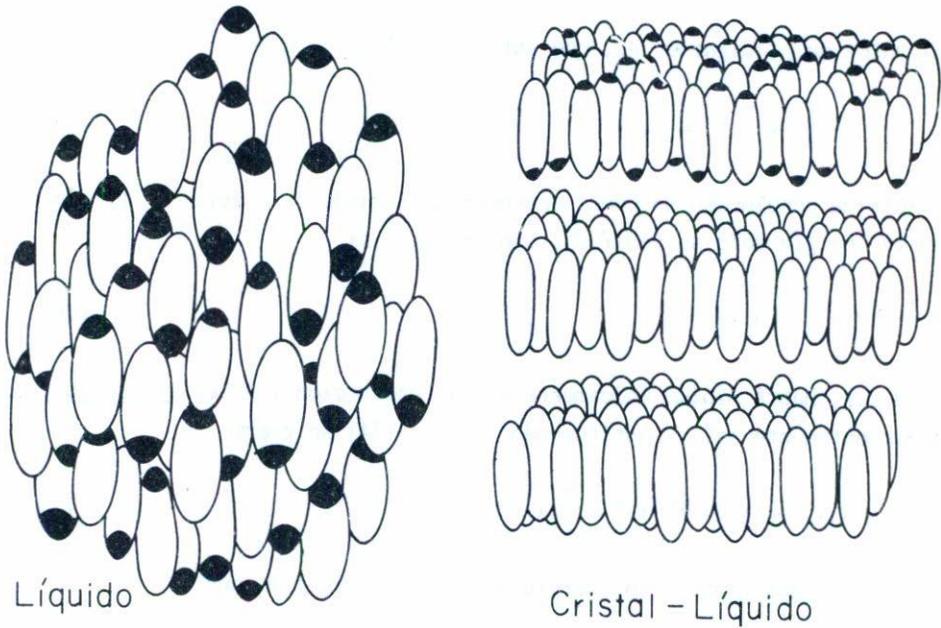


Fig. 3

$$\epsilon_{op} = \frac{3}{5} + \frac{3}{4} \frac{mv_0\rho}{\hbar^2 k_F^2} \quad (72)$$

Debemos ahora minimizar la Ec. (71) con respecto a $\tilde{q} \geq 1$ y $\beta \geq 0$, y preguntar luego si existe una energía menor que la trivial dada por la Ec. (72). Es evidente por inspección de la Ec. (71) que el mínimo en \tilde{q} ocurre precisamente para $\tilde{q} = 1$, o sea $q = 2k_F$. Introduciendo el parámetro de acoplamiento adimensional,

$$\lambda \equiv \frac{3}{4} \frac{mv_0\rho}{\hbar^2 k_F^2} \equiv \frac{mk_F v_0}{4\pi^2 \hbar^2} \quad (73)$$

donde se usó la Ec. (14) con $v = 2$ en el último paso, la Ec. (71) con $\tilde{q} = 1$ se reduce a

$$\varepsilon(\beta) = \frac{3}{5} + 4 \frac{\beta}{1+\beta} + \lambda \left[1 + \frac{\beta}{(1+\beta)^2} \right] \xrightarrow{\beta \rightarrow 0} \frac{3}{5} + \lambda \equiv \varepsilon_{OP}(\lambda) \quad . \quad (74)$$

El valor de β , digamos β_0 , que satisface $\varepsilon'(\beta_0) = 0$ es

$$\beta_0 = \frac{\lambda+2}{\lambda-2} \geq 0 \Rightarrow \lambda \leq -2, \quad \lambda > 2 \quad . \quad (75)$$

