Investigación *Revista Mexicana de Física* **33** *No. 2(1987) 194–199*

Un teorema sobre el modelo de jalea deformable a temperatura finita

A. Cabrera y A. Calles

Departamento de Física, Facultad de Ciencias,
Universidad Nacional Autónoma de México, Apdo. Postal 70–646,
04510 México, D.F.

(recibido el 18 de septiembre de 1986; aceptado el 29 de mayo de 1987)

Resumen. Dado un gas de fermiones sumergido en un fondo que "neutraliza" al sistema, se calcula la energía en función de la temperatura usando promedios estadísticos. Se optimiza la energía para obtener las condiciones que debe de satisfacer la distribución de "carga" del fondo, dando lugar así a la generalización para temperatura distinta de cero, de un teorema que se demostró para el modelo de jalea deformable a temperatura cero

Abstract. In a Fermion system immersed in a background such that the total charge is zero, it is calculated the energy as a function of the Temperature using statistical averages. The energy is optimized in order to obtain the conditions the background distribution must satisfy. In this way we are generalizing a theorem at finite temperature, which was demonstrated at zero temperature in a previous paper.

PACS: 05.30.-d; 71.20.+c

1. Introducción

En un artículo anterior [1] se propuso y demostró un teorema sobre el modelo de jalea deformada para gases de partículas. Este teorema consistía en la condición necesaria que debería de satisfacer la distribución del fondo de un gas de partículas para que la energía del sistema fuera un extremo (mínimo en este caso). El teorema fue enunciado y demostrado en el esquema de Schrödinger con la intención de utilizarlo para hacer cálculos de energía para el gas de electrones a temperatura cero dentro de la aproximación de Hartree-Fock. En virtud del interés de hacer cálculos de diversas propiedades en el modelo de jalea deformable a temperatura finita es necesario generalizar el teorema, pues existiendo el equivalente a $T \neq 0$ muchos cálculos siguen reduciéndose al igual que el caso a $T = 0$.

2. El teorema a temperatura finita

Supongamos que tenemos un operador hamiltoniano de la forma

$$\hat{H} = \hat{H}_p + \hat{H}_f + \hat{V}_{fp}, \tag{1}$$

donde

$$\hat{H}_p = \sum_{k_1 k_3} T_{k_1 k_3} \hat{a}^\dagger_{k_1} \hat{a}_{k_3} + \frac{1}{2} \sum_{k_1 k_2 k_3 k_4} V_{k_1 k_2 k_3 k_4} \hat{a}^\dagger_{k_1} \hat{a}^\dagger_{k_2} \hat{a}_{k_4} \hat{a}_{k_3}, \tag{2a}$$

$$\hat{H}_f = \frac{1}{2} \int \eta(\mathbf{R}) V(\mathbf{R} - \mathbf{R}') \eta(\mathbf{R}')\, d\mathbf{R} d\mathbf{R}' \tag{2b}$$

y

$$\hat{V}_{fp} = - \sum_{k_1 k_3} \int \eta(\mathbf{R}) V_{k_1 k_3}(\mathbf{R})\, d\mathbf{R}\, \hat{a}^\dagger_{k_1} \hat{a}_{k_3}, \tag{2c}$$

el cual define un gas "neutro" de N partículas, siendo $\hat{a}^\dagger_k$ y $\hat{a}_k$ operadores de creación y aniquilación de partículas en el estado k, $\eta(\mathbf{R})$ es la distribución de partículas del fondo y los elementos de matriz que aparecen están calculadas respecto a una base $\varphi_k(\mathbf{r})$:

$$T_{k_1 k_3} = \int \varphi^*_{k_1}(\mathbf{r}) \hat{T} \varphi_{k_3}(\mathbf{r})\, d\mathbf{r}, \tag{3a}$$

$$V_{k_1 k_3}(\mathbf{R}) = \int \varphi^*_{k_1}(\mathbf{r}) \hat{V}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \varphi_{k_3}(\mathbf{r})\, d\mathbf{r}, \tag{3b}$$

$$V_{k_1 k_2 k_3 k_4} = \int \varphi^*_{k_1}(\mathbf{r}) \varphi^*_{k_2}(\mathbf{r}') V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \varphi_{k_3}(\mathbf{r}) \varphi_{k_4}(\mathbf{r}')\, d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \tag{3c}$$

