

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA**

Bruno Pavani Bertolino

**APLICAÇÃO DO MODELO DE THOMAS-FERMI  
ESTENDIDO À MATÉRIA DE PRÓTONS, NÊUTRONS E  
ELÉTRONS (NPE)**

Florianópolis

2012



Bruno Pavani Bertolino

**APLICAÇÃO DO MODELO DE THOMAS-FERMI  
ESTENDIDO À MATÉRIA DE PRÓTONS, NÊUTRONS E  
ELÉTRONS (NPE)**

Dissertação submetida à Pós-Graduação  
em Física para a obtenção do Grau de  
Mestre em Física.  
Orientador: Prof. Dr. Sidney dos San-  
tos Avancini

Florianópolis

2012

Catálogo na fonte pela Biblioteca Universitária  
da  
Universidade Federal de Santa Catarina

B546a Bertolino, Bruno Pavani

Aplicação do modelo de Thomas-Fermi estendido à matéria de prótons, nêutrons e elétrons (npe) [dissertação] / Bruno Pavani Bertolino ; orientador, Sidney dos Santos Avancini. - Florianópolis, SC, 2012.

84 p.: grafs., tabs.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Santa Catarina, Centro de Ciências Físicas e Matemáticas. Programa de Pós-Graduação em Física.

Inclui referências

1. Física. 2. Walecka, Modelo de. 3. Estrelas de nêutrons. I. Avancini, Sidney dos Santos. II. Universidade Federal de Santa Catarina. Programa de Pós-Graduação em Física. III. Título.

CDU 53

# APLICAÇÃO DO MODELO DE THOMAS-FERMI ESTENDIDO À MATÉRIA DE PRÓTONS, NÊUTRONS E ELÉTRONS (NPE)

**Bruno Pavani Bertolino**

Esta Dissertação foi julgada adequada para a obtenção do título de **MESTRE EM FÍSICA**, na área de concentração de **Física Nuclear e de Hádrons** e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós-Graduação em Física.

---

Prof. Dr. Sidney dos Santos Avancini  
(UFSC - Orientador)

---

Prof. Dr. Luis Guilherme de Carvalho Rego  
(FSC/UFSC - Coordenador do Programa)

---

Prof. Dr. Sidney dos Santos Avancini  
(UFSC - Presidente)

---

Prof. Dr. Manuel Maximo Bastos Malheiro  
de Oliveira  
(ITA)

---

Prof. Dr. José Ricardo Marinelli  
(FSC/UFSC)

---

Prof. Dr. Celso de Camargo Barros Junior  
(FSC/UFSC)



Aos meus pais, José Roberto e Silvia.





## AGRADECIMENTOS

Ao orientador, Prof. Dr. Sidney dos Santos Avancini, pela orientação, dedicação e compreensão.

À Universidade Federal de Santa Catarina, através do Departamento de Física, que me possibilitou a oportunidade de realizar este trabalho.

Ao Programa de Pós-Graduação em Física e aos professores do Departamento de Física.

À CAPES pela concessão da bolsa de Mestrado.

A todos os que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho.



## RESUMO

Calculamos neste trabalho propriedades das fases exóticas da matéria npe conhecidas como “pasta”, que são encontradas na crosta das estrelas de nêutrons, partindo do modelo de Walecka não-linear com a parametrização NL3. Desenvolvemos um algoritmo para realizar o cálculo numérico incluindo termos de segunda ordem nas expansões das densidades e da energia, isto é, utilizando a aproximação de Thomas-Fermi estendida. Limitamo-nos ao estudo das fases com geometrias tridimensionais a temperatura zero, e obtivemos para esses casos a configuração preferencial (estado fundamental) para diferentes densidades, assim como a região de transição entre a pasta e a fase homogênea, mostrando uma dependência desta com a fração de prótons.

**Palavras-chave:** Modelo de Walecka não-linear. Aproximação de Thomas-Fermi estendida. Fase pasta.



## ABSTRACT

In this work, we have calculated properties of exotic phases of npe matter known as “pasta”, which are found on the crust of neutron stars, starting from the non-linear Walecka model with the NL3 parametrization. We have developed an algorithm to perform the numerical calculation including second-order terms in the expansions of the densities and energy, that is, using the extended Thomas-Fermi approximation. We have limited ourselves to the study of phases with three-dimensional geometry at zero temperature, and have obtained for those cases the preferential (ground-state) configuration for different densities, as well as the transition region between the pasta and the homogeneous phase, showing its dependence with the proton fraction.

**Keywords:** Non-linear Walecka model. Extended Thomas-Fermi approximation. Pasta phase.



## SUMÁRIO

|   |    |
|---|----|
| <b>1 INTRODUÇÃO</b> .....   | 15 |
| <b>2 MODELO <math>\sigma - \omega</math> DE WALECKA</b> .....               | 21 |
| 2.1 CÁLCULO DAS EQUAÇÕES DE MOVIMENTO .....                                 | 23 |
| 2.2 APROXIMAÇÕES DE CAMPO MÉDIO E THOMAS-FERMI .....                        | 28 |
| <b>3 EXPANSÃO DE WIGNER-KIRKWOOD</b> .....                                  | 33 |
| 3.1 FORMULAÇÃO DE WEYL-WIGNER DA MECÂNICA QUÂN-<br>TICA .....               | 35 |
| 3.2 PROPRIEDADES DO OPERADOR DELTA .....                                    | 40 |
| 3.3 TRANSFORMADA DE WEYL DO PRODUTO DE DOIS<br>OPERADORES ARBITRÁRIOS ..... | 45 |
| <b>4 MÉTODO DE THOMAS-FERMI ESTENDIDO RE-<br/>LATIVÍSTICO</b> .....         | 49 |
| 4.1 CÁLCULO DA MATRIZ DENSIDADE .....                                       | 52 |
| 4.2 EXPRESSÕES WIGNER-KIRKWOOD DA DENSIDADE<br>E ENERGIA .....              | 56 |
| <b>5 APLICAÇÃO NA FASE PASTA FRIA EM ESTRE-<br/>LAS DE NÊUTRONS</b> .....   | 63 |
| 5.1 CÁLCULO DOS POTENCIAIS QUÍMICOS .....                                   | 63 |
| 5.2 SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DE KLEIN-GORDON .....                              | 66 |
| <b>6 RESULTADOS E DISCUSSÃO</b> .....                                       | 69 |
| 6.1 PERFIS DE DENSIDADE .....   | 71 |
| 6.2 ENERGIA POR PARTÍCULA .....   | 75 |
| <b>7 CONCLUSÃO</b> .....  | 81 |
| <b>REFERÊNCIAS</b> .....  | 83 |





# 1 INTRODUÇÃO

Nesta dissertação, pretendemos aplicar aproximações semiclássicas a um modelo de campo médio relativístico (SEROT et al., 1986. (Advances in nuclear physics, v.16)), com a intenção de calcular observáveis de sistemas tais como núcleos atômicos e matéria estelar. Como parte inicial, estudamos algumas técnicas existentes na literatura para lidar com o problema de muitos corpos, evitando o trabalho de resolver as equações de campo médio de Hartree-Fock (HF) e calcular as funções de onda de uma partícula.

Normalmente, métodos semiclássicos consistem em realizar a expansão de Wigner-Kirkwood (WK) da matriz densidade em ordens sucessivas de  $\hbar$ . Há uma variedade de métodos, no entanto, para realizar esta expansão, tais como o método algébrico de Grammaticos e Voros (GRAMMATICOS; VOROS, 1979) e a expansão variacional Wigner-Kirkwood (VWK) (CENTELLES et al., 1998; CENTELLES; SCHUCK; VIÑAS, 2007), para o caso não relativístico, e as técnicas de funcional da densidade como o método de Thomas-Fermi (TF) e Thomas-Fermi estendido (TFE) (CENTELLES et al., 1990, 1993) ou a teoria relativística variacional Wigner-Kirkwood (RVWK) (DEL ESTAL; CENTELLES; VIÑAS, 1997), para o caso relativístico.

Estamos interessados especialmente na utilização de modelos relativísticos, e neste caso aparecem complicações nos cálculos advindas da não comutatividade das matrizes que entram na hamiltoniana, o que torna impossível a utilização das mesmas técnicas para o cálculo das matrizes densidade não relativística e relativística. Particularmente, neste caso, é necessário realizar a soma de séries de potências separadamente para as soluções de energia positiva e negativa, onde as técnicas não relativísticas misturariam as duas (CENTELLES et al., 1993).

As técnicas de funcional da densidade consistem basicamente em obter a expansão WK da densidade  $\rho$ , a partir do cálculo da matriz densidade, e invertê-la de maneira a obter a densidade de energia e a densidade de energia cinética como funcionais da densidade e de seus gradientes (CENTELLES et al., 1990, 1993, 1992) e então minimizar a energia total para obter um conjunto de equações a ser resolvido de maneira auto-consistente. Na técnica RVWK, a densidade de número e densidade de energia, assim como o potencial químico e os campos, são expandidos em ordens de  $\hbar$  e a minimização é feita para os termos de cada ordem de maneira independente. Um resultado importante é que as correções a uma certa ordem de  $\hbar$  para as densidades requerem

o conhecimento dos campos apenas até a ordem anterior (DEL ESTAL; CENTELLES; VIÑAS, 1997).

Nosso principal intuito neste trabalho é utilizar uma aproximação TFE para calcular as propriedades da fase pasta em estrelas de nêutrons a temperatura zero. Para tal vamos utilizar a técnica de funcional da densidade descrita em (CENTELLES, 1992), no entanto exprimindo as correções de segunda ordem em função dos momentos de Fermi e da massa efetiva, que por sua vez são dependentes dos campos mesônicos e eletromagnético. Algumas das vantagens do método TFE sobre o método TF, mais simples, é que este último não trata bem efeitos de camada e termos de superfície, enquanto que com a aproximação TFE levamos em conta em média os efeitos de camada, e melhoramos o tratamento dos termos de superfície. (RING; SCHUCK, 1980)

O estudo das estrelas compactas, assim como o das colisões de íons pesados, representa uma boa oportunidade para os físicos nucleares e de partículas compreenderem a matéria em situações extremas. (MARUYAMA et al., 2006) Os detalhes envolvidos nas explosões de supernova e no comportamento e composição das estrelas de nêutrons têm sido objeto de estudo extensivo nas últimas décadas, e acredita-se que as estrelas de nêutrons sejam o resultado de explosões de supernova tipo II, Ib e Ic. Nestas explosões, o núcleo estelar é comprimido até uma densidade muitas vezes maior que a densidade nuclear de saturação, e assim se mantém devido à presença da gravidade, enquanto que o restante da estrela é expelido. (AVANCINI et al., 2008)

A matéria nuclear no estado fundamental apresenta diversas características conhecidas como propriedades de saturação, como a densidade de saturação,  $\rho_0 \approx 0.16 \text{ fm}^{-3}$  e a energia de ligação, B.E./A  $\approx -16 \text{ MeV}$ . Essas propriedades, assim como a incompressibilidade nuclear e outras, são importantes para ajustar os parâmetros dos modelos usados para descrever a matéria nuclear. Estamos interessados particularmente em parametrizações do modelo relativístico não-linear de Walecka. Modelos relativísticos, ao serem aplicados em altas densidades e assimetrias de isospin, como nas estrelas compactas, ou em altas temperaturas, especialmente nas colisões de íons pesados, mas também em certas aplicações em matéria estelar, providenciam informações adicionais àquelas obtidas com modelos não-relativísticos, como, por exemplo, uma explicação natural da força spin-órbita. Também pode-se esperar que seja possível estabelecer uma conexão entre esses modelos e descrições mais fundamentais das interações nucleares em teoria de campos, e que eles sirvam de base para uma descrição da matéria nuclear mais quente e densa, para a qual a relatividade torna-se

mais importante (GREINER; MARUHN, 1996).

A incidência de diferentes densidades na matéria restante das explosões de supernovas pode implicar na formação de estados exóticos da matéria nuclear. Em densidades típicas, próximas à densidade de saturação, as escalas dominadas pelas interações nuclear forte e eletromagnética estão bastante separadas, e por isso a matéria se organiza na forma de núcleos atômicos. Em densidades de cerca de 0.01 a 0.1  $fm^{-3}$ , porém, as escalas de comprimento estão mais próximas, e ocorre uma competição entre os dois tipos de interação.

Em densidades muito baixas, a matéria nuclear se arranja formando uma rede em um mar de elétrons, de modo a minimizar a energia coulombiana. Com o aumento da densidade, estruturas intermediárias começam a aparecer, como uma fase mista em uma transição de fase líquido-gás de primeira ordem. Essas configurações intermediárias enfim desaparecem em uma densidade abaixo da densidade de saturação, dando origem a uma fase homogênea. A densidade em que ocorre a transição para a fase homogênea depende da constituição da matéria (sua fração de prótons), do modelo e parametrização utilizados e da temperatura. Identificando a equação de estado da matéria nuclear, pode-se determinar onde esta cruza as curvas espinodais (AVANCINI et al., 2008) características da transição de fase, e portanto em que temperaturas há o aparecimento da fase mista.

As estruturas complexas que surgem nesse tipo de sistema intermediário são chamadas de “pasta” nuclear, e ocorrem no estágio final do colapso das supernovas e nas crostas das estrelas de nêutrons, que acredita-se serem formadas por matéria rica em nêutrons em equilíbrio  $\beta$ . Como há partículas carregadas no sistema, ocorre um equilíbrio entre a tensão superficial e a interação coulombiana, e as estruturas que surgem nessa transição de fase têm tamanho e forma definidos, formando redes de “pedaços” de uma fase embutidas na outra fase, diferentemente da transição de fase líquido-vapor da água, por exemplo, em que as fases têm uma geometria arbitrária, quando a tensão superficial é pequena, ou estão completamente separadas, quando ela é grande.

Os pedaços das fases que aparecem na pasta podem ser modelados por estruturas com simetria esférica em três dimensões, em relação a rotações ao redor do eixo  $z$  em duas dimensões, ou em relação ao eixo perpendicular às camadas em uma dimensão. A essas estruturas são normalmente dados os nomes de *droplet* (gota) e *bubble* (bolha) em três dimensões, *rod* (bastão) e *tube* (tubo) em duas dimensões, e *slab* (placa) em uma dimensão, e todas são tipicamente definidas dentro de

uma célula de Wigner-Seitz. (AVANCINI et al., 2008; MARUYAMA et al., 2006) As estruturas denominadas gota e bastão caracterizam-se por terem densidades maiores do que as das suas imediações na célula, assim como aquelas chamadas de bolha e tubo têm densidades menores. O nome pasta vem da identificação figurativa das estruturas tipo bastão e placa com espaguete e lasanha, respectivamente.

O estudo da fase pasta em estrelas de nêutrons é de considerável interesse para prever certas propriedades das regiões exteriores dessas estrelas, tais como a condutividade térmica, que é importante para determinar a velocidade com que a estrela se resfria, a viscosidade, propriedades mecânicas e o livre caminho médio de neutrinos na matéria estelar. As estruturas tridimensionais (gota e bolha), apresentam especial interesse devido ao fato de essas configurações estarem nos limites entre a matéria homogênea e não-homogênea, extremos de densidades onde há maior conexão com dados experimentais. Neste estudo, realizamos cálculos para essas duas geometrias.