La última conclusión se puede entender graficando β_0 contra λ . El mínimo en la energía sólo se verifica, sin embargo, si

$$\varepsilon''(\beta_0) > 0 \Rightarrow \lambda \leq -2 \quad . \quad (76)$$

Es decir, habrá mínimo únicamente si la interacción (70) es atractiva y lo suficientemente así. Sustituyendo (75) en (74) se tiene

$$\varepsilon(\beta_0) \equiv \varepsilon(\lambda) = \frac{13}{5} + \frac{2}{\lambda} + \frac{3}{2} \lambda \quad , \quad (77)$$

y buscamos una ganancia en energía de amarre, es decir, que

$$\Delta\varepsilon \equiv \varepsilon(\lambda) - \varepsilon_{OP}(\lambda) = 2 + \frac{2}{\lambda} + \frac{1}{2} \lambda \leq 0 \quad , \quad (78)$$

para $\lambda \leq -2$. La Fig. 4 muestra la curva de la Ec. (78): vemos que efectivamente, para $\lambda \leq -2$ la solución no trivial es más estable (tiene menor energía) que la trivial, (curva llena). La curva en trazos corresponde por la (75) a valores negativos de $\beta_0 \equiv \alpha_0^2$ que no se admiten si α_0 es real. El punto indicado con un círculo en $\lambda = -2$ es un punto de bifurcación donde equivalen las energías de los dos estados, y puede considerarse el punto de la transición. El "parámetro de orden", el factor

$$\frac{2\alpha_0}{(1+\alpha_0^2)} \equiv \frac{2\sqrt{\beta_0}}{(1+\beta_0)}$$

en la Ec. (67) vale cero en el punto de bifurcación, y crece en valor con-

forme disminuye λ a partir del valor crítico -2 . La transición líquido a cristal-líquido es de segundo orden ya que el parámetro de orden aumenta continuamente a partir de cero (Fig. 4).

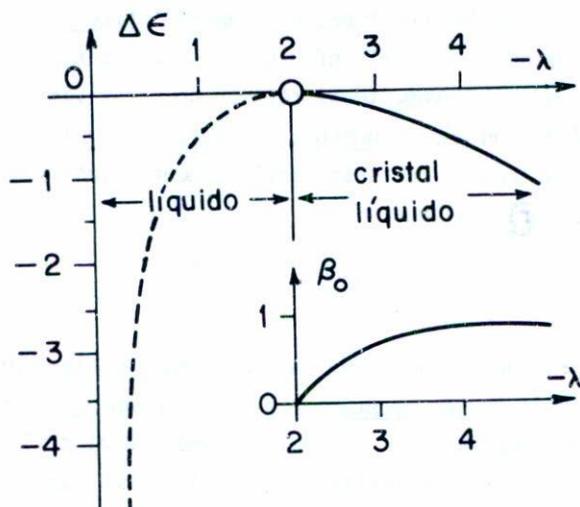


Fig. 4

Finalmente hacemos notar la naturaleza no perturbativa de nuestro resultado. Es decir, la diferencia $\Delta\epsilon$ de la energía (78) no es analítica en λ alrededor de $\lambda = 0$ sino que tiene un polo simple allí.

6. APROXIMACION DE THOMAS FERMI

De gran interés es la vieja (1927) teoría de Thomas y de Fermi (TF) para la descripción de sistemas coulombianos (átomos, moléculas, sólidos, etc.) por su sencillez frente a la teoría de Hartree-Fock. En esta última se trabaja con N orbitales funciones de \vec{r} , mientras que en la teoría de TF hay una sola función, la densidad local $n(\vec{r})$. Además, mientras

que en la teoría de HF un conjunto de orbitales solución no necesariamente minimizan la energía (y aun si la minimizan éste no es necesariamente el mínimo más bajo), en la teoría de TF el extremal es siempre el mínimo absoluto. El interés en la teoría TF ha aumentado enormemente en los últimos 10 años pues esta descripción resulta ser asintóticamente exacta en el límite en que el número de cargas $Z \rightarrow \infty$, para átomos, moléculas y sólidos. (También es así para estrellas en el límite en que el número de partículas, que en el fondo interactúan con fuerzas puramente atractivas -tipo coulombianas- gravitatorias, tiende al infinito). La exactitud de la que se habla aquí se refiere exclusivamente al régimen no relativista.