La energía en función de la temperatura para cualquier ensamble la escribimos como

$$\begin{aligned}\langle\hat{H}\rangle_T &= \sum_{k_1k_3} T_{k_1k_3}\langle\hat{a}^{\dagger}_{k_1}\hat{a}_{k_3}\rangle_T + \tfrac{1}{2}\sum_{k_1k_2k_3k_4} V_{k_1k_2k_3k_4}\langle\hat{a}^{\dagger}_{k_1}\hat{a}^{\dagger}_{k_2}\hat{a}_{k_4}\hat{a}_{k_3}\rangle_T \\ &+ \tfrac{1}{2}\int \eta(\mathbf{R})\hat{V}(\mathbf{R}-\mathbf{R}')\eta(\mathbf{R}')\,d\mathbf{R}d\mathbf{R}' \\ &- \sum_{k_1k_3}\int \eta(\mathbf{R})V_{k_1k_3}(\mathbf{R})\,d\mathbf{R}\langle\hat{a}^{\dagger}_{k_1}\hat{a}_{k_3}\rangle_T,\end{aligned}$$

donde la dependencia en la temperatura está en los promedios estadísticos indicados por los corchetes. Para cualquuier operador

$$\langle\hat{A}\rangle_T = \frac{\sum_n\langle n|\hat{A}|n\rangle e^{-\beta En}}{\sum_n e^{-\beta E_n}} = \frac{\mathrm{Tr}(\hat{A}\hat{\rho})}{\mathrm{Tr}\,\hat{\rho}}, \tag{5}$$

con

$$\hat{\rho} = e^{-\beta\hat{H}} \tag{6}$$

en el ensamble canónico y

$$\langle\hat{A}\rangle_T = \frac{\sum_n\langle n|\hat{A}|n\rangle e^{-\beta(E_n-\mu N)}}{\sum_n e^{-\beta(E_n-\mu N)}} = \frac{\mathrm{Tr}(\hat{A}\hat{\rho})}{\mathrm{Tr}\,\hat{\rho}}, \tag{7}$$

con

$$\hat{\rho}_{nn} = \langle n|e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}|n\rangle \tag{8}$$

para el gran canónico, β como siempre indica $1/KT$, donde K es la constante de Boltzmann y T la temperatura. La dependencia en $\eta(\mathbf{R})$ de la Ec. (4) aparece explícitamente e implícitamente a través de E_n en las exponenciales. Si queremos optimizar la energía en función de la distribución del fondo es necesario tomar en cuenta ambas dependencias.

Si derivamos la Ec. (4) de energía respecto a $\eta(\mathbf{R})$ e igualamos a cero encontramos la condición que deben satisfacer las distribuciones del fondo.

Suponiendo válido un teorema tipo Hellman-Feynman a temperatura finita; esto es, que se cumpla

$$\frac{\partial}{\partial\eta}\langle\hat{A}\rangle_T = \left\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial\eta}\right\rangle_T . \tag{9}$$

La derivada de la Ec. (4) se simplifica y queda de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial\eta(\mathbf{X})}\langle\hat{H}\rangle_T = &\int\frac{\partial\eta(\mathbf{R})}{\partial\eta(\mathbf{X})}\hat{V}(\mathbf{R}-\mathbf{R}')\eta(\mathbf{R}')\,d\mathbf{R}d\mathbf{R}'\\ &-\sum\int\frac{\partial\eta(\mathbf{R})}{\partial\eta(\mathbf{X})}V_{k_1k_3}(\mathbf{R})\,d\mathbf{R}\langle\hat{a}^\dagger_{k_1}\hat{a}_{k_3}\rangle_T,\end{aligned} \tag{10}$$

que igualada a cero da

$$\int\hat{V}(\mathbf{X}-\mathbf{R}')\eta(\mathbf{R}')\,d\mathbf{R}' = \sum_{k_1k_3}V_{k_1k_3}(\mathbf{X})\langle\hat{a}^\dagger_{k_1}\hat{a}_{k_3}\rangle_T. \tag{11}$$