Em densidades maiores, estuda-se a possibilidade de haver outras transições de fase. Em uma densidade várias vezes maior que a densidade de saturação, acredita-se que ocorra uma transição de fase de primeira ordem para um estado condensado de mésons  $K^-$ . Este condensado kaônico deve ocorrer em estrelas de nêutrons, em regiões onde a densidade é muito grande, com uma larga faixa de densidades em que aparece a fase mista, ocorrendo também estruturas com geometria definida chamadas de pasta kaônica. Além dessa transição de fase, em densidades ou temperaturas muito grandes, considera-se o desconfinamento dos quarks, que daria origem a uma fase mista de hádrons e quarks desconfiados. Entende-se esta última como um plasma de quarks e glúons, e procura-se compreender as propriedades da matéria quark utilizando-se métodos de primeiros princípios baseados na cromodinâmica quântica (QCD), tais como QCD na rede. Pouco se conhece sobre essa transição de fase, mas é sugerido que ela seja também uma transição de primeira ordem, dando origem, portanto, a uma fase mista como nos casos anteriores.

Em sequência, fazemos uma breve descrição dos assuntos tratados em cada capítulo deste texto. No segundo capítulo, descrevemos brevemente o modelo nuclear utilizado no trabalho, isto é, o modelo  $\sigma$ - $\omega$  de Walecka (SEROT et al., 1986. (Advances in nuclear physics, v.16)). A aplicação deste modelo é fundamental para obtermos as equações de movimento e a hamiltoniana do nosso sistema, a matéria npe (composta por nêutrons, prótons e elétrons). O modelo de Walecka é uma descrição bem sucedida e bastante utilizada das interações nucleares, e serve

como ponto de partida para o cálculo TFE. Diversas parametrizações existem para este modelo, dentre as quais escolhemos uma das mais usuais, chamada parametrização NL3. Apresentamos aqui também as aproximações de campo médio e de Thomas-Fermi.

No terceiro capítulo, mudamos o foco para a expansão semiclássica de Wigner-Kirkwood, uma técnica desenvolvida para calcular as matrizes densidade, e baseada na formulação de Weyl-Wigner da mecânica quântica no espaço de fase (DE GROOT; SUTTORP, 1972; BRACK; BHADURI, 2003; MARCHIOLLI, 2002). Esta técnica permite que o propagador relacionado à hamiltoniana seja expandido em ordens de  $\hbar$  de maneira consistente, gerando equações recursivas para a determinação de cada ordem para o propagador, do qual a matriz densidade relativística é obtida a partir de uma transformada de Laplace inversa (RING; SCHUCK, 1980). Visto que a formulação de Weyl-Wigner não é tão amplamente conhecida, reservamos este capítulo para explicar seus fundamentos de maneira um pouco mais detalhada.

O quarto capítulo trata da aproximação TFE, iniciando pela delimitação do cálculo das matrizes densidade, prosseguindo com o desenvolvimento dos cálculos da densidade, densidade de energia e densidade escalar em ordem zero (aproximação de Thomas-Fermi) como ilustração da técnica de expansão WK, demonstrando a obtenção correta das expressões TF encontradas na literatura, e finalizando com a apresentação das expressões finais das correções de segunda ordem (aproximação de Thomas-Fermi estendida) em função das derivadas do potencial e da massa efetiva.

O quinto capítulo foca na questão da fase pasta na matéria npe e, por extensão, no caso das estrelas de nêutrons, embora não tenhamos incluído o equilíbrio beta. Ele também trata de suas características geométricas, assim como no funcionamento básico do algoritmo desenvolvido para realizar a simulação numérica. Apresentamos os vínculos que devem ser respeitados na realização do cálculo: a condição de um número constante de bárions e a neutralidade de carga, calculados no interior de uma célula de Wigner-Seitz. Explicamos também como as equações de Klein-Gordon referentes aos campos podem ser resolvidas mediante uma expansão em uma base de estados do oscilador harmônico.

O sexto capítulo é reservado para a exposição dos resultados obtidos com o algoritmo e sua discussão, incluindo os gráficos dos perfis de densidade das células para as duas geometrias estudadas (gota e bolha) e frações de prótons diferentes em uma dada densidade global, e a energia total do sistema nas duas geometrias para uma gama de

densidades, o que permite a determinação da geometria predominante dentre as duas em cada faixa de densidade. Também discutimos a região de densidades maiores em que a fase pasta heterogênea deixa de ser o estado fundamental em favor de uma configuração homogênea.

Finalmente, na conclusão do trabalho discutimos possíveis refinamentos e adições ao algoritmo para a obtenção de uma extensão maior de dados, assim como projetos relacionados.

## 2 MODELO $\sigma - \omega$ DE WALECKA

O problema da descrição microscópica de um sistema nuclear como um núcleo finito é atacado tipicamente por um método puramente quântico e não relativístico, resolvendo uma equação de Schrödinger para muitos corpos que interagem através de potenciais nucleares. Neste caminho, uma das aproximações mais razoáveis é a aproximação de Hartree-Fock (HF), que consiste em substituir a função de onda de muitos corpos por um determinante de Slater de funções de onda de partícula única, obtendo-se um conjunto de equações de onda de partícula única em que os núcleons se movem em um potencial de Hartree-Fock.

Walecka e colaboradores desenvolveram um outro caminho para o estudo do problema de muitos corpos, uma teoria de campos quânticos relativísticos chamada de hadrodinâmica quântica (HDQ) (SEROT et al., 1986. (Advances in nuclear physics, v.16)). Sabe-se hoje que a interação nuclear que gera os potenciais nucleon-nucleon advém da dinâmica subjacente de quarks e glúons, que pode ser descrita de maneira efetiva por uma teoria de mésons no regime de energias mais baixas. O formalismo da hadrodinâmica quântica trata da interação nuclear como sendo originada da troca de mésons virtuais, e os efeitos relativísticos são incorporados naturalmente à teoria.

Na forma mais simples da HDQ, consideram-se dois campos mesônicos: um campo isoescalar-escalar atrativo associado ao méson  $\sigma$  e um campo isoescalar-vetorial repulsivo associado ao méson  $\omega$ , que origina o comportamento da interação em curtas distâncias. Desta maneira, ficamos com o chamado modelo  $\sigma$ - $\omega$ . A introdução desses dois mésons é motivada pela observação de componentes escalares e quadri-vetoriais na interação nuclear. Os efeitos das trocas de mésons  $\pi$  são nulos em média ao descrevermos as propriedades da matéria nuclear, devido à dependência da interação com o spin, e por isso a colaboração do méson  $\pi$  é desprezada nesta descrição mais simples.

A densidade Lagrangeana para este modelo  $\sigma$ - $\omega$  é a seguinte:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_1 = & \bar{\psi}[\gamma_\mu(i\partial^\mu - g_v V^\mu) - m^*]\psi + \frac{1}{2}(\partial_\mu\phi\partial^\mu\phi - m_s^2) \\ & - \frac{1}{4}\Omega_{\mu\nu}\Omega^{\mu\nu} + \frac{1}{2}m_v^2 V_\mu V^\mu + \delta\mathcal{L} \end{aligned} \quad (2.1)$$

onde

$$\Omega_{\mu\nu} = \partial_\mu V_\nu - \partial_\nu V_\mu \quad (2.2)$$

$$m^* = M - g_s \phi \quad (2.3)$$

É importante perceber, entretanto, que no modelo  $\sigma$ - $\omega$  de Walecka linear, o valor da incompressibilidade da matéria nuclear é consideravelmente superestimado. O valor obtido com esta teoria mais simples é de  $\kappa = 545$  MeV, muito acima dos valores obtidos empiricamente, o que nos mostra a necessidade de correções à teoria. A idéia de Boguta e Bodmer (BOGUTA; BODMER, 1977) de acrescentar termos proporcionais ao campo escalar ao cubo e à quarta potência à densidade Lagrangiana é o método mais utilizado para deslocar o valor da incompressibilidade para regiões aceitáveis. A densidade Lagrangeana proposta para esta finalidade tem a seguinte forma:

$$\mathcal{L}_{BB} = \mathcal{L}_1 - \frac{1}{3}\kappa\phi^3 - \frac{1}{12}\lambda\phi^4 \quad (2.4)$$

Além dessas correções, para darmos uma boa descrição de um núcleo finito, é essencial que levemos em conta a assimetria entre prótons e nêutrons. A contribuição dessa assimetria à densidade Lagrangiana se dá na forma da adição de um campo isovetorial-vetorial correspondente ao méson  $\rho$ . Também devem ser adicionados para essa descrição termos referentes à interação eletromagnética, que é importante no caso de núcleos finitos e também em estrelas de nêutrons.

Dessa maneira, consideraremos para nossos propósitos uma extensão ao modelo de Walecka original chamado modelo  $\sigma$ - $\omega$  não-linear, que reproduz de maneira satisfatória os dados da matéria nuclear na ausência do campo coulombiano. A densidade Lagrangeana completa é a seguinte:

$$\mathcal{L} = \sum_{i=p,n} \mathcal{L}_i + \mathcal{L}_e + \mathcal{L}_\sigma + \mathcal{L}_\omega + \mathcal{L}_\rho + \mathcal{L}_\gamma \quad (2.5)$$

Explicitando os termos:

$$\mathcal{L}_i = \bar{\psi}_i [\gamma_\mu iD^\mu - M^*] \psi_i \quad (2.6)$$

$$\mathcal{L}_e = \bar{\psi}_e [\gamma_\mu (i\partial^\mu + eA^\mu) - m_e] \psi_e \quad (2.7)$$



$$\mathcal{L}_\sigma = \frac{1}{2} \left( \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi - m_s^2 \phi^2 - \frac{1}{3} \kappa \phi^3 - \frac{1}{12} \lambda \phi^4 \right) \quad (2.8)$$

$$\mathcal{L}_\omega = \frac{1}{2} \left( -\frac{1}{2} \Omega_{\mu\nu} \Omega^{\mu\nu} + m_v^2 V_\mu V^\mu \right) \quad (2.9)$$

$$\mathcal{L}_\rho = \frac{1}{2} \left( -\frac{1}{2} \vec{B}_{\mu\nu} \cdot \vec{B}^{\mu\nu} + m_\rho^2 \vec{b}_\mu \cdot \vec{b}^\mu \right) \quad (2.10)$$

$$\mathcal{L}_\gamma = -\frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \quad (2.11)$$

Onde

$$iD^\mu = i\partial^\mu - g_v V^\mu - \frac{g_\rho}{2} \vec{\tau} \cdot \vec{b}^\mu - e \frac{1 + \tau_3}{2} A^\mu \quad (2.12)$$

$$\vec{B}_{\mu\nu} = \partial_\mu \vec{b}_\nu - \partial_\nu \vec{b}_\mu - g_\rho (\vec{b}_\mu \times \vec{b}_\nu) \quad (2.13)$$

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu \quad (2.14)$$

Os operadores  $\psi_i$  e os seus adjuntos  $\bar{\psi}_i$  representam os campos dos nucleons,  $\phi$  é um campo isoescalar-escalar com massa  $m_s$  associado ao méson  $\sigma$ ,  $V^\mu$  é um campo isoescalar-vetorial com massa  $m_v$  associado ao méson  $\omega$ , e  $\vec{b}^\mu$  é um campo isovetorial-vetorial com massa  $m_\rho$  associado ao méson  $\rho$ , de onde se origina a contribuição do isospin (AVANCINI et al., 2008). Os campos dos mésons e dos núcleons estão acoplados, e as constantes de acoplamento são  $g_s$ ,  $g_v$  e  $g_\rho$ , enquanto que o campo eletromagnético tem a constante de acoplamento  $e = \sqrt{\frac{4\pi}{137}}$ .  $M$  e  $m_e$  correspondem às massas dos nucleons e dos elétrons, respectivamente. O vetor  $\vec{\tau}$  é o operador de isospin, e  $\tau_3$  é definido da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \tau_3(p) &= 1 \\ \tau_3(n) &= -1 \end{aligned} \quad (2.15)$$

## 2.1 CÁLCULO DAS EQUAÇÕES DE MOVIMENTO

A partir da densidade Lagrangeana, podemos calcular as equações de movimento para os campos  $\xi$  do modelo, através das equações

de Euler-Lagrange:

$$\partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \xi)} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \xi} = 0 \quad (2.16)$$

Para  $\xi = \bar{\psi}_i$ , temos:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \bar{\psi}_i)} = 0 \quad (2.17)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\psi}_i} = [\gamma_\mu i D^\mu - m^*] \psi_i \quad (2.18)$$

$$\partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \bar{\psi}_i)} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\psi}_i} = [\gamma_\mu i D^\mu - m^*] \psi_i = 0 \quad (2.19)$$

Para  $\xi = \bar{\psi}_e$ :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \bar{\psi}_e)} = 0 \quad (2.20)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\psi}_e} = [\gamma_\mu (i \partial^\mu + e A^\mu) - m_e] \psi_e \quad (2.21)$$

$$\partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \bar{\psi}_e)} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\psi}_e} = [\gamma_\mu (i \partial^\mu + e A^\mu) - m_e] \psi_e = 0 \quad (2.22)$$

Que é a equação de Dirac. Para  $\xi = \phi$ :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} = \frac{\partial}{\partial (\partial_\mu \phi)} \left( \frac{1}{2} \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi \right) = \partial^\mu \phi \quad (2.23)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} = -m_s^2 \phi - \frac{\kappa}{2} \phi^2 - \frac{\lambda}{6} \phi^3 + g_s \bar{\psi}_i \psi_i \quad (2.24)$$

$$\partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} = \partial_\mu \partial^\mu \phi + m_s^2 \phi + \frac{\kappa}{2} \phi^2 + \frac{\lambda}{6} \phi^3 - g_s \bar{\psi}_i \psi_i = 0 \quad (2.25)$$

Para  $\xi = V_\mu$ :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_{\bar{\mu}} V_{\mu})} &= \frac{\partial}{\partial (\partial_{\bar{\mu}} V_{\mu})} \left( -\frac{1}{4} \Omega_{\mu' \nu'} \Omega^{\mu' \nu'} \right) \\
&= -\frac{1}{4} \frac{\partial}{\partial (\partial_{\bar{\mu}} V_{\mu})} [(\partial_{\mu'} V_{\nu'} - \partial_{\nu'} V_{\mu'}) \\
&\quad \times (\partial^{\mu'} V^{\nu'} - \partial^{\nu'} V^{\mu'})] \\
&= -\frac{1}{4} [(\delta_{\bar{\mu}\mu'} \delta_{\mu\nu'} - \delta_{\bar{\mu}\nu'} \delta_{\mu\mu'}) \Omega^{\mu' \nu'} \\
&\quad + \Omega_{\mu' \nu'} (\delta_{\bar{\mu}\mu'} \delta_{\mu\nu'} - \delta_{\bar{\mu}\nu'} \delta_{\mu\mu'})] \\
&= -\Omega^{\bar{\mu}\mu}
\end{aligned} \tag{2.26}$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial V_{\mu}} = m_v^2 V^{\mu} - g_v \bar{\psi}_i \gamma^{\mu} \psi_i \tag{2.27}$$

$$\partial_{\bar{\mu}} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_{\bar{\mu}} V_{\mu})} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial V_{\mu}} = -\partial_{\bar{\mu}} \Omega^{\bar{\mu}\mu} - m_v^2 V^{\mu} + g_v \bar{\psi}_i \gamma^{\mu} \psi_i = 0 \tag{2.28}$$