Considérese un núcleo puntual con carga Ze , colocado en el origen, rodeado por una nube electrónica esféricamente simétrica con densidad de carga negativa $n(r)$, tal que

$$\int d^3r n(r) = N \quad (79)$$

será el número total de cargas $-e$ en la nube. Si $N=Z$ se trata de un átomo neutro; si $N>Z$ de un ión negativo y si $N<Z$ de un ión positivo. La energía total ϵ se compone por: i) energía cinética electrónica T ; ii) energía potencial núcleo-electrón V_{ne} ; y iii) energía de repulsión electrón-electrón V_{ee} . Evidentemente, ésta será una funcional de $n(r)$ y de la forma

$$E[n(r)] = T + V_{ne} + V_{ee} \quad , \quad (80)$$

donde

$$\begin{aligned} V_{ne} &\equiv -e \int d^3r \phi_n(r) n(r) ; & \phi_n(r) &\equiv Ze/r \quad , \\ V_{ee} &\equiv -\frac{1}{2} e \int d^3r \phi_e(r) n(r) ; & \phi_e(r) &\equiv -e \int d^3r' \frac{n(r')}{|r-r'|} \\ T &\equiv \int d^3r n(r) t(r) . \end{aligned}$$

Aquí, $\phi_n(r)$ es el potencial electrostático en el punto r debido al núcleo puntual en el origen y $\phi_e(r)$ el debido a la nube electrónica. Además,

$t(r)$ es por definición la energía cinética (electrónica) en el punto r , por electrón. Thomas y Fermi ahora suponen como hipótesis de trabajo que

$$t(r) = C_2 n(r)^{2/3}, \quad C_2 \equiv \frac{3\hbar^2}{10m} (3\pi^2)^{2/3}, \quad (81)$$

en analogía al resultado (18) obtenido para un gas ideal de fermiones con $\nu = 2$ en tres dimensiones. Admitido esto, la energía total (80) se vuelve la funcional explícita en $n(r)$ dada por

$$E[n(r)] = C_2 \int d^3r n(r)^{5/3} - Ze^2 \int d^3r \frac{n(r)}{r} + \\ + \frac{1}{2} e^2 \int d^3r \int d^3r' \frac{n(r)n(r')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad T + V \quad . \quad (82)$$

Se busca ahora una ecuación (de Euler-Lagrange) en $n(r)$ tal que $E[n(r)]$ sea (por lo menos) estacionaria, o extremal, ante variaciones funcionales en $n(r)$, sujeta la variación a la condición (79) donde N es una constante. (Esta extremal resulta ser siempre el mínimo absoluto). Es decir, introduciendo el multiplicador de Lagrange $e\phi_0$, tenemos

$$\frac{\delta}{\delta n(r'')} \left\{ E[n(r)] - e\phi_0 \int d^3r n(r) \right\} = 0 \quad . \quad (83)$$

Para calcular la expresión (83) usamos, en analogía a la Ec. (44), que

$$\frac{\delta}{\delta n(r'')} n(r) = \delta(\vec{r} - \vec{r}'') \quad \text{y por consiguiente queda la ecuación}$$

$$\frac{5}{3} C_2 n(r'')^{2/3} - \frac{Ze^2}{r''} + e^2 \int d^3r' \frac{n(r')}{|\vec{r}'' - \vec{r}'|} + e\phi_0 = 0 \quad .$$

Notando que el segundo y tercer término no son más que $-e\phi_n(r'')$ y $-e\phi_e(r'')$, respectivamente, definiendo el potencial total

$$\phi(r) \equiv \phi_n(r) + \phi_e(r) \quad , \quad (84)$$

y cambiando la variable r'' a r tenemos

$$n(r) = \frac{1}{3\pi^2 \hbar^3} \left[2m e \left\{ \phi(r) - \phi_0 \right\} \right]^{3/2} . \quad (85)$$

A esta ecuación añadiremos una segunda ecuación que eslabona $\phi(r)$ con $n(r)$ que es la ecuación de Poisson de la electrostática clásica:

$$\nabla^2 \phi(r) = 4\pi e n(r) \quad (r \neq 0) . \quad (86)$$

Combinando ahora las Ecs. (85) y (86), reconociendo que por la simetría esférica y la constancia de ϕ_0 se tiene que $\nabla^2 \phi(r) = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r[\phi(r) - \phi_0]$, llegamos a la ecuación de Thomas-Fermi para el potencial total $\phi(r)$