Por otro lado, en general se cumple que

$$\langle\hat{a}^\dagger_{k_1}\hat{a}_{k_3}\rangle_T = \delta_{k_1k_3}\langle\hat{n}_{k_1}\rangle_T, \qquad \hat{n}_k = \hat{a}^\dagger_k\hat{a}_k \tag{12}$$

y

$$\langle\hat{a}^\dagger_{k_1}\hat{a}^\dagger_{k_2}\hat{a}_{k_3}\hat{a}_{k_4}\rangle_T = (\delta_{k_1k_4}\delta_{k_2k_3}-\delta_{k_1k_3}\delta_{k_2k_4})\langle\hat{a}^\dagger_{k_1}\hat{a}_{k_1}\hat{a}^\dagger_{k_2}\hat{a}_{k_2}\rangle \tag{13}$$

para que estos elementos sean distintos de cero. Y la condición que debe de satisfacer la distribución de "carga" del fondo se reduce a

$$\int\eta(\mathbf{R}')\hat{V}(\mathbf{X}-\mathbf{R}')\,d\mathbf{R}' = \sum_{k_1}V_{k_1k_1}(\mathbf{X})\langle\hat{n}_{k_1}\rangle_T, \tag{14}$$

la cual substituida en la Ec. (4) junto con las Ecs. (12) y (13) nos da la ecuación reducida para la energía:

$$
\begin{aligned}
E = {} & \sum_{k_1} T_{k_1k_1}\langle n_{k_1}\rangle_T + \tfrac{1}{2}\sum (V_{k_1k_2k_1k_2} - V_{k_1k_2k_2k_1})\langle \hat{n}_{k_1}\hat{n}_{k_2}\rangle \\
& + \tfrac{1}{2}\sum_{k_1}\int \eta(\mathbf{R})V_{k_1k_1}(\mathbf{R})\, d\mathbf{R}\langle \hat{n}_{k_1}\rangle_T \\
& - \sum_{k_1}\int \eta(\mathbf{R})V_{k_1k_1}(\mathbf{R})\, d\mathbf{R}\,\langle \hat{n}_{k_1}\rangle_T, \\
E = {} & \sum_{k_1} T_{k_1k_1}\langle \hat{n}_{k_1}\rangle_T + \tfrac{1}{2}\sum_{k_1k_2} (V_{k_1k_2k_1k_2} - V_{k_1k_2k_2k_1})\langle \hat{n}_{k_1}\hat{n}_{k_2}\rangle_T \\
& - \sum_{k_1k_2} V_{k_1k_2k_1k_2}\langle n_{k_1}\rangle_T\langle n_{k_2}\rangle_T .
\end{aligned}
$$

Esta ecuación se reduce aún más para modelos de partículas independientes:

$$
E = \sum_{k_1} T_{k_1k_1}\langle \hat{n}_{k_1}\rangle_T - \tfrac{1}{2}\sum_{k_1k_2} V_{k_1k_2k_2k_1}\langle n_{k_1}\rangle_T\langle n_{k_2}\rangle_T, \tag{16}
$$

cuando se cumple

$$
\langle \hat{n}_{k_1}\hat{n}_{k_2}\rangle_T \approx \langle \hat{f}_{k_1}\rangle_T\langle \hat{n}_{k_2}\rangle_T . \tag{17}
$$

En el caso de que la temperatura sea cero las Ecs. (14) y (16) se reducen a las correspondientes de la Ref. 1.

La existencia de la condición (14), que nos permite la reducción de la ecuación de energía, creemos es interesante desde el punto de vista de los cálculos a temperatura finita para el gas de electrones [3], pues permite hablar del modelo de jalea deformable a temperatura distinta de cero.

Agradecimientos

Los autores desean agradecer a la M. en C. Marcela Grether sus comentarios sobre este tema.

Referencias

1. M.A. Ortíz, R.M. Méndez-Moreno, A. Calles y E. Yépez, *Rev. Mex. Fís.* **29** (1982) 69.
2. R.P. Feynman, *Statistical Mechanics, a set of lectures* (1972), Frontiers in Physics, The Benjamin/Cummings Publishing Co, Inc.
3. A. Calles y A. Cabrera, *Rev. Mex. Fís.* **32** (1986) 573.