Onde

$$\partial_{\bar{\mu}} \Omega^{\bar{\mu}\mu} = \partial_{\bar{\mu}} \partial^{\bar{\mu}} V^{\mu} - \partial^{\mu} \partial_{\bar{\mu}} V^{\bar{\mu}} = \partial_{\bar{\mu}} \partial^{\bar{\mu}} V^{\mu} \tag{2.29}$$

Podemos ver que o segundo termo na expressão acima se anula tomando  $\partial_{\mu}$  da equação (2.28):

$$-\partial_{\mu} \partial_{\bar{\mu}} \Omega^{\bar{\mu}\mu} - m_v^2 \partial_{\mu} V^{\mu} + g_v \partial_{\mu} (\bar{\psi}_i \gamma^{\mu} \psi_i) = -m_v^2 \partial_{\mu} V^{\mu} = 0 \tag{2.30}$$

Onde o primeiro termo se anula por se tratar de um tensor simétrico operando em um tensor anti-simétrico, e o terceiro termo se anula devido à equação da continuidade para a corrente  $j^{\mu} = \bar{\psi}_i \gamma^{\mu} \psi_i$ , que deve ser conservada. Finalmente, obtemos:

$$\partial_{\bar{\mu}} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_{\bar{\mu}} V_{\mu})} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial V_{\mu}} = -\partial_{\bar{\mu}} \partial^{\bar{\mu}} V^{\mu} - m_v^2 V^{\mu} + g_v \bar{\psi}_i \gamma^{\mu} \psi_i = 0 \tag{2.31}$$

Para  $\xi = \vec{b}_{\mu}$ :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_{\bar{\mu}} \vec{b}_{\mu})} = \frac{\partial}{\partial (\partial_{\bar{\mu}} \vec{b}_{\mu})} \left( -\frac{1}{4} \vec{B}_{\mu' \nu'} \vec{B}^{\mu' \nu'} \right) = -\vec{B}^{\bar{\mu} \mu} \quad (2.32)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{b}_{\mu}} = m_{\rho}^2 \vec{b}^{\mu} - \frac{g_{\rho}}{2} \bar{\psi}_i \gamma^{\mu} \vec{\tau} \psi_i \quad (2.33)$$

$$\begin{aligned} \partial_{\bar{\mu}} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_{\bar{\mu}} \vec{b}_{\mu})} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{b}_{\mu}} &= -\partial_{\bar{\mu}} \vec{B}^{\bar{\mu} \mu} - m_{\rho}^2 \vec{b}^{\mu} + g_{\rho} \bar{\psi}_i \gamma^{\mu} \psi_i \\ &= -\partial_{\bar{\mu}} \partial^{\bar{\mu}} \vec{b}^{\mu} - m_{\rho}^2 \vec{b}^{\mu} + g_{\rho} \bar{\psi}_i \gamma^{\mu} \psi_i \\ &= 0 \end{aligned} \quad (2.34)$$

Para  $\xi = A_{\mu}$ :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_{\bar{\mu}} A_{\mu})} = \frac{\partial}{\partial (\partial_{\bar{\mu}} A_{\mu})} \left( -\frac{1}{4} F_{\mu' \nu'} F^{\mu' \nu'} \right) = -F^{\bar{\mu} \mu} \quad (2.35)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_{\mu}} = -e \bar{\psi}_i \gamma^{\mu} \frac{(1 - \tau_3)}{2} \psi_i + e \bar{\psi}_e \gamma^{\mu} \psi_e \quad (2.36)$$

$$\begin{aligned} \partial_{\bar{\mu}} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_{\bar{\mu}} A_{\mu})} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_{\mu}} &= -\partial_{\bar{\mu}} F^{\bar{\mu} \mu} + e \bar{\psi}_i \gamma^{\mu} \frac{(1 - \tau_3)}{2} \psi_i \\ &\quad - e \bar{\psi}_e \gamma^{\mu} \psi_e \\ &= -\partial_{\bar{\mu}} \partial^{\bar{\mu}} A^{\mu} + e \bar{\psi}_i \gamma^{\mu} \frac{(1 - \tau_3)}{2} \psi_i \\ &\quad - e \bar{\psi}_e \gamma^{\mu} \psi_e = 0 \end{aligned} \quad (2.37)$$

A partir da densidade Lagrangeana, podemos obter também o tensor densidade de energia-momento, de acordo com a equação:

$$\mathcal{T}^{\mu\nu} = -g^{\mu\nu} \mathcal{L} + \sum_{\xi} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_{\mu} \xi} \partial^{\nu} \xi \quad (2.38)$$

Já calculamos os termos do somatório, de maneira que o tensor tem a forma:

$$\begin{aligned}
\mathcal{T}^{\mu\nu} = & -g^{\mu\nu} \{ \overline{\psi}_i \left[ \gamma_{\mu'} i D^{\mu'} - m^* \right] \psi_i \\
& + \overline{\psi}_e \left[ \gamma_{\mu'} \left( i \partial^{\mu'} + e A^{\mu'} \right) - m_e \right] \psi_e + \\
& + \frac{1}{2} \left( \partial_{\mu'} \phi \partial^{\mu'} \phi - m_s^2 \phi^2 \right) - \frac{1}{3!} k \phi^3 - \frac{1}{4!} \lambda \phi^4 \\
& - \frac{1}{4} \Omega_{\mu'\nu'} \Omega^{\mu'\nu'} + \frac{1}{2} m_v^2 V_{\mu'} V^{\mu'} - \frac{1}{4} \vec{B}_{\mu'\nu'} \cdot \vec{B}^{\mu'\nu'} \\
& + \frac{1}{2} m_\rho^2 \vec{b}_{\mu'} \cdot \vec{b}^{\mu'} - \frac{1}{4} F_{\mu'\nu'} F^{\mu'\nu'} \} \\
& + \overline{\psi}_i i \gamma^\mu \partial^\nu \psi_i + \overline{\psi}_e i \gamma^\mu \partial^\nu \psi_e \\
& + \partial^\mu \phi \partial^\nu \phi - \Omega^{\mu\nu'} \partial^\nu V_{\nu'} \\
& - \vec{B}^{\mu\nu'} \cdot \partial^\nu \vec{b}_{\nu'} - F^{\mu\nu'} \partial^\nu A_{\nu'}
\end{aligned} \tag{2.39}$$

Usando as equações de movimento para os campos dos nucleons e dos elétrons, temos que os primeiros termos da equação são nulos, e desta forma:

$$\begin{aligned}
\mathcal{T}^{\mu\nu} = & -g^{\mu\nu} \left[ \frac{1}{2} \left( \partial_{\mu'} \phi \partial^{\mu'} \phi - m_s^2 \phi^2 \right) - \frac{1}{3!} k \phi^3 - \frac{1}{4!} \lambda \phi^4 \right. \\
& - \frac{1}{4} \Omega_{\mu'\nu'} \Omega^{\mu'\nu'} + \frac{1}{2} m_v^2 V_{\mu'} V^{\mu'} - \frac{1}{4} \vec{B}_{\mu'\nu'} \cdot \vec{B}^{\mu'\nu'} \\
& \left. + \frac{1}{2} m_\rho^2 \vec{b}_{\mu'} \cdot \vec{b}^{\mu'} - \frac{1}{4} F_{\mu'\nu'} F^{\mu'\nu'} \right] \\
& + \overline{\psi}_i i \gamma^\mu \partial^\nu \psi_i + \overline{\psi}_e i \gamma^\mu \partial^\nu \psi_e \\
& + \partial^\mu \phi \partial^\nu \phi - \Omega^{\mu\nu'} \partial^\nu V_{\nu'} \\
& - \vec{B}^{\mu\nu'} \cdot \partial^\nu \vec{b}_{\nu'} - F^{\mu\nu'} \partial^\nu A_{\nu'}
\end{aligned} \tag{2.40}$$

Do tensor densidade de energia-momento, tomando a componente  $\mathcal{T}^{00}$ , obtemos a densidade de Hamiltoniana:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} = & -\left[ \frac{1}{2} \left( \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi - m_s^2 \phi^2 \right) - \frac{1}{3!} k \phi^3 - \frac{1}{4!} \lambda \phi^4 - \frac{1}{4} \Omega_{\mu\nu} \Omega^{\mu\nu} \right. \\
& + \frac{1}{2} m_v^2 V_\mu V^\mu - \frac{1}{4} \vec{B}_{\mu\nu} \cdot \vec{B}^{\mu\nu} + \frac{1}{2} m_\rho^2 \vec{b}_\mu \cdot \vec{b}^\mu - \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \left. \right] \\
& + \overline{\psi}_i i \gamma^0 \partial^0 \psi_i + \overline{\psi}_e i \gamma^0 \partial^0 \psi_e \\
& + \partial^0 \phi \partial^0 \phi - \Omega^{0\nu} \partial^0 V_\nu - \vec{B}^{0\nu} \cdot \partial^0 \vec{b}_\nu - F^{0\nu} \partial^0 A_\nu
\end{aligned} \tag{2.41}$$

## 2.2 APROXIMAÇÕES DE CAMPO MÉDIO E THOMAS-FERMI

As equações de movimento para os campos mesônicos que obtivemos na última seção são equações de campo não lineares, com soluções muito complicadas. Como esperamos que as constantes de acoplamento  $g_s$ ,  $g_v$  e  $g_\rho$  sejam grandes, também não podemos esperar utilizar métodos perturbativos para solucionar as equações. No entanto, existe uma aproximação que se torna cada vez mais válida conforme a densidade nuclear aumenta, a chamada aproximação de campo médio. Os termos de fonte no lado direito das equações de movimento aumentam com a densidade bariônica, e quando esses termos são grandes, os operadores de campo mesônicos e do campo eletromagnético podem ser substituídos pelos seus valores esperados. Para um sistema estático e uniforme, a invariância rotacional implica que os valores esperados das componentes espaciais dos campos quadridimensionais se anulam, restando somente as componentes tipo tempo. (SEROT et al., 1986. (Advances in nuclear physics, v.16)) Considerando também a invariância em relação a rotações em torno do terceiro eixo do espaço de isospin, somente a terceira componente isovetorial do campo do méson  $\rho$  permanece. (BUNCA; GMUCA, 2003) Isto pode ser escrito formalmente como:

$$\langle \hat{\phi} \rangle = \phi_0(x) \quad (2.42)$$

$$\langle \hat{V}^\mu \rangle = V_0(x) \delta_{\mu 0} \quad (2.43)$$

$$\langle \hat{b}_i^\mu \rangle = b_0(x) \delta_{\mu 0} \delta_{i3} \quad (2.44)$$

$$\langle \hat{A}^\mu \rangle = A_0(x) \delta_{\mu 0} \quad (2.45)$$

Com

$$\partial^0 \phi_0 = \partial^0 V_0 = \partial^0 b_0 = \partial^0 A_0 = 0 \quad (2.46)$$

Dessa forma, na aproximação de campo médio:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \frac{1}{2} \vec{\nabla} \phi_0 \cdot \vec{\nabla} \phi_0 + \frac{1}{2} m_s^2 \phi_0^2 + \frac{1}{3!} \kappa \phi^3 + \frac{1}{4!} \lambda \phi^4 \\
&\quad - \frac{1}{2} \vec{\nabla} V_0 \cdot \vec{\nabla} V_0 - \frac{1}{2} m_v^2 V_0^2 - \frac{1}{2} \vec{\nabla} b_0 \cdot \vec{\nabla} b_0 - \frac{1}{2} m_\rho^2 b_0^2 \\
&\quad - \frac{1}{2} \vec{\nabla} A_0 \cdot \vec{\nabla} A_0 + \bar{\psi}_i i \gamma^0 \partial^0 \psi_i + \bar{\psi}_e i \gamma^0 \partial^0 \psi_e
\end{aligned} \tag{2.47}$$

Onde utilizamos a relação:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{4} \Omega_{\mu\nu} \Omega^{\mu\nu} &= \frac{1}{4} (\partial_\mu V_\nu - \partial_\nu V_\mu) (\partial^\mu V^\nu - \partial^\nu V^\mu) \\
&= \frac{1}{2} (\partial_\mu V_\nu \partial^\mu V^\nu - \partial_\mu V_\nu \partial^\nu V^\mu) \\
&= \frac{1}{2} (\partial_\mu V_0 \partial^\mu V_0 - \partial_\mu V_0 \partial^0 V_0) \\
&= -\frac{1}{2} (\vec{\nabla} V_0 \cdot \vec{\nabla} V_0)
\end{aligned} \tag{2.48}$$

E relações similares para os demais tensores. Então, a partir das equações de movimento para o campo do nucleon e do eletron (2.19) e (2.22), calculadas na aproximao de campo medio, podemos escrever:

$$\begin{aligned}
i \gamma^0 \partial_0 \psi_i &= \{-i \vec{\gamma} \cdot \vec{\nabla} + \gamma^0 [g_v V_0 + \frac{g_\rho}{2} b_0 \tau_3 \\
&\quad + \frac{e}{2} (1 + \tau_3) A_0] + m^*\} \psi_i
\end{aligned} \tag{2.49}$$

$$i \gamma^0 \partial_0 \psi_e = [-i \vec{\gamma} \cdot \vec{\nabla} - \gamma^0 e A_0 + m_e] \phi_e \tag{2.50}$$

Ou seja,

$$\begin{aligned}
\bar{\psi}_i i \gamma^0 \partial_0 \psi_i &= \psi_i^\dagger \gamma^0 \{-i \vec{\gamma} \cdot \vec{\nabla} + \gamma^0 [g_v V_0 + \frac{g_\rho}{2} b_0 \tau_3 \\
&\quad + \frac{e}{2} (1 + \tau_3) A_0] + M^*\} \psi_i
\end{aligned} \tag{2.51}$$

$$\bar{\psi}_e i \gamma^0 \partial_0 \psi_e = \psi_e^\dagger \gamma^0 [-i \vec{\gamma} \cdot \vec{\nabla} - \gamma^0 e A_0 + m_e] \phi_e \tag{2.52}$$

Portanto, como  $\gamma^0 \vec{\gamma} = \vec{\alpha}$  e  $\gamma^0 = \beta$ , podemos escrever a hamilton-

niana como:

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \int d^3r \hat{\psi}_i^\dagger [-i\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + \beta(M - g_s\phi(\vec{r})) + g_v V_0(\vec{r}) + \frac{1}{2}g_\rho\tau_3 b_0(\vec{r}) \\
&\quad + e\frac{1+\tau_3}{2}A_0(\vec{r})] \hat{\psi}_i + \frac{1}{2} \left[ (\vec{\nabla}\phi(\vec{r}))^2 + m_s^2\phi^2(\vec{r}) \right] + \frac{\kappa}{6}\phi^3(\vec{r}) \\
&\quad + \frac{\lambda}{24}\phi^4(\vec{r}) - \frac{1}{2} \left[ (\vec{\nabla}V_0(\vec{r}))^2 + m_v^2V_0^2(\vec{r}) \right] \\
&\quad - \frac{1}{2} \left[ (\vec{\nabla}b_0(\vec{r}))^2 + m_\rho^2b_0^2(\vec{r}) \right] - \frac{1}{2} \left[ \vec{\nabla}A_0(\vec{r}) \right]^2 \\
&\quad + \hat{\psi}_e^\dagger \left[ -i\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + \beta m_e - eA_0(\vec{r}) \right] \hat{\psi}_e
\end{aligned} \tag{2.53}$$

Podemos também escrever as equações de movimento para os campos mesônicos e o campo eletromagnético na aproximação de campo médio, a partir das que tínhamos obtido anteriormente, usando  $\bar{\psi}_i = \gamma^0\psi_i^\dagger$ :

$$(-\vec{\nabla}^2 + m_s^2)\phi = g_s \langle \hat{\bar{\psi}}_i \hat{\psi}_i \rangle - \frac{1}{2}\kappa\phi^2 - \frac{1}{6}\lambda\phi^3 \tag{2.54}$$

$$(-\vec{\nabla}^2 + m_v^2)V_0 = g_v \langle \hat{\psi}_i^\dagger \hat{\psi}_i \rangle \tag{2.55}$$

$$(-\vec{\nabla}^2 + m_\rho^2)b_0 = \frac{g_\rho}{2} \langle \hat{\psi}_i^\dagger \tau_3 \hat{\psi}_i \rangle \tag{2.56}$$

$$-\vec{\nabla}^2 A_0 = e \left\langle \hat{\psi}_i^\dagger \frac{1+\tau_3}{2} \hat{\psi}_i \right\rangle - e \langle \hat{\psi}_e^\dagger \hat{\psi}_e \rangle \tag{2.57}$$

Onde os valores esperados acima, que correspondem a densidades, dependem da posição espacial. Finalmente, realizamos a aproximação de Thomas-Fermi, identificando os operadores de campo da seguinte maneira:

$$\rho(\vec{r}) = \rho_p(\vec{r}) + \rho_n(\vec{r}) = \langle \hat{\psi}_i^\dagger \hat{\psi}_i \rangle \tag{2.58}$$

$$\rho_3(\vec{r}) = \rho_p(\vec{r}) - \rho_n(\vec{r}) = \langle \hat{\bar{\psi}}_i \tau_3 \hat{\psi}_i \rangle \tag{2.59}$$

$$\rho_s(\vec{r}) = \rho_{s_p}(\vec{r}) + \rho_{s_n}(\vec{r}) = \langle \hat{\bar{\psi}}_i \hat{\psi}_i \rangle \tag{2.60}$$



$$\rho_e(\vec{r}) = \langle \hat{\psi}_e^\dagger \hat{\psi}_e \rangle \quad (2.61)$$

Escrevemos as equações de movimento em função das densidades:

$$\left(-\vec{\nabla}^2 + m_s^2\right) \phi = g_s \rho_s(\vec{r}) - \frac{1}{2} \kappa \phi^2 - \frac{1}{6} \lambda \phi^3 \quad (2.62)$$

$$\left(-\vec{\nabla}^2 + m_v^2\right) V_0 = g_v \rho(\vec{r}) \quad (2.63)$$

$$\left(-\vec{\nabla}^2 + m_\rho^2\right) b_0 = \frac{g_\rho}{2} \rho_3(\vec{r}) \quad (2.64)$$

$$-\vec{\nabla}^2 A_0 = e (\rho_p(\vec{r}) - \rho_e(\vec{r})) \quad (2.65)$$



### 3 EXPANSÃO DE WIGNER-KIRKWOOD

Um método sistemático de derivar a aproximação Thomas-Fermi estendida (TFE) é utilizar a expansão Wigner-Kirkwood (WK) do propagador em ordens de  $\hbar$ . Para realizar essa expansão, é necessário conhecer a transformada de Weyl do comutador que aparece na equação de Bloch para a hamiltoniana. A transformada de Weyl é definida no âmbito da formulação de Weyl-Wigner da mecânica quântica. Nesta seção, exploraremos essa formulação e definiremos a transformada de Weyl, com a intenção de obter a transformada de um produto de operadores quaisquer, e a partir daí, das suas relações de comutação e anticomutação segundo o método descrito na referência (MARCHIOLLI, 2002) e abordado a seguir neste capítulo.

Começamos caracterizando as relações de comutação associadas aos operadores  $\hat{Q}$ ,  $\hat{P}$  e  $\hat{1}$  em uma álgebra de Weyl-Heisenberg, ou seja, para um sistema quântico de uma partícula realizando movimento unidimensional:

$$[\hat{Q}, \hat{Q}] = [\hat{P}, \hat{P}] = [\hat{Q}, \hat{1}] = [\hat{P}, \hat{1}] = 0, \text{ e } [\hat{Q}, \hat{P}] = i\hbar\hat{1} \quad (3.1)$$

Os autovetores são definidos pelas equações:

$$\hat{Q}|q\rangle = q|q\rangle, \hat{P}|p\rangle = p|p\rangle, \hat{1}|q\rangle = |q\rangle, \hat{1}|p\rangle = |p\rangle, \quad (3.2)$$

As bases dos autovetores,  $q$  e  $p$ , devem ser ortonormais e completas, satisfazendo portanto as relações:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq |q\rangle \langle q| = \mathbf{1}, \int_{-\infty}^{\infty} dp |p\rangle \langle p| = \mathbf{1} \quad (3.3)$$

$$\langle q|q'\rangle = \delta(q - q'), \langle p|p'\rangle = \delta(p - p') \quad (3.4)$$

Além disso, o produto interno entre os autovetores da base é

$$\langle q|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}pq\right) \quad (3.5)$$

Utilizando a relação de completudeza, escrevemos a seguinte identidade para um operador arbitrário  $\hat{F}$ :

$$\hat{F} = \int_{-\infty}^{\infty} dp' dp'' dq' dq'' |q''\rangle \langle q''|p''\rangle \langle p''|\hat{F}|p'\rangle \langle p'|q'\rangle \langle q'| \quad (3.6)$$

E usando a expressão para o produto escalar:

$$\hat{F} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp' dp'' dq' dq''}{2\pi\hbar} \exp \left[ \frac{i}{\hbar}(p''q'' - p'q') \right] \langle p''|\hat{F}|p'\rangle |q''\rangle \langle q'| \quad (3.7)$$

Realizamos então uma mudança de variáveis:

$$2p = p' + p'', \quad 2q = q' + q'', \quad u = p'' - p', \quad v = q'' - q' \quad (3.8)$$

$$p' = p - \frac{u}{2}, \quad p'' = p + \frac{u}{2}, \quad q' = q - \frac{v}{2}, \quad q'' = q + \frac{v}{2} \quad (3.9)$$

Calculamos o jacobiano:

$$\begin{aligned} dp' dp'' dq' dq'' &= J \left( \begin{matrix} p' \\ p, u \end{matrix} \right) J \left( \begin{matrix} q' \\ q, v \end{matrix} \right) dp dq du dv \\ &= \left| \begin{matrix} 1 & -\frac{1}{2} \\ 1 & \frac{1}{2} \end{matrix} \right| \left| \begin{matrix} 1 & -\frac{1}{2} \\ 1 & \frac{1}{2} \end{matrix} \right| dp dq du dv \\ &= dp dq du dv \end{aligned} \quad (3.10)$$

Notamos também que:

$$\begin{aligned} p''q'' - p'q' &= (p + u/2)(q + v/2) - (p - u/2)(q - v/2) \\ pq + \frac{pv}{2} - \frac{qu}{2} + \frac{uv}{4} - pq + \frac{qu}{2} + \frac{pv}{2} - \frac{uv}{4} &= qu + pv \end{aligned} \quad (3.11)$$

### 3.1 FORMULAÇÃO DE WEYL-WIGNER DA MECÂNICA QUÂNTICA

Da maneira que foi apresentada anteriormente, podemos reescrever o operador  $\hat{F}$  nas novas coordenadas  $p, q, u, v$ . Isto leva à representação do operador na formulação de Weyl-Wigner da Mecânica Quântica no espaço de fase.

$$\begin{aligned} \hat{F} = & \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp dq du dv}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{i}{\hbar}qu\right) \langle p + u/2 | \hat{F} | p - u/2 \rangle \\ & \exp\left(\frac{i}{\hbar}pv\right) |q + v/2\rangle \langle q - v/2| \end{aligned} \quad (3.12)$$

Ou então:

$$\hat{F} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp dq}{2\pi\hbar} f_W(p, q) \hat{\Delta}(p, q) \quad (3.13)$$

Onde a função

$$f_W(p, q) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} du \exp\left(\frac{i}{\hbar}qu\right) \langle p + u/2 | \hat{F} | p - u/2 \rangle \quad (3.14)$$

é a transformada de Weyl do operador  $\hat{F}$ , e

$$\hat{\Delta}(p, q) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dv \exp\left(\frac{i}{\hbar}pv\right) |q + v/2\rangle \langle q - v/2| \quad (3.15)$$

é um operador hermitiano que representa uma base no espaço dos operadores, de forma que a expressão (3.13) pode ser considerada como uma expansão do operador  $\hat{F}$  em uma outra base.

Nesta forma, não estamos tratando igualmente as variáveis  $p$  e  $q$ , pois ao escolher a ordem dos conjuntos na mudança de variáveis, privilegiamos uma delas. De fato, o processo utilizado não é único, e é possível construir o operador  $\hat{\Delta}(p, q)$  de forma simétrica. Para tal, notamos o seguinte:

$$\langle p|q + v/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left[\frac{-i}{\hbar}p(q + v/2)\right] = \exp\left(\frac{-i}{\hbar}pv\right) \langle p|q - v/2\rangle \quad (3.16)$$

Portanto,

$$|q + v/2\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}v\hat{P}\right) |q - v/2\rangle \quad (3.17)$$

Isto pode ser notado fazendo o produto de ambos os lados da equação por  $\langle p|$  à esquerda. Agora, inserindo na equação (3.15)

$$\hat{\Delta}(p, q) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dv \exp\left(\frac{i}{\hbar}pv\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{P}v\right) |q - v/2\rangle \langle q - v/2| \quad (3.18)$$

Onde identificamos o operador de projeção  $|q - v/2\rangle \langle q - v/2|$ , que pode ser reescrito através da identidade

$$|q\rangle \langle q| = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} du \exp\left[\frac{i}{\hbar}(q - \hat{q})u\right] \quad (3.19)$$

Com isso, o operador  $\hat{\Delta}(p, q)$  fica

$$\hat{\Delta}(p, q) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du dv}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p - \hat{P})v\right] \exp\left[\frac{i}{\hbar}(q - v/2 - \hat{Q})u\right] \quad (3.20)$$

Dada a relação de Baker-Campbell-Hausdorff,

$$\begin{aligned} \exp(\hat{A} + \hat{B}) &= \exp(\hat{A}) \exp(\hat{B}) \exp\left(-\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]\right) \\ &= \exp(\hat{B}) \exp(\hat{A}) \exp\left(\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]\right) \end{aligned} \quad (3.21)$$

que é válida sempre que os operadores comutam com o seu comutador, podemos reescrever o o integrando da equação (3.20) como

$$\begin{aligned}
& \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (p - \hat{P})v \right] \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (q - v/2 - \hat{Q})u \right] \\
= & \exp \left[ \frac{i}{\hbar} [(p - \hat{P})v + (q - v/2 - \hat{Q})u] \right] \\
& \times \exp \left\{ \frac{1}{2\hbar^2} [(p - \hat{P})v, (q - v/2 - \hat{Q})u] \right\} \\
= & \exp \left[ \frac{i}{\hbar} [(p - \hat{P})v + (q - v/2 - \hat{Q})u] \right] \exp \left( \frac{1}{2\hbar^2} i\hbar uv \right) \\
= & \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [(p - \hat{P})v + (q - \hat{Q})u] \right\} \tag{3.22}
\end{aligned}$$

E finalmente, obtemos

$$\hat{\Delta}(p, q) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du dv}{2\pi\hbar} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [(p - \hat{P})v + (q - \hat{Q})u] \right\} \tag{3.23}$$

Desta expressão, podemos obter uma forma para o operador  $\hat{\Delta}(p, q)$  que é a contrapartida da equação (3.15),

$$\hat{\Delta}(p, q) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} du \exp \left( \frac{i}{\hbar} qu \right) |p - u/2\rangle \langle p + u/2| \tag{3.24}$$

Para mostrar que esta equação é de fato equivalente à (3.15), fazemos um procedimento análogo ao utilizado para obter a equação (3.23) da equação (3.15)

$$\begin{aligned}
\hat{\Delta}(p, q) &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} du \exp\left(\frac{i}{\hbar}qu\right) |p - u/2\rangle \langle p - u/2| \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{Q}u\right) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du dv}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(q - \hat{Q})u\right] \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(p + \frac{u}{2} - \hat{P}\right)v\right] \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du dv}{2\pi\hbar} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}[(p - \hat{P})v + (q - \hat{Q})u]\right\} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\frac{uv}{2}\right) \\
&\quad \times [\exp\{-\frac{1}{2\hbar^2}[(p + \frac{u}{2} - \hat{P})v + (q - \hat{Q})u] \\
&\quad - (q - \hat{Q})u(p + \frac{u}{2} - \hat{P})\}] \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du dv}{2\pi\hbar} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}[(p - \hat{P})v + (q - \hat{Q})u]\right\} \\
&\quad \times \exp\left(\frac{i}{\hbar}\frac{uv}{2}\right) \exp\left(-\frac{1}{2\hbar^2}i\hbar uv\right) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du dv}{2\pi\hbar} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}[(p - \hat{P})v + (q - \hat{Q})u]\right\} \quad (3.25)
\end{aligned}$$

Um método para se obter o operador  $\hat{F}$  a partir da sua transformada de Weyl é dado a seguir. Consideremos a expressão para o operador  $\hat{\Delta}(p, q)$  dada adiante. Para obtê-la, basta utilizar a segunda igualdade na relação de Baker-Campbell-Hausdorff (3.21) e aplicá-la à equação (3.20).

$$\begin{aligned}
\hat{\Delta}(p, q) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du dv}{2\pi\hbar} \left\{ \exp\left(\frac{i}{\hbar}[(q - \hat{Q})v]\right) \right. \\
&\quad \left. \times \exp\left(\frac{i}{\hbar}[(p - \hat{P})v]\right) \exp\left(\frac{i}{2\hbar}uv\right) \right\} \quad (3.26)
\end{aligned}$$

Vejamos então a seguinte igualdade

$$\begin{aligned}
&\frac{\hbar}{2i} \frac{\partial^2}{\partial p \partial q} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(q - \hat{Q})u\right] \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p - \hat{P})v\right] \\
&= \frac{i}{2\hbar} uv \exp\left[\frac{i}{\hbar}(q - \hat{Q})u\right] \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p - \hat{P})v\right] \quad (3.27)
\end{aligned}$$