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r[\phi(r) - \phi_0] = \frac{4e(2me)^{3/2}}{3\pi \hbar^3} [\phi(r) - \phi_0]^{3/2} , \quad (87)$$

que claramente es una ecuación diferencial no-lineal. Requeriremos dos condiciones a la frontera que serán:

$$i) \quad \phi(r) - \phi_0 \xrightarrow{r \rightarrow 0} Ze/r , \quad (88)$$

$$ii) \quad \phi(r) = (Z - N)e/r \quad (\text{para } r \geq r_0) . \quad (89)$$

La condición (i) implica, por la Ec. (85), que

$$n(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} \frac{\text{cte}}{r^{3/2}} , \quad (90)$$

es decir, la densidad de carga electrónica diverge en el origen. En la (ii) hemos definido un radio r_0 a partir del cual la densidad de la nube se anula, de modo que el potencial total $\phi(r)$ es la diferencia indicada, gracias al teorema de Newton de que el efecto de la nube es como si toda su carga se colocase en el origen. Así, por las Ecs. (85) y (89) podemos deducir el significado de

$$\phi_0 = \phi(r_0) = (Z - N)e/r_0 , \quad (91)$$

como el potencial total en el "borde" de la nube electrónica.

Observamos que la ecuación fundamental (87) es un tanto incómoda pues tendría que resolverse para cada valor de la pareja de enteros positivos (N, Z) . Puede deducirse una ecuación universal que no adolece de esta gran desventaja. Introduciendo una longitud (por averiguarse) α tal que $x \equiv r/\alpha$ es adimensional, y una función adimensional $f(x)$ por la ecuación

$$\phi(r) - \phi_0 \equiv \frac{Ze}{r} f(x) \quad , \quad x \equiv r/\alpha \quad , \quad (92)$$

y sustituyendo en la Ec. (87) llegamos a

$$\sqrt{x} \frac{d^2 f(x)}{dx^2} = f^{3/2}(x) \quad ,$$

$$\text{i) } f(x) \xrightarrow{x \rightarrow 0} 1, \quad \text{ii) } f(x) \xrightarrow{x \geq x_0} 0, \quad (93)$$

$$\alpha \equiv \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi}{4} \right)^{2/3} \frac{a_0}{Z^{1/3}} \quad , \quad a_0 \equiv \hbar^2 / m e^2 \quad ,$$

que es la ecuación universal de la teoría de Thomas-Fermi. Fue una de las primeras ecuaciones resueltas con computadora electrónica digital en 1931 por Bush y Caldwell.

La Fig. 5 muestra tres tipos de solución numérica: A) en que $r_0 = \infty$ (átomos neutros); B) en que $r_0 < \infty$ (iones positivos, $Z > N$), es decir la nube tiene "soporte compacto"; y C) soluciones apropiadas para la descripción de un átomo ligado en un cristal. De la solución numérica se ha averiguado que, para $N = Z$,

$$f(x) \xrightarrow{x \ll 1} 1 - 1.58807x + \frac{4}{3}x^{3/2} + \dots \quad ,$$

$$\xrightarrow{x \gg 1} \frac{144}{x^3} + \dots \quad . \quad (94)$$

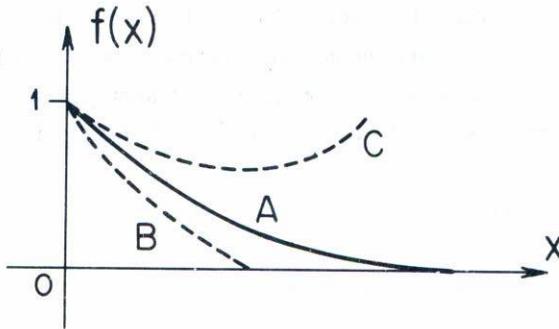


Fig. 5

Antes de calcular la energía total de Thomas-Fermi E , en función de Z , para átomos neutros, estimamos que ésta será de la forma

$-Z \cdot Z/Z^{-1/3} = -Z^{7/3}$ ya que tenemos Z electrones interactuando con Z cargas positivas nucleares, a distancias $\sim Z^{-1/3}$ por la Ec. (93). La energía por electrón E/Z , entonces, diverge a menos infinito como $-Z^{4/3}$ para $Z \rightarrow \infty$, es decir, no existe para el átomo neutro el límite termodinámico, consistente en una energía extensiva, es decir, proporcional al número de partículas, como se espera en la materia condensada (líquidos, sólidos, etc.). Ocurre lo semejante para un sistema de N fermiones idénticos que interactúan por gravedad, por ejemplo una estrella, donde la energía total diverge como $-N^{7/3}$, véase la Ec. (38). Para calcular $E(Z)$ en forma precisa usaremos el siguiente resultado formidable: El teorema del virial para un átomo poli-electrónico afirma que

$$E \equiv \langle T \rangle + \langle V \rangle = -2 \langle T \rangle \quad , \quad (95)$$

donde E es la energía exacta (no relativista) del estado fundamental y los valores esperados del operador de energía cinética T y de la energía potencial V se toman con la función de onda exacta (desconocida) del estado fundamental. Este resultado, válido para la energía y estado fundamental exactos, también es válido en la aproximación de Thomas-Fermi. Esto se de-

muestra si en la Ec. (79) reemplazamos las coordenadas (cartesianas) (x, y, z) por $(\lambda x, \lambda y, \lambda z) \equiv (\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$ con λ real. Entonces

$$N = \int \lambda^3 d^3r n(\lambda r) = \int d^3\bar{r} n(\bar{r}) \quad , \quad (96)$$

es decir, frente al citado escalamiento

$$n(r) \longrightarrow \lambda^3 n(\lambda r) \quad (97)$$

Luego, la Ec. (72) se vuelve

$$\begin{aligned} E[\lambda^3 n(\lambda r)] &= C_2 \lambda^2 \int d^3r \lambda^3 n(\lambda r)^{5/3} \\ &- e^2 Z \lambda \int d^3r \frac{\lambda^3 n(\lambda r)}{\lambda r} + \frac{e^2}{2} \lambda \int d^3r \int d^3r' \lambda^6 \frac{n(\lambda r) n(\lambda r')}{|\lambda \vec{r} - \lambda \vec{r}'|} \equiv \lambda^2 \bar{T} + \lambda \bar{V} \quad , \end{aligned} \quad (98)$$

donde \bar{T} y \bar{V} son la energía cinética y potencial promedio definidas en la Ec. (82), tomando en cuenta que allí \vec{r} y \vec{r}' son variables mudas. Derivando la Ec. (97) con respecto a λ y exigiendo que para $\lambda = 1$ la derivada se anule, se llega a

$$\begin{aligned} 2\bar{T} + \bar{V} &= 0 \quad , \\ E \equiv \bar{T} + \bar{V} &= -2\bar{T} = \frac{1}{2} \bar{V} \end{aligned} \quad (99)$$

que coincide con el resultado exacto (95). Por tanto si D y F son constantes, la energía total en la aproximación de Thomas-Fermi podrá expresarse como

$$\begin{aligned} E &= -2 C_2 \int d^3r n(r)^{5/3} \\ &= -D \int d^3r \phi^{5/2}(r) \\ &= -F \int_0^\infty dx \frac{f^{5/2}(x)}{x^{1/2}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{5}{7} F f'(0) & (100) \\
 &= -0.768745 Z^{7/3} \frac{e^2}{a_0} ,
 \end{aligned}$$

donde en la segunda igualdad especializamos al caso neutro ($N = Z$, $\phi_0 = 0$) y usamos la Ec. (75). En la penúltima igualdad se usó el valor numérico de la $f'(0)$ de la Ec. (94), habiendo llegado a esa igualdad por las siguientes consideraciones. La integral

$$I \equiv \int_0^\infty dx \frac{f^{5/2}(x)}{x^{1/2}} = \int_0^\infty dx f f''$$

por la Ec. (93). Integrando por partes

$$\begin{aligned}
 I &= f f' \Big|_0^\infty - \int dx (f')^2 \\
 &= -f'(0) - \int dx (f')^2
 \end{aligned} \tag{101}$$

Por otro lado, también

$$I \equiv \int_0^\infty \frac{dx}{x^{1/2}} f^{5/2} = 2f^{5/2}(x) x^{1/2} \Big|_0^\infty - 5 \int_0^\infty dx x^{1/2} f^{3/2} f'$$

Suponiendo que el término integrado se anula esto da, usando de nuevo la Ec. (93),

$$\begin{aligned}
 I &= -5 \int x \cdot f' f'' dx \equiv -5 \int u dv \\
 &= \frac{5}{2} \int dx (f')^2 .
 \end{aligned} \tag{102}$$

Combinando ahora las Ecs. (101) y (102) queda $I = -\frac{5}{7} f'(0)$, Q.E.D.