Daí podemos constatar que o integrando na equação (3.26) pode ser escrito da forma



$$\begin{aligned}
& \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left( \frac{i}{2\hbar} uv \right)^k \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (q - \hat{Q})u \right] \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (p - \hat{P})v \right] \\
&= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left( \frac{\hbar}{2i} \frac{\partial^2}{\partial p \partial q} \right)^k \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (q - \hat{Q})u \right] \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (p - \hat{P})v \right] \quad (3.28)
\end{aligned}$$

E, portanto,

$$\begin{aligned}
& \exp \left( \frac{\hbar}{2i} \frac{\partial^2}{\partial p \partial q} \right) \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (q - \hat{Q})u \right] \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (p - \hat{P})v \right] \\
&= \exp \left( \frac{i}{2\hbar} uv \right) \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (q - \hat{Q})u \right] \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (p - \hat{P})v \right] \quad (3.29)
\end{aligned}$$

Substituindo na expressão (3.23), obtemos

$$\begin{aligned}
\hat{\Delta}(p, q) &= \exp \left( \frac{\hbar}{2i} \frac{\partial^2}{\partial p \partial q} \right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du dv}{2\pi\hbar} \exp \left( \frac{i}{\hbar} [(q - \hat{Q})v] \right) \\
&\quad \times \exp \left( \frac{i}{\hbar} [(p - \hat{P})v] \right) \\
&= 2\pi\hbar \exp \left( \frac{\hbar}{2i} \frac{\partial^2}{\partial p \partial q} \right) \delta(q - \hat{Q}) \delta(p - \hat{P}) \quad (3.30)
\end{aligned}$$

Utilizando a relação

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \frac{d^m}{dx^m} \delta(x) &= (-1)^m \frac{d^m}{dx^m} f(x) \Big|_{x=0} \\
&= (-1)^m \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[ \frac{d^m}{dx^m} f(x) \right] \delta(x) \quad (3.31)
\end{aligned}$$

Ficamos com a seguinte equação para o operador  $\hat{F}$

$$\begin{aligned}
\hat{F} &= \int_{-\infty}^{\infty} dp dq f_W(p, q) \left[ \exp\left(\frac{\hbar}{2i} \frac{\partial^2}{\partial p \partial q}\right) \delta(q - \hat{Q}) \delta(p - \hat{P}) \right] \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dp dq \left[ \exp\left(\frac{\hbar}{2i} \frac{\partial^2}{\partial p \partial q}\right) f_W(p, q) \right] \delta(q - \hat{Q}) \delta(p - \hat{P})
\end{aligned} \tag{3.32}$$

Uma característica interessante do formalismo que estamos descrevendo é que é possível obter uma função clássica que corresponde ao operador  $\hat{F}$  através da sua transformada de Weyl. A função  $f_W(p, q)$  pode, em geral, ser expressa como uma série de potências de  $\hbar$ , de maneira que realizando o limite  $\hbar \rightarrow 0$ , obtemos a função da Mecânica Clássica correspondente.

$$f_{cl}(p, q) = \lim_{\hbar \rightarrow 0} f_W(p, q) \tag{3.33}$$

### 3.2 PROPRIEDADES DO OPERADOR DELTA

O operador  $\hat{\Delta}(p, q)$  representa parte importante no formalismo de Weyl-Wigner, e podemos obter uma série de propriedades úteis para este operador. Primeiramente, vamos notar que o operador  $\hat{\Delta}(p, q)$  pode ser ele mesmo expandido da seguinte forma

$$\hat{\Delta}(p', q') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp dq}{2\pi\hbar} f_W(p, q) \hat{\Delta}(p, q) \tag{3.34}$$

onde  $f_W(p, q) = 2\pi\hbar\delta(p-p')\delta(q-q')$ . Também podemos calcular certos elementos de matriz utilizando as formas do operador  $\hat{\Delta}(p, q)$  obtidas anteriormente.

$$\begin{aligned}
\langle q' | \hat{\Delta}(p, q) | q'' \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} du \exp\left(\frac{i}{\hbar}qu\right) \langle q' | p - u/2 \rangle \langle p + u/2 | q'' \rangle \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} du \exp\left(\frac{i}{\hbar}qu\right) \exp\left[\frac{i}{\hbar}q'\left(p - \frac{u}{2}\right)\right] \\
&\quad \times \exp\left[-\frac{i}{\hbar}q''\left(p + \frac{u}{2}\right)\right] \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} du \left\{ \exp\left[\frac{i}{\hbar}p(q' - q'')\right] \right. \\
&\quad \left. \times \exp\left[\frac{i}{\hbar}u\left(q - \frac{q' + q''}{2}\right)\right] \right\} \\
&= \exp\left[\frac{i}{\hbar}p(q' - q'')\right] \delta\left(q - \frac{q' + q''}{2}\right) \quad (3.35)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle p' | \hat{\Delta}(p, q) | p'' \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dv \exp\left(\frac{i}{\hbar}pv\right) \langle p' | q + v/2 \rangle \langle q - v/2 | p'' \rangle \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dv \exp\left(\frac{i}{\hbar}pv\right) \exp\left[-\frac{i}{\hbar}p'\left(q + \frac{v}{2}\right)\right] \\
&\quad \times \exp\left[\frac{i}{\hbar}p''\left(q - \frac{v}{2}\right)\right] \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dv \left\{ \exp\left[-\frac{i}{\hbar}q(p' - p'')\right] \right. \\
&\quad \left. \times \exp\left[\frac{i}{\hbar}v\left(p - \frac{p' + p''}{2}\right)\right] \right\} \\
&= \exp\left[-\frac{i}{\hbar}q(p' - p'')\right] \delta\left(p - \frac{p' + p''}{2}\right) \quad (3.36)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle q' | \hat{\Delta}(p, q) | p' \rangle &= 2\pi\hbar \exp\left(\frac{\hbar}{2i} \frac{\partial^2}{\partial p \partial q}\right) \langle q' | \delta(q - \hat{Q}) \delta(p - \hat{P}) | p' \rangle \\
&= 2\pi\hbar \exp\left(\frac{\hbar}{2i} \frac{\partial^2}{\partial p \partial q}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dq'' \{ \langle q' | \delta(q - \hat{Q}) | q'' \rangle \\
&\quad \times \langle q'' | \delta(p - \hat{P}) | p' \rangle \} \\
&= 2\pi\hbar \exp\left(\frac{\hbar}{2i} \frac{\partial^2}{\partial p \partial q}\right) \delta(p - p') \\
&\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq''}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p' q''\right) \delta(q - q'') \delta(q' - q'') \\
&= \sqrt{2\pi\hbar} \left(\frac{i}{\hbar} p' q'\right) \exp\left(\frac{\hbar}{2i} \frac{\partial^2}{\partial p \partial q}\right) \delta(p - p') \delta(q - q')
\end{aligned} \tag{3.37}$$

Já a integração do operador  $\hat{\Delta}(p, q)$  nas variáveis  $p$  e  $q$  dão como resultado os projetores nos espaços de posição e momento:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \hat{\Delta}(p, q) = |q\rangle \langle q| \tag{3.38}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi\hbar} \hat{\Delta}(p, q) = |p\rangle \langle p| \tag{3.39}$$

É possível também escrever a transformada de Weyl de um operador  $\hat{F}$  de uma forma compacta. Observando que

$$Tr \hat{F} = \int dp' \langle p' | \hat{F} | p' \rangle \tag{3.40}$$

chegamos ao seguinte resultado

$$\begin{aligned}
\langle p'' | \hat{F} | p''' \rangle &= Tr \left( \hat{F} | p''' \rangle \langle p'' | \right) \\
&= \int dp' \langle p' | \hat{F} | p''' \rangle \langle p'' | p' \rangle \\
&= \langle p'' | \hat{F} | p''' \rangle
\end{aligned} \tag{3.41}$$

De maneira que podemos escrever, a partir da equação (3.24):

$$\begin{aligned}
Tr \left[ \hat{F} \hat{\Delta}(p, q) \right] &= \int_{-\infty}^{\infty} du dp' \exp \left( \frac{i}{\hbar} qu \right) \langle p' | \hat{F} | p - u/2 \rangle \langle p + u/2 | p' \rangle \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} du \exp \left( \frac{i}{\hbar} qu \right) \langle p + u/2 | \hat{F} | p - u/2 \rangle \\
&= f_W(p, q)
\end{aligned} \tag{3.42}$$

Se tomamos a transformada de Wigner do operador densidade correspondente a um dado sistema, ou seja, identificamos  $\hat{F} = \hat{\rho}$ , temos o que é chamado de função de Wigner, definida desta maneira pela seguinte equação:

$$W(p, q) = \int_{-\infty}^{\infty} dv \exp \left( \frac{i}{\hbar} pv \right) \langle q - v/2 | \hat{\rho} | q + v/2 \rangle \tag{3.43}$$

E desta forma, utilizando as equações (3.38) e (3.39), obtemos

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} W(p, q) = |\Psi(q)|^2 \tag{3.44}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq}{2\pi\hbar} W(p, q) = |\Phi(p)|^2 \tag{3.45}$$

Ou seja, integrando a função de Wigner nas variáveis  $p$  e  $q$ , obtemos as densidades de probabilidades referentes às funções de onda de posição e momento.

Para os nossos propósitos, é fundamental obter as transformadas de Weyl das relações de comutação e anticomutação de dois operadores arbitrários. Para isso, vamos explorar inicialmente a forma do traço do produto de operadores  $\hat{\Delta}(p, q)$ , pois ela será necessária para calcular a transformada de Weyl de um produto de operadores arbitrários. Da definição do traço e da equação (3.15), temos:

$$\begin{aligned}
Tr \left[ \hat{\Delta}(p, q) \right] &= \int_{-\infty}^{\infty} dv dp' \exp \left( \frac{i}{\hbar} pv \right) \langle p' | q + v/2 \rangle \langle q - v/2 | p' \rangle \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dv \exp \left( \frac{i}{\hbar} pv \right) \langle q - v/2 | q + v/2 \rangle = 1
\end{aligned} \tag{3.46}$$

Para o produto de dois operadores  $\hat{\Delta}(p, q)$ , inserindo um conjunto completo no integrando e utilizando a propriedade dos operadores

$\hat{\Delta}(p, q)$  dada na equação (3.35), escrevemos:

$$\begin{aligned}
Tr \left[ \hat{\Delta}(p_1, q_1) \hat{\Delta}(p_2, q_2) \right] &= \int_{-\infty}^{\infty} dq' \langle q' | \hat{\Delta}(p_1, q_1) \hat{\Delta}(p_2, q_2) | q' \rangle \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dq' dq'' \{ \langle q' | \hat{\Delta}(p_1, q_1) | q'' \rangle \\
&\quad \times \langle q'' | \hat{\Delta}(p_2, q_2) | q' \rangle \} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dq' dq'' \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (q' - q'')(p_1 - p_2) \right] \\
&\quad \times \delta \left( q_1 - \frac{q' + q''}{2} \right) \delta \left( q_2 - \frac{q' + q''}{2} \right)
\end{aligned} \tag{3.47}$$

Fazemos uma substituição de variáveis  $q' + q'' = 2x_1$  e  $q' - q'' = x_2$ , com jacobiano igual a um, e obtemos a equação

$$\begin{aligned}
Tr \left[ \hat{\Delta}(p_1, q_1) \hat{\Delta}(p_2, q_2) \right] &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 dx_2 \{ \exp \left[ \frac{i}{\hbar} x_2 (p_1 - p_2) \right] \\
&\quad \times \delta(q_1 - x_1) \delta(q_2 - x_1) \} \\
&= 2\pi\hbar \delta(p_1 - p_2) \delta(q_1 - q_2)
\end{aligned} \tag{3.48}$$

Para o produto de três operadores  $\hat{\Delta}(p, q)$ , realizamos um procedimento muito similar:

$$\begin{aligned}
&Tr \left[ \hat{\Delta}(p_1, q_1) \hat{\Delta}(p_2, q_2) \hat{\Delta}(p_3, q_3) \right] \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dq' \langle q' | \hat{\Delta}(p_1, q_1) \hat{\Delta}(p_2, q_2) \hat{\Delta}(p_3, q_3) | q' \rangle \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dq' dq'' \langle q' | \hat{\Delta}(p_1, q_1) | q'' \rangle \langle q'' | \hat{\Delta}(p_2, q_2) | q''' \rangle \langle q''' | \hat{\Delta}(p_3, q_3) | q' \rangle \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dq' dq'' dq''' \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [p_1(q' - q'') + p_2(q'' - q''') + p_3(q''' - q')] \right\} \\
&\quad \times \delta \left( q_1 - \frac{q' + q''}{2} \right) \delta \left( q_2 - \frac{q'' + q'''}{2} \right) \delta \left( q_3 - \frac{q''' + q'}{2} \right)
\end{aligned} \tag{3.49}$$

Fazemos a substituição  $q' + q'' = 2x_1$ ,  $q'' + q''' = 2x_2$  e  $q''' + q' =$

$2x_3$ . Observamos o cálculo do jacobiano:

$$\begin{aligned}
 dq' dq'' dq''' &= J \left( \frac{q', q'', q'''}{x_1, x_2, x_3} \right) dx_1 dx_2 dx_3 \\
 &= \begin{vmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 \end{vmatrix} dx_1 dx_2 dx_3 \\
 &= 4 dx_1 dx_2 dx_3
 \end{aligned} \tag{3.50}$$

Desta maneira,

$$\begin{aligned}
 &Tr \left[ \hat{\Delta}(p_1, q_1) \hat{\Delta}(p_2, q_2) \hat{\Delta}(p_3, q_3) \right] \\
 &= 4 \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 dx_2 dx_3 \delta(q_1 - x_1) \delta(q_2 - x_2) \delta(q_3 - x_3) \\
 &\quad \times \exp \left\{ \frac{2i}{\hbar} [(x_1 - x_3)(p_2 - p_3) - (x_2 - x_3)(p_1 - p_3)] \right\} \\
 &= 4 \exp \left\{ \frac{2i}{\hbar} [(q_1 - q_3)(p_2 - p_3) - (q_2 - q_3)(p_1 - p_3)] \right\}
 \end{aligned} \tag{3.51}$$

### 3.3 TRANSFORMADA DE WEYL DO PRODUTO DE DOIS OPERADORES ARBITRÁRIOS

Estamos agora com capacidade para calcular a transformada de Weyl do produto de dois operadores arbitrários  $\hat{A}$  e  $\hat{B}$ . Partimos da representação dada na equação (3.13), agora para o produto  $\hat{A}\hat{B}$ :

$$\hat{A}\hat{B} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_1 dq_1 dp_2 dq_2}{(2\pi\hbar)^2} A_W(p_1, q_1) \hat{\Delta}(p_1, q_1) B_W(p_2, q_2) \hat{\Delta}(p_2, q_2) \tag{3.52}$$