El resultado para la energía de un átomo neutro de Thomas-Fermi (100) es de suma importancia dado que Lieb & Simon⁽⁶⁾ demostraron que resulta exacta en el límite $Z \rightarrow \infty$. Es decir, coincide con el resultado de la mecánica cuántica no relativista en ese límite, o sea, con el estado fundamental de la ecuación de Schrödinger. Además, se conjetura que la (100) es

el término dominante de una serie asintótica en potencias descendientes, empezando con 7, 6, 6, ..., de $Z^{1/3}$. Una deducción heurística de esta serie, a veces llamada de Thomas-Fermi-Scott y Schwinger (TFSS), proviene de despreciar la repulsión electrón-electrón en el átomo con electrones y Z cargas nucleares positivas. Por la fórmula de Bohr para un átomo hidrogenoide la energía total será (en unidades de e^2/a_0)

$$E(Z) = \sum_{n=1}^N 2n^2 \cdot \left(-\frac{Z^2}{2n^2} \right) \equiv -Z^2 N \quad , \quad (103)$$

donde $2n^2$ es la degeneración de la n -ésima capa atómica y hay, digamos, N capas totalmente llenas. Por esto último también tendremos la relación

$$Z = \sum_{n=1}^N 2n^2 = \frac{1}{3} N(N+1)(2N+1) \equiv \frac{2}{3} N^3 + N^2 + \frac{1}{3} N \quad . \quad (104)$$

Por desarrollo binomial

$$Z^{-1/3} \underset{N \gg 1}{\sim} \left(\frac{3}{Z} \right)^{1/3} \frac{1}{N} \left[1 - \frac{1}{2N} + \frac{1}{3N} - \dots \right] \quad (105)$$

y, si invertimos la serie tenemos

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} &\underset{Z \gg 1}{\sim} \frac{a_1}{Z^{1/3}} \left[1 + \frac{a_2}{Z^{1/3}} + \frac{a_3}{Z^{2/3}} + \dots \right] \quad , \\ N &\underset{Z \gg 1}{\sim} \frac{Z^{1/3}}{a_1} \left[1 + \frac{\alpha}{Z^{1/3}} + \frac{\beta}{Z^{2/3}} + \dots \right] \quad , \end{aligned} \quad (106)$$

donde $a_1, a_2, a_3 \dots$ y α, β, \dots son constantes determinables a partir de la Ec. (105). Sustituyendo en la Ec. (103) queda finalmente

$$E(Z) \underset{Z \gg 1}{\sim} -1.1447 Z^{7/3} + \frac{1}{2} Z^2 - 0.0728 Z^{5/3} + \dots \quad . \quad (107)$$

Este resultado heurístico es semejante al correcto, que sí toma en cuenta las repulsiones electrón-electrón (serie TFSS)

$$E(Z)_{Z \gg 1} = -0.768745 Z^{7/3} + \frac{1}{2} Z^2 - 0.2699 Z^{5/3} + \dots \quad (108)$$

obtenido por Plindov & Dimitrieva⁽⁷⁾ y por Schwinger⁽⁸⁾. La Fig. 6 compara el resultado de esta serie con las energías empíricas de los átomos neutros (tomadas como las de HF para $Z > 17$, donde el error con las energías de Schrödinger sería despreciable a la escala de la gráfica). El error máximo es $\sim 7\%$ y ocurre para la Z menores⁽⁹⁾.

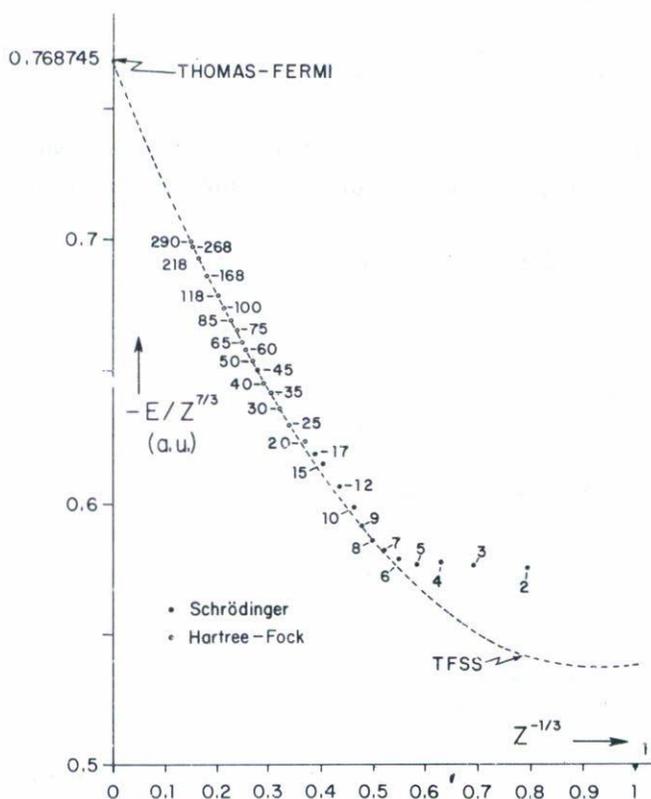


Fig. 6.

Entre los defectos principales de la teoría de Thomas-Fermi es que predice que un cúmulo de átomos no puede ligarse entre sí para formar una molécula -teorema de Teller^(10,11). Esto por supuesto es contrario a la realidad física.

7. CONCLUSIONES

Hemos visto a lo largo de esta monografía que el concepto elemental del "campo medio" en la física cuántica de muchos cuerpos es lo suficientemente rico como para ilustrar la estabilidad estelar, las transiciones de fase y las energías de amarre de los átomos neutros.

La estabilidad de estrellas enanas y neutrónicas quedó establecida por el equilibrio entre las atracciones gravitatorias y la presión de un gas ideal de Fermi, de los electrones en el primer caso y los neutrones en el segundo. Vimos además que esta presión no es capaz de impedir el colapso gravitacional, por ejemplo, en un agujero negro, que sería inevitable si hubiese suficiente masa en la estrella.

La aproximación de Hartree-Fock se planteó para sistemas termodinámicos (es decir, con un número muy grande de partículas) y se ilustró la posibilidad de soluciones no triviales que describen fases ordenadas. Vimos la existencia de transiciones de fase como puntos de bifurcación en la energía, ilustrado a través del ejemplo del cristal-líquido. La transición más comúnmente conocida no lo es en la densidad, como en nuestro ejemplo, sino en la temperatura. No se excluye, sin embargo, la posibilidad de "cristales-líquidos cuánticos" con transiciones en el estado fundamental, es decir, a temperatura absoluta cero.

Finalmente dedujimos la aproximación de Thomas-Fermi, en la que se maneja una sola función, la densidad local, en vez de N funciones como en la teoría de Hartree-Fock.

REFERENCIAS

1. D.M. Ceperley, & M.H. Kalos, en "Topics in Current Physics", Vol. 7: *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, ed. por K. Binder (Springer-Verlag, 1979).
2. McQuarrie (1976).
3. L.D. Landau, & E.W. Lifshitz, *Statistical Physics*, (Pergamon, 1958) p. 334.
4. P.H. Hertel, H. Narnhofer & W. Thirring, *Commun. Math. Phys.* 28 (1972) 159.
5. M. de Llano, & A. Plastino, *Phys. Rev.*, A13 (1976) 1633.
6. E.H. Lieb & B. Simon, *Phys. Rev. Lett.*, 31 (1973) 681; *Adv. Math.*, 23 (1977) 22.
7. G.I. Plindov & I.K. Dmitrieva, *Phys. Lett.*, 64A (1978) 348.

8. J. Schwinger, *Phys. Rev.* A22 (1980) 1827 24 (1981) 2353.
9. V.C. Aguilera-Navarro, M. de Llano, O. Rojo & S.L.L. Verardi, *J. Chem. Phys.*, 77 (1982) 6131.
10. E. Teller, *Rev. Mod. Phys.*, 34 (1962) 627.
11. N. Balazs, *Phys. Rev.*, 156 (1967) 42.