Para calcular a transformada de Weyl, utilizamos a definição (3.42) e o resultado do traço de três operadores delta dado pela equação (3.51):

$$\begin{aligned}
(\hat{A}\hat{B})_W &= Tr \left[ \hat{A}\hat{B}\hat{\Delta}(p, q) \right] \\
&= 4 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_1 dq_1 dp_2 dq_2}{(2\pi\hbar)^2} A_W(p_1, q_1) B_W(p_2, q_2) \\
&\quad \times \exp \left\{ \frac{2i}{\hbar} [(q_1 - q)(p_2 - p) - (q_2 - q)(p_1 - p)] \right\}
\end{aligned} \tag{3.53}$$

Fazemos a mudança de variáveis  $\bar{p} = p_2 - p$ ,  $\bar{q} = q_2 - q$ , obtendo:

$$\begin{aligned}
(\hat{A}\hat{B})_W &= 4 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_1 dq_1 d\bar{p} d\bar{q}}{(2\pi\hbar)^2} A_W(p_1, q_1) B_W(\bar{p} + p, \bar{q} + q) \\
&\quad \times \exp \left\{ \frac{2i}{\hbar} [\bar{p}(q_1 - q) - \bar{q}(p_1 - p)] \right\}
\end{aligned} \tag{3.54}$$

Realizando a expansão em série de Taylor de  $B_W(\bar{p} + p, \bar{q} + q)$  em torno de  $B_W(p, q)$ , chega-se a:

$$\begin{aligned}
(\hat{A}\hat{B})_W &= 4 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_1 dq_1 d\bar{p} d\bar{q}}{(2\pi\hbar)^2} A_W(p_1, q_1) \\
&\quad \times \exp \left\{ \frac{2i}{\hbar} [\bar{p}(q_1 - q) - \bar{q}(p_1 - p)] \right\} \exp \left[ \bar{p} \frac{\partial}{\partial p} + \bar{q} \frac{\partial}{\partial q} \right] B_W(p, q)
\end{aligned} \tag{3.55}$$

No desenvolvimento da série da transformada de Weyl  $B_W(\bar{p} + p, \bar{q} + q)$ , os termos em  $\bar{p}$  e  $\bar{q}$  podem ser vistos, respectivamente, como tendo originado-se em derivações tais como:

$$\begin{aligned}
&-\frac{\hbar}{2i} \frac{\partial}{\partial q} \exp \left\{ \frac{2i}{\hbar} [\bar{p}(q_1 - q) - \bar{q}(p_1 - p)] \right\} \\
&\frac{\hbar}{2i} \frac{\partial}{\partial p} \exp \left\{ \frac{2i}{\hbar} [\bar{p}(q_1 - q) - \bar{q}(p_1 - p)] \right\}
\end{aligned}$$

Portanto,  $\bar{p}$  e  $\bar{q}$  podem ser substituídos pelos operadores diferenciais dados acima, atuando na primeira exponencial. Dessa maneira, a equação (3.55) fica:



$$\begin{aligned}
(\hat{A}\hat{B})_W &= 4 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_1 dq_1 d\bar{p} d\bar{q}}{(2\pi\hbar)^2} A_W(p_1, q_1) \\
&\quad \times \exp \left\{ \frac{2i}{\hbar} [\bar{p}(q_1 - q) - \bar{q}(p_1 - p)] \right\} \\
&\quad \times \exp \left[ \frac{\hbar}{2i} \left( \frac{\partial^{\leftarrow}}{\partial p} \frac{\partial^{\rightarrow}}{\partial q} - \frac{\partial^{\leftarrow}}{\partial q} \frac{\partial^{\rightarrow}}{\partial p} \right) \right] B_W(p, q) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dp_1 dq_1 A_W(p_1, q_1) \delta(p_1 - p) \delta(q_1 - q) \\
&\quad \times \exp \left[ \frac{\hbar}{2i} \left( \frac{\partial^{\leftarrow}}{\partial p} \frac{\partial^{\rightarrow}}{\partial q} - \frac{\partial^{\leftarrow}}{\partial q} \frac{\partial^{\rightarrow}}{\partial p} \right) \right] B_W(p, q) \\
&= A_W(p, q) \exp \left[ \frac{\hbar}{2i} \left( \frac{\partial^{\leftarrow}}{\partial p} \frac{\partial^{\rightarrow}}{\partial q} - \frac{\partial^{\leftarrow}}{\partial q} \frac{\partial^{\rightarrow}}{\partial p} \right) \right] B_W(p, q)
\end{aligned} \tag{3.56}$$

Podemos utilizar uma notação alternativa:

$$(\hat{A}\hat{B})_W = \exp \left[ \frac{\partial^{(A)}}{\partial p} \frac{\partial^{(B)}}{\partial q} - \frac{\partial^{(A)}}{\partial q} \frac{\partial^{(B)}}{\partial p} \right] A_W(p, q) B_W(p, q) \tag{3.57}$$

Temos finalmente condições de calcular as transformadas de Weyl do comutador e do anticomutador de dois operadores arbitrários:

$$\begin{aligned}
([\hat{A}, \hat{B}])_W &= \left\{ \exp \left[ \frac{-i\hbar}{2} \left( \frac{\partial^{(A)}}{\partial p} \frac{\partial^{(B)}}{\partial q} - \frac{\partial^{(A)}}{\partial q} \frac{\partial^{(B)}}{\partial p} \right) \right] \right. \\
&\quad \left. - \exp \left[ \frac{i\hbar}{2} \left( \frac{\partial^{(A)}}{\partial p} \frac{\partial^{(B)}}{\partial q} - \frac{\partial^{(A)}}{\partial q} \frac{\partial^{(B)}}{\partial p} \right) \right] \right\} \\
&\quad \times A_W(p, q) B_W(p, q) \\
&= 2i \operatorname{sen} \left[ \frac{\hbar}{2} \left( \frac{\partial^{(A)}}{\partial p} \frac{\partial^{(B)}}{\partial q} - \frac{\partial^{(A)}}{\partial q} \frac{\partial^{(B)}}{\partial p} \right) \right] A_W(p, q) B_W(p, q)
\end{aligned} \tag{3.58}$$

$$\begin{aligned}
(\{\hat{A}, \hat{B}\})_W &= \left\{ \exp \left[ \frac{-i\hbar}{2} \left( \frac{\partial^{(A)}}{\partial p} \frac{\partial^{(B)}}{\partial q} - \frac{\partial^{(A)}}{\partial q} \frac{\partial^{(B)}}{\partial p} \right) \right] \right. \\
&\quad \left. + \exp \left[ \frac{i\hbar}{2} \left( \frac{\partial^{(A)}}{\partial p} \frac{\partial^{(B)}}{\partial q} - \frac{\partial^{(A)}}{\partial q} \frac{\partial^{(B)}}{\partial p} \right) \right] \right\} \\
&\quad \times A_W(p, q) B_W(p, q) \\
&= 2 \cos \left[ \frac{\hbar}{2} \left( \frac{\partial^{(A)}}{\partial p} \frac{\partial^{(B)}}{\partial q} - \frac{\partial^{(A)}}{\partial q} \frac{\partial^{(B)}}{\partial p} \right) \right] A_W(p, q) B_W(p, q)
\end{aligned} \tag{3.59}$$

Podemos notar que o termo de ordem mais baixa da expansão (3.58) corresponde aos parênteses de Poisson das transformadas de Weyl de A e B, multiplicados por  $i\hbar$ , e o da expansão (3.59) ao produto delas multiplicado por 2. Isso significa que é possível encontrar um análogo clássico da equação de von Neumann-Liouville, que é a equação de Liouville da mecânica clássica. Dessa forma mostra-se que a dinâmica quântica tende à dinâmica clássica quando  $\hbar$  tende a 0. (MARCHIOLLI, 2002)

## 4 MÉTODO DE THOMAS-FERMI ESTENDIDO RELATIVÍSTICO

Pretendemos nesta seção realizar a expansão em potências de  $\hbar$  do propagador de Bloch associado à hamiltoniana de Dirac, como é realizado nas referências (CENTELLES et al., 1990; CENTELLES, 1992). Uma expansão para o caso não-relativístico é realizada na referência (RING; SCHUCK, 1980). Para hamiltonianas cuja contrapartida clássica é um escalar, a expansão em potências de  $\hbar$  pode ser realizada de várias maneiras, que podem ser consideradas equivalentes. Já para hamiltonianas com estrutura matricial, como no caso relativístico, estes métodos não funcionam, pois produzem uma série de potências infinita para cada ordem da expansão, e ainda misturam estados de energia positiva e negativa. No caso relativístico, o cálculo fica mais complexo devido à não-comutatividade das matrizes que compõem a hamiltoniana, e se torna necessário realizar a soma da série de potências independentemente para soluções de energia positiva e negativa, como é feito no método que utilizamos.

Em mecânica quântica, o problema descrito por uma hamiltoniana de partícula única independente do tempo tem um propagador associado dado por:

$$\hat{G} = \exp(-\eta\hat{H}) \quad (4.1)$$

Onde  $\eta$  é um parâmetro proporcional ao tempo, mas que também pode ser interpretado como uma temperatura inversa. A equação de Bloch para o propagador é obtida diferenciando em relação a  $\eta$ :

$$\frac{\partial\hat{G}}{\partial\eta} = -\hat{H}\hat{G} = -\hat{G}\hat{H} \quad (4.2)$$

Para realizar a expansão em ordens de  $\hbar$  desta equação, convém escrevê-la de maneira simétrica:

$$\frac{\partial\hat{G}}{\partial\eta} + \frac{1}{2} \left\{ \hat{H}, \hat{G} \right\} = 0 \quad (4.3)$$

A transformada de Wigner da equação (4.3) pode ser escrita como (CENTELLES et al., 1990):

$$\frac{\partial\hat{G}_w}{\partial\eta} + \frac{1}{2} \left\{ H_w, \exp\left(\frac{i\hbar\Lambda^{\leftrightarrow}}{2}\right), G_w \right\} = 0 \quad (4.4)$$

Onde

$$\begin{aligned} & \left\{ A_w, \exp\left(\frac{i\hbar\Lambda^{\leftrightarrow}}{2}\right), B_w \right\} \\ = & A_w \exp\left(\frac{i\hbar\Lambda^{\leftrightarrow}}{2}\right) B_w + B_w \exp\left(\frac{i\hbar\Lambda^{\leftrightarrow}}{2}\right) A_w \end{aligned} \quad (4.5)$$

E o operador  $\Lambda^{\leftrightarrow}$  é dado por:

$$\Lambda^{\leftrightarrow} \equiv \nabla_r^{\leftarrow} \cdot \nabla_p^{\rightarrow} - \nabla_p^{\leftarrow} \cdot \nabla_r^{\rightarrow} \quad (4.6)$$

Escrevendo explicitamente a transformada de Wigner do propagador como uma série em potências de  $\hbar$ :

$$G_w = \sum_{n=0}^{\infty} \hbar^n G_n \quad (4.7)$$

Desde que  $H_w$  não dependa de  $\hbar$ , podemos expandir a exponencial e igualar os termos correspondentes à mesma ordem em  $\hbar$ , obtendo um conjunto de equações diferenciais acopladas para  $G_w$  de acordo com o descrito na referência (CENTELLES et al., 1990):

$$\frac{\partial G_n}{\partial \eta} + \frac{1}{2} \sum_{m=0}^n \frac{1}{m!} \left(\frac{i}{2}\right)^m \{H_w, (\Lambda^{\leftrightarrow})^m, G_{n-m}\} = 0 \quad (4.8)$$

Em ordem zero,

$$\frac{\partial G_0}{\partial \eta} + \frac{1}{2} \{H_w, 1, G_0\} = 0 \quad (4.9)$$

Que tem como solução

$$G_0 = \exp(-\eta H_w) \quad (4.10)$$

Assim que conhecemos  $G_0$ , podemos determinar uma fórmula recursiva para calcular as ordens seguintes da expansão do propagador. Para a primeira ordem, temos:

$$\frac{\partial G_1}{\partial \eta} + \frac{1}{2} \{H_w, 1, G_1\} + \frac{i}{4} \{H_w, \Lambda^{\leftrightarrow}, G_0\} = 0 \quad (4.11)$$

Qualquer potência de  $G_0$  é bem definida, já que o propagador é uma exponencial. Então, definimos:

$$G_1 = G_0^{\frac{1}{2}} \bar{G}_1 G_0^{\frac{1}{2}} \quad (4.12)$$

Diferenciando em relação a  $\eta$ :

$$\frac{\partial G_1}{\partial \eta} = -\frac{1}{2} \{H_w, 1, G_1\} + G_0^{\frac{1}{2}} \frac{\partial \bar{G}_1}{\partial \eta} G_0^{\frac{1}{2}} \quad (4.13)$$

Combinando com a equação (4.11), obtemos:

$$\frac{\partial \bar{G}_1}{\partial \eta} = -\frac{i}{4} G_0^{-\frac{1}{2}} \{H_w, \Lambda^{\leftrightarrow}, G_0\} G_0^{-\frac{1}{2}} \quad (4.14)$$

Integrando e usando (4.12), ficamos com:

$$G_1 = -\frac{i}{4} G_0^{\frac{1}{2}} \left[ \int_0^\eta d\eta' G_0^{-\frac{1}{2}} \{H_w, \Lambda^{\leftrightarrow}, G_0\} G_0^{-\frac{1}{2}} \right] G_0^{\frac{1}{2}} \quad (4.15)$$

O método utilizado para obter a equação recursiva para  $G_1$  pode ser generalizado para ordens superiores  $G_n$  da expansão. Assim, definimos em analogia à equação (4.12):

$$G_n = G_0^{\frac{1}{2}} \bar{G}_n G_0^{\frac{1}{2}} \quad (4.16)$$

Após diferenciação em relação a  $\eta$  e com o auxílio da equação (4.8):

$$\frac{\partial \bar{G}_n}{\partial \eta} = -\frac{1}{2} G_0^{-\frac{1}{2}} \left[ \sum_{m=1}^n \frac{1}{m!} \left( \frac{i}{2} \right)^m \{H_w, (\Lambda^{\leftrightarrow})^m, G_{n-m}\} \right] G_0^{-\frac{1}{2}} \quad (4.17)$$

E finalmente:

$$\begin{aligned} G_n &= -\frac{1}{2} G_0^{\frac{1}{2}} \left[ \sum_{m=1}^n \frac{1}{m!} \left( \frac{i}{2} \right)^m \right. \\ &\quad \left. \times \int_0^\eta d\eta' G_0^{-\frac{1}{2}} \{H_w, (\Lambda^{\leftrightarrow})^m, G_{n-m}\} G_0^{-\frac{1}{2}} \right] G_0^{\frac{1}{2}} \quad (4.18) \end{aligned}$$

#### 4.1 CÁLCULO DA MATRIZ DENSIDADE

Desta maneira, obtemos uma relação recursiva que permite obter qualquer ordem  $G'_n$  da expansão do propagador desde que seja conhecido os termos de ordem inferior  $G'_{n-m}$ . O problema principal então é o de calcular a ação do operador  $\Lambda^{\leftrightarrow}$  sobre  $G$  e  $H$ . Não descreveremos o procedimento completo aqui, exceto para o caso mais simples da ordem zero, mas apenas apresentaremos, de acordo com a referência (CENTELLES, 1992), os resultados para a matriz densidade  $\hat{\mathcal{R}}$ , que é obtida do propagador através de uma transformada de Laplace inversa (PARR; YANG, 1989. (International series of monographs on chemistry, no. 16)):

$$\hat{\mathcal{R}}(\lambda) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} d\eta \exp(\eta\lambda) \frac{\hat{G}(\eta)}{\eta} = \tilde{L}_{\eta \rightarrow \lambda}^{-1} \left[ \frac{\hat{G}(\eta)}{\eta} \right] \quad (4.19)$$

Onde  $\lambda$  é o potencial químico. Utilizando a expansão do propagador em ordens de  $\hbar$ , podemos escrever a seguinte expressão para a matriz densidade:

$$\mathcal{R}_w = \tilde{L}_{\eta \rightarrow \lambda}^{-1} \left[ \frac{\hat{G}(\eta)}{\eta} \right] = \mathcal{R}_0 + \hbar \mathcal{R}_1 + \hbar^2 \mathcal{R}_2 + \dots \quad (4.20)$$

Supomos uma hamiltoniana de Dirac do tipo que descreve uma partícula submetida a um campo escalar e à componente tipo tempo de um campo quadrivetorial, como no caso dos modelos  $\sigma - \omega$ , ou seja:

$$\hat{H} = \vec{\alpha} \cdot \hat{\vec{p}} + \beta m^* + IV \quad (4.21)$$

Onde  $m^*$  é definido na equação (2.3). A transformada de Wigner de tal hamiltoniana é igual à sua contrapartida clássica (CENTELLES, 1992) e, portanto, independente de  $\hbar$ , e seu respectivo propagador em ordem zero é dado por (CENTELLES et al., 1990):

$$\begin{aligned}
G_0 &= \exp(-\eta H_w) \\
&= \exp[-\eta(\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m^*)] \exp(-\eta IV) \\
&= \left[ \sum_{k \text{ par}} \frac{\eta^k}{k!} \epsilon^k I - \sum_{k \text{ impar}} \frac{\eta^k}{k!} \epsilon^{k-1} (\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m^*) \right] \exp(-\eta V) \\
&= \left[ I \cosh(\eta \epsilon) - \frac{\sinh(\eta \epsilon)}{\epsilon} (\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m^*) \right] \exp(-\eta V) \quad (4.22)
\end{aligned}$$

Onde  $\epsilon = (p^2 + m^{*2})^{\frac{1}{2}}$  é a relação de dispersão da partícula efetiva. Observemos que as funções hiperbólicas podem ser escritas em função de exponenciais, o que deixa claro que a expansão do propagador da forma que realizamos separa as soluções de energia positiva e negativa, ao menos para a ordem 0. É possível ver pela estrutura da equação (4.18), no entanto, que essa propriedade desejada é mantida para todas as ordens da expansão.

Agora, vamos obter a matriz densidade em ordem 0. Das definições da transformada de Laplace da função degrau e da derivada de uma transformada de Laplace, temos:

$$\tilde{L}_{\eta \rightarrow \lambda}^{-1} = \left\{ \eta^n \frac{\exp[-\eta(V \pm \epsilon)]}{\eta} \right\} = \frac{\partial^n}{\partial \lambda^n} \Theta(\lambda - V \mp \epsilon) \quad (4.23)$$

E portanto, o termo de ordem 0 para a matriz densidade é (CENTELLES, 1992):

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_0 &= \frac{\Theta(\lambda^+ - V - \epsilon)}{2} \left[ I + \frac{1}{\epsilon} (\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m^*) \right] + \\
&\quad \frac{\Theta(\lambda^- - V + \epsilon)}{2} \left[ I - \frac{1}{\epsilon} (\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m^*) \right] \quad (4.24)
\end{aligned}$$

Para ordem 1, separamos o resultado para energias positivas:

$$\mathcal{R}_1^+ = \mathcal{R}_{1,I} + \mathcal{R}_{1,\beta} + \mathcal{R}_{1,\alpha} + \mathcal{R}_{1,\gamma} \quad (4.25)$$

As partes do resultado são dadas por produtos da função degrau e de suas derivadas, com argumento  $\lambda^+ - \epsilon - V$  (CENTELLES, 1992).

$$\mathcal{R}_{1,I} = \frac{1}{4\epsilon^3} (\epsilon\delta + \Theta) \gamma^5 \left[ \vec{\alpha} \cdot \left( \vec{p} \times \vec{\nabla} V \right) \right] \quad (4.26)$$

$$\mathcal{R}_{1,\beta} = \frac{1}{4\epsilon^3} (\epsilon\delta + \Theta) \gamma^5 \left[ \vec{\gamma} \cdot \left( \vec{p} \times \vec{\nabla} m^* \right) \right] \quad (4.27)$$

$$\mathcal{R}_{1,\alpha} = 0 \quad (4.28)$$

$$\mathcal{R}_{1,\gamma} = \frac{-i}{4\epsilon^3} \left[ m^* (\epsilon\delta + \Theta) \left( \vec{\gamma} \cdot \vec{\nabla} V \right) + \epsilon^2 \delta \left( \vec{\gamma} \cdot \vec{\nabla} m^* \right) \right] \quad (4.29)$$

Das equações acima, podemos perceber que a parte de energia positiva da matriz densidade de ordem 1 tem traço nulo, e que portanto ela não será importante no cálculo das quantidades de interesse. Podemos separar também  $\mathcal{R}_2^+$  de maneira idêntica:

$$\mathcal{R}_2^+ = \mathcal{R}_{2,I} + \mathcal{R}_{2,\beta} + \mathcal{R}_{2,\alpha} + \mathcal{R}_{2,\gamma} \quad (4.30)$$

Com (CENTELLES, 1992):

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{2,I} = & \frac{1}{48\epsilon^5} \{ (\epsilon^2 \delta'' + 3\epsilon \delta' + 3\delta) [\epsilon^2 (\vec{\nabla} V^2) - (\vec{p} \cdot \vec{\nabla} V)^2 \\ & + m^{*2} (\vec{\nabla} m^*)^2 + m^* (\vec{p} \cdot \vec{\nabla})^2 m^* + (\vec{p} \cdot \vec{\nabla} m^*)^2] \\ & + (\epsilon^3 \delta'' + 3\epsilon^2 \delta' + 6\epsilon \delta + 6\Theta) [(\vec{p} \cdot \vec{\nabla})^2 V + 2m^* (\vec{\nabla} V \cdot \vec{\nabla} m^*)] \\ & - 3\epsilon^2 (\epsilon^2 \delta' + 2\epsilon \delta + 2\Theta) \nabla^2 V - 3\epsilon^2 m^* (\epsilon \delta' + \delta) \nabla^2 m^* \} I \end{aligned} \quad (4.31)$$



$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_{2,\beta} = & \frac{1}{48\epsilon^7} \{ m^* \epsilon^2 (\epsilon^3 \delta'' - 3\epsilon\delta - 3\Theta) (\vec{\nabla} V)^2 \\
& - m^* (\epsilon^3 \delta'' + 6\epsilon^2 \delta' + 15\epsilon\delta + 15\Theta) [(\vec{p} \cdot \vec{\nabla} V)^2 \\
& - m^{*2} (\vec{\nabla} m^*)^2 - m^* (\vec{p} \cdot \vec{\nabla})^2 m^* - (\vec{p} \cdot \vec{\nabla} m^*)^2] \\
& - 3\epsilon^2 (\epsilon^2 \delta' + 3\epsilon\delta + 3\Theta) \left[ 2m^* (\vec{\nabla} m^*)^2 + (\vec{p} \cdot \vec{\nabla})^2 m^* \right] \\
& + m^* \epsilon^2 (\epsilon^2 \delta'' + 3\epsilon\delta' + 3\epsilon\delta) \left[ (\vec{p} \cdot \vec{\nabla})^2 V + 2m^* (\vec{\nabla} V \cdot \vec{\nabla} m^*) \right] \\
& - 3\epsilon^4 (\epsilon\delta' + \delta) \left[ 2 (\vec{\nabla} V \cdot \vec{\nabla} m^*) + m^* \nabla^2 V \right] \\
& - 3\epsilon^2 (m^{*2} \epsilon\delta' - 3p^2 \delta - 3p^2 \Theta) \nabla^2 m^* \} \beta
\end{aligned} \tag{4.32}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_{2,\alpha} = & \frac{1}{48\epsilon^7} \{ \epsilon^2 (\epsilon^3 \delta'' - 3\epsilon\delta - 3\Theta) (\vec{\nabla} V)^2 \\
& - (\epsilon^3 \delta'' + 6\epsilon^2 \delta' + 15\epsilon\delta + 15\Theta) [(\vec{p} \cdot \vec{\nabla} V)^2 \\
& - m^{*2} (\vec{\nabla} m^*)^2 - m^* (\vec{p} \cdot \vec{\nabla})^2 m^* - (\vec{p} \cdot \vec{\nabla} m^*)^2] \\
& + \epsilon^2 (\epsilon^2 \delta'' + 3\epsilon\delta' + 3\delta) \left[ (\vec{p} \cdot \vec{\nabla})^2 V + 2m^* (\vec{\nabla} V \cdot \vec{\nabla} m^*) \right] \\
& - 3\epsilon^4 (\epsilon\delta' + \delta) \nabla^2 V - 3m^* \epsilon^2 (\epsilon^2 \delta' + 3\epsilon\delta + 3\Theta) \nabla^2 m^* \} (\vec{\alpha} \cdot \vec{p}) \\
& + \frac{1}{8\epsilon^5} \{ (\epsilon^2 \delta' + 3\epsilon\delta + 3\Theta) [(\vec{p} \cdot \vec{\nabla} V) (\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} V) \\
& - (\vec{p} \cdot \vec{\nabla} m^*) (\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} m^*)] \}
\end{aligned} \tag{4.33}$$

$$\mathcal{R}_{2,\gamma} = \frac{i}{8\epsilon^5} (\epsilon^2 \delta' + 3\epsilon\delta + 3\Theta) \left[ \vec{p} \cdot (\vec{\nabla} V \times \vec{\nabla} m^*) \right] \gamma^5 \beta \tag{4.34}$$

É possível, em seguida, utilizar as expressões para a matriz densidade relativística, obtidas até segunda ordem em  $\hbar$ , para calcular as expansões WK da densidade e densidade de energia, também até a segunda ordem. O valor esperado de um operador qualquer  $\hat{O}$  é dado

pela seguinte fórmula:

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{r} \int d\vec{p} Tr^+ \left[ \hat{O}(\vec{r}, \vec{p}) \hat{\mathcal{R}}(\vec{r}, \vec{p}) \right]_w \quad (4.35)$$

Na qual a transformada do produto de dois operadores é dada pela equação (3.57), e o traço dos operadores é tomado considerando apenas os estados de energia positiva, ou seja, descartando qualquer contribuição de antipartículas. Para o caso dos operadores que vamos utilizar, podemos simplificar a expressão do valor esperado até segunda ordem, resultando (CENTELLES et al., 1990; CENTELLES, 1992):

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{r} \int d\vec{p} Tr^+ [O_w(\mathcal{R}_0 + \hbar^2 \mathcal{R}_2)] \quad (4.36)$$

Visto que os demais termos que entram na expressão são iguais a zero, como o traço computado a partir da componente  $\mathcal{R}_1$ , ou se anulam após a realização de uma média angular nos momentos.

## 4.2 EXPRESSÕES WIGNER-KIRKWOOD DA DENSIDADE E ENERGIA

Finalmente estamos em condições de obter as expressões WK que desejamos até a segunda ordem, ou seja, a aproximação de Thomas-Fermi estendida. Vamos primeiro calcular a ordem zero da expressão WK para as densidades de partículas e de energia para cada tipo de núcleon, segundo a equação acima e as expressões para a matriz densidade relativística. Este cálculo, naturalmente, coincide com as expressões obtidas na aproximação de Thomas-Fermi. Para a densidade bariônica, temos  $\hat{O} = I$ , e então:

$$\begin{aligned} \rho_0 &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{p} Tr^+ [\mathcal{R}_0] \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{p} Tr \left\{ \frac{\Theta(\lambda - V - \epsilon)}{2} \left[ I + \frac{1}{\epsilon} (\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m^*) \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.37)$$

Para o cálculo dos traços das diversas partes da matriz densidade,

notamos que:

$$Tr\alpha_i = Tr\beta = Tr\gamma_i = 0, TrI = 4 \quad (4.38)$$

Portanto, para o nosso cálculo da densidade bariônica em ordem zero:

$$\begin{aligned} \rho_0 &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{p} Tr \left[ \frac{\Theta(\lambda - V - \epsilon)}{2} I \right] \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{p} \frac{1}{2} \Theta(\lambda - V - \epsilon) \cdot 4 \end{aligned} \quad (4.39)$$

Definindo o momento e a energia de Fermi:

$$k_F = \left[ (\lambda - V)^2 - m^{*2} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (4.40)$$

$$\epsilon_F = \lambda - V = (k_F^2 + m^{*2})^{\frac{1}{2}} \quad (4.41)$$

Temos que

$$\lambda - V - \epsilon = \epsilon_F - \epsilon = \sqrt{k_F^2 + m^{*2}} - \sqrt{p^2 + m^{*2}} \quad (4.42)$$

$$\Theta(\lambda - V - \epsilon) = \Theta(k_F - p) \quad (4.43)$$

Dessa forma,

$$\rho_0 = \frac{1}{2\pi^3} 4\pi \int dp p^2 2\Theta(k_F - p) = \frac{1}{\pi^2} \int_0^{k_F} dp p^2 = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \quad (4.44)$$

Onde é trivial especificar a densidade de prótons ou nêutrons. Estas são precisamente as expressões usuais para o resultado da densidade de partículas no caso da aproximação de Thomas-Fermi. No caso da densidade de energia, temos  $\hat{O} = \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m^* + IV$ , e então:

$$\begin{aligned}
\epsilon_0 &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{p} Tr^+ \left[ \left( \vec{\alpha} \cdot \hat{p} + \beta m^* + IV \right) \mathcal{R}_0 \right] \\
&= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{p} Tr \left\{ \left( \vec{\alpha} \cdot \hat{p} + \beta m^* + IV \right) \frac{\Theta(\lambda - V - \epsilon)}{2} \right. \\
&\quad \left. \times \left[ I + \frac{1}{\epsilon} \left( \vec{\alpha} \cdot \hat{p} + \beta m^* \right) \right] \right\} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{p} \frac{\Theta(\lambda - V - \epsilon)}{2} Tr \left\{ \left( \vec{\alpha} \cdot \hat{p} + \beta m^* \right) I \right. \\
&\quad \left. + \left( \vec{\alpha} \cdot \hat{p} + \beta m^* \right) \frac{1}{\epsilon} \left( \vec{\alpha} \cdot \hat{p} + \beta m^* \right) \right. \\
&\quad \left. + IV \left[ I + \frac{1}{\epsilon} \left( \vec{\alpha} \cdot \hat{p} + \beta m^* \right) \right] \right\} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{p} \frac{\Theta(\lambda - V - \epsilon)}{2} \left\{ Tr \left[ \frac{1}{\epsilon} \left( \vec{\alpha} \cdot \hat{p} + \beta m^* \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \times \left( \vec{\alpha} \cdot \hat{p} + \beta m^* \right) \right] + Tr(IV) \right\} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{p} \frac{\Theta(\lambda - V - \epsilon)}{2\epsilon} Tr \left( \gamma^0 \vec{\gamma} \gamma^0 \vec{\gamma} p^2 + \gamma^0 \gamma^0 \vec{\gamma} \vec{p} m^* \right. \\
&\quad \left. + \gamma^0 \vec{\gamma} \gamma^0 \vec{p} m^* + \gamma^0 \gamma^0 m^{*2} \right) + V \rho_0 \\
&= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{p} \frac{\Theta(\lambda - V - \epsilon)}{2\epsilon} Tr \left( \gamma^0 \vec{\gamma} \gamma^0 \vec{\gamma} p^2 + \gamma^0 \gamma^0 m^{*2} \right) + V \rho_0
\end{aligned} \tag{4.45}$$

Onde foi utilizada a propriedade de que o traço de um número ímpar de matrizes  $\gamma$  é igual a 0. A seguir, utilizamos as fórmulas do traço de duas e quatro matrizes  $\gamma$  para o nosso cálculo. Em nossa notação,  $g^{\mu\nu}$  é a métrica de Minkowski e  $i = 1, 2, 3$ .

$$\begin{aligned}
\epsilon_0 &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{p} \frac{\Theta(\lambda - V - \epsilon)}{2\epsilon} [4(g^{0i}g^{0i} - g^{00}g^{ii} + g^{0i}g^{i0})p^2 \\
&\quad + 4g^{00}m^{*2}] + V\rho_0 \\
&= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{p} \frac{\Theta(\lambda - V - \epsilon)}{2\epsilon} (4p^2 + 4m^{*2}) + V\rho_0 \\
&= 4\frac{1}{2}\frac{1}{8\pi^3}4\pi \int dp p^2 \frac{\Theta(\lambda - V - \epsilon)}{\epsilon} (p^2 + m^{*2}) + V\rho_0 \\
&= \frac{1}{\pi^2} \int dp p^4 \frac{\Theta(\lambda - V - \epsilon)}{\epsilon} \\
&\quad + \frac{1}{\pi^2} \int dp p^2 m^{*2} \frac{\Theta(\lambda - V - \epsilon)}{\epsilon} + V\rho_0 \tag{4.46}
\end{aligned}$$

Onde o fator  $4\pi$  vem da integração angular no espaço dos momentos. As integrais que obtivemos têm as seguintes soluções:

$$\begin{aligned}
&\int dp p^4 \frac{\Theta(\lambda - V - \epsilon)}{\epsilon} = \int dp p^4 \frac{\Theta(k_F - p)}{\sqrt{p^2 + m^{*2}}} \\
&= \left\{ \sqrt{m^{*2} + p^2} \left( \frac{p^3}{4} - \frac{3m^{*2}p}{8} \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{3}{8}m^{*4} \ln \left[ 2 \left( \sqrt{p^2 + m^{*2}} + p \right) \right] \right\} \Big|_0^{k_F} \\
&= \sqrt{m^{*2} + k_F^2} \left( \frac{k_F^3}{4} - \frac{3m^{*2}k_F}{8} \right) \\
&\quad + \frac{3}{8}m^{*4} \ln \left[ 2 \left( \sqrt{k_F^2 + m^{*2}} + k_F \right) \right] - \frac{3}{8}m^{*4} \ln \left( 2\sqrt{m^{*2}} \right) \\
&= \epsilon_F \left( \frac{k_F^3}{4} - \frac{3m^{*2}k_F}{8} \right) + \frac{3}{8}m^{*4} \ln \left( \frac{\epsilon_F + k_F}{m^*} \right) \tag{4.47}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \int dp p^2 m^{*2} \frac{\Theta(\lambda - V - \epsilon)}{\epsilon} = \int dp p^2 m^{*2} \frac{\Theta(k_F - p)}{\sqrt{p^2 + m^{*2}}} \\
& = \left\{ \frac{1}{2} m^{*2} p \sqrt{m^{*2} + p^2} - \frac{1}{2} m^{*4} \ln \left[ 2 \left( \sqrt{p^2 + m^{*2}} + p \right) \right] \right\} \Big|_0^{k_F} \\
& = \frac{1}{2} m^{*2} k_F \sqrt{m^{*2} + k_F^2} - \frac{1}{2} m^{*4} \ln \left[ 2 \left( \sqrt{k_F^2 + m^{*2}} + k_F \right) \right] \\
& \quad + \frac{1}{2} m^{*4} \ln \left( 2 \sqrt{m^{*2}} \right) \\
& = \frac{1}{2} m^{*2} k_F \epsilon_F - \frac{1}{2} m^{*4} \ln \left( \frac{\epsilon_F + k_F}{m^*} \right) \tag{4.48}
\end{aligned}$$

Dessa forma, o termo de ordem zero para a densidade de energia fica:

$$\epsilon_0 = \frac{1}{\pi^2} \left[ \frac{\epsilon_F k_F^3}{4} + \frac{m^{*2} k_F \epsilon_F}{8} - \frac{m^{*4}}{8} \ln \left( \frac{\epsilon_F + k_F}{m^*} \right) \right] + V \rho_0 \tag{4.49}$$

Ou, utilizando a definição de  $k_F$  para reorganizar os termos:

$$\epsilon_0 = \frac{1}{8\pi^2} \left[ \epsilon_F k_F^3 + k_F \epsilon_F^3 - m^{*4} \ln \left( \frac{\epsilon_F + k_F}{m^*} \right) \right] + V \rho_0 \tag{4.50}$$

Novamente, observamos que o resultado obtido corresponde às expressões usuais para a densidade de energia no modelo TF, como era esperado. A densidade escalar também pode ser calculada, tomando  $\hat{O} = \beta$ . Dessa maneira (CENTELLES, 1992):

$$\begin{aligned}
\rho_{s,0} & = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{p} Tr^+ [\beta \mathcal{R}_0] \\
& = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{p} Tr \left\{ \beta \frac{\Theta(\lambda - V - \epsilon)}{2} \right. \\
& \quad \left. \left[ I + \frac{1}{\epsilon} (\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m^*) \right] \right\} \tag{4.51}
\end{aligned}$$

Utilizando novamente as propriedades do traço das matrizes envolvidas e a integral (4.48):

$$\begin{aligned}
\rho_{s,0} &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{p} \frac{\Theta(\lambda - V - \epsilon)}{2} \text{Tr} \left[ \beta I + \beta \frac{1}{\epsilon} \left( \vec{\alpha} \cdot \hat{p} + \beta m^* \right) \right] \\
&= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{p} \frac{\Theta(\lambda - V - \epsilon)}{2} \text{Tr} \left[ \gamma^0 + \frac{1}{\epsilon} \left( \gamma^0 \gamma^0 \vec{\gamma} \vec{p} + \gamma^0 \gamma^0 m^* \right) \right] \\
&= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{p} \frac{\Theta(\lambda - V - \epsilon)}{2\epsilon} 4g^{00} m^* \\
&= 4 \frac{1}{2} \frac{1}{8\pi^3} 4\pi \int dp p^2 \frac{\Theta(\lambda - V - \epsilon)}{\epsilon} m^* \\
&= \frac{1}{\pi^2} \int dp p^2 m^* \frac{\Theta(\lambda - V - \epsilon)}{\epsilon} \\
&= \frac{m^*}{2\pi^2} \left[ k_F \epsilon_F - m^{*2} \ln \left( \frac{\epsilon_F + k_F}{m^*} \right) \right] \tag{4.52}
\end{aligned}$$

A seguir, apresentamos sem demonstrar os valores da expansão WK da densidade de partículas, densidade de energia e densidade escalar em segunda ordem, visto que o procedimento de obtenção das expressões é demasiado longo. As expressões foram obtidas pelos autores das referências (CENTELLES et al., 1990; CENTELLES, 1992), e podem ser encontradas aí. Definindo  $x_F = \epsilon_F/k_F$ ,

$$\begin{aligned}
\rho_2 &= \frac{1}{24\pi^2} \left\{ \frac{1}{k_F} (3 - x_F^2) \left( \vec{\nabla} V \right)^2 - \left[ 2x_F + 4 \ln \left( \frac{\epsilon_F + k_F}{m^*} \right) \right] \nabla^2 V \right. \\
&\quad + 2 \frac{x_F}{m^*} (3 - x_F^2) \left( \vec{\nabla} V \cdot \vec{\nabla} m^* \right) + \frac{1}{k_F} (2 - x_F^2) \left( \vec{\nabla} m^* \right)^2 \\
&\quad \left. + 2 \frac{k_F}{m^*} (1 - x_F^2) \nabla^2 m^* \right\} \tag{4.53}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\epsilon_2 &= \frac{1}{24\pi^2} \left\{ \left[ x_F (2 - x_F^2) - 2 \ln \left( \frac{\epsilon_F + k_F}{m^*} \right) \right] \left( \vec{\nabla} V \right)^2 \right. \\
&\quad - 2k_F (1 + x_F^2) \nabla^2 V + 2 \frac{m^*}{k_F} (1 - x_F^2) \left( \vec{\nabla} V \cdot \vec{\nabla} m^* \right) \\
&\quad + \left[ x_F (1 - x_F^2) - \ln \left( \frac{\epsilon_F + k_F}{m^*} \right) \right] \left( \vec{\nabla} m^* \right)^2 \\
&\quad \left. - 2m^* \left[ x_F - \ln \left( \frac{\epsilon_F + k_F}{m^*} \right) \right] \nabla^2 m^* \right\} + V \rho_2 \tag{4.54}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\rho_{s,2} = & -\frac{1}{24\pi^2} \left\{ \frac{x_F}{m^*} (1 + x_F^2) (\vec{\nabla}V)^2 + 2\frac{m^*}{k_F} \nabla^2 V \right. \\
& + \frac{2}{k_F} (2 + x_F^2) (\vec{\nabla}V \cdot \vec{\nabla}m^*) + \frac{x_F}{m^*} (2 + x_F^2) (\vec{\nabla}m^*)^2 \\
& \left. + \left[ 2x_F - 6\ln\left(\frac{\epsilon_F + k_F}{m^*}\right) \right] \nabla^2 m^* \right\} \quad (4.55)
\end{aligned}$$

Temos então expressões para a densidade de partículas, densidade de energia e densidade escalar até segunda ordem, dadas por  $\rho = \rho_0 + \rho_2$ ,  $\epsilon = \epsilon_0 + \epsilon_2$  e  $\rho_s = \rho_{s,0} + \rho_{s,2}$  respectivamente.



## 5 APLICAÇÃO NA FASE PASTA FRIA EM ESTRELAS DE NÊUTRONS

Nosso propósito nesta dissertação é analisar propriedades da fase pasta que se supõe formar parte da crosta das estrelas de nêutrons, especificamente, nas configurações tridimensionais (gota e bolha). Vamos descrever a matéria que compõe essa fase como uma matéria nuclear npe, ou seja, composta de prótons, nêutrons e elétrons, com diferentes frações de prótons, desconsiderando o equilíbrio beta. Utilizaremos nesta descrição a parametrização NL3 do modelo de Walecka não linear à temperatura  $T = 0$ , de maneira similar ao realizado na referência (AVANCINI et al., 2008). Particularmente, entretanto, utilizaremos o modelo de Thomas-Fermi estendido para obter as densidades e energias. Neste modelo semiclássico, como foi descrito anteriormente, obtém-se uma expansão em ordens de  $\hbar$  das densidades e energias, permitindo soluções mais próximas daquelas que seriam obtidas com modelos puramente quânticos. Utilizaremos aqui a expansão até segunda ordem e compararemos com o cálculo realizado pelo modelo de Thomas-Fermi, ou seja, com as expressões até ordem zero.

Neste capítulo, descrevemos brevemente dois aspectos importantes do algoritmo que calcula, entre outras grandezas, a energia em função da densidade bariônica global: A obtenção dos potenciais químicos, necessário para estabelecer um número fixo de partículas e neutralidade de carga na célula de Wigner-Seitz, e o cálculo auto-consistente dos potenciais a partir das densidades, através da expansão dos campos em uma base de oscilador harmônico.

### 5.1 CÁLCULO DOS POTENCIAIS QUÍMICOS

No capítulo 2, já obtivemos a expressão para a hamiltoniana de um sistema de matéria npe na aproximação de Thomas-Fermi estendida (2.53). Com o auxílio desta última equação, pode-se escrever a energia como um funcional da densidade:

$$\begin{aligned}
E_{TFE} = & \int d^3r \sum_{i=p,n,e} \epsilon_i(\vec{r}) + \frac{1}{2} \left[ (\vec{\nabla}\phi(\vec{r}))^2 + m_s^2 \phi^2(\vec{r}) \right] \\
& + \frac{\kappa}{6} \phi^3(\vec{r}) + \frac{\lambda}{24} \phi^4(\vec{r}) - \frac{1}{2} \left[ (\vec{\nabla}V_0(\vec{r}))^2 + m_v^2 V_0^2(\vec{r}) \right] \\
& + g_v V_0(\vec{r}) \rho(\vec{r}) - \frac{1}{2} \left[ (\vec{\nabla}b_0(\vec{r}))^2 + m_\rho^2 b_0^2(\vec{r}) \right] + \frac{1}{2} g_\rho b_0(\vec{r}) \rho_3(\vec{r}) \\
& - \frac{1}{2} \left[ \vec{\nabla}A_0(\vec{r}) \right]^2 + e(\rho_p(\vec{r}) - \rho_e(\vec{r})) A_0(\vec{r}) \quad (5.1)
\end{aligned}$$

Com o termo cinético dos nucleons dado por:

$$\epsilon_N(\vec{r}) = \epsilon_p(\vec{r}) + \epsilon_n(\vec{r}) = \left\langle \hat{\psi}^\dagger \left( -i\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + \beta m^* \right) \hat{\psi} \right\rangle \quad (5.2)$$

É uma expressão equivalente para o elétron, trocando  $m^*$  por  $m_e$ .

É mais prático reescrever a energia de uma forma diferente, utilizando as equações de movimento:

$$\begin{aligned}
E_{TFE} = & \int d^3r \sum_{i=p,n,e} \epsilon_i(\vec{r}) - \frac{\kappa}{12} \phi^3(\vec{r}) - \frac{\lambda}{24} \phi^4(\vec{r}) \\
& + \frac{1}{2} g_s \phi(\vec{r}) \rho_s(\vec{r}) + \frac{1}{2} g_v V_0(\vec{r}) \rho(\vec{r}) \\
& + \frac{1}{2} g_\rho b_0(\vec{r}) \rho_3(\vec{r}) + \frac{1}{2} e(\rho_p(\vec{r}) - \rho_e(\vec{r})) A_0(\vec{r}) \quad (5.3)
\end{aligned}$$

A definição do grande potencial termodinâmico é:

$$\Omega = E - TS - \sum_{i=p,n,e} \mu_i B_i \quad (5.4)$$

Onde E, T e S são a energia, a temperatura e a entropia do sistema, respectivamente,  $\mu_i$  é o potencial químico para cada espécie e  $B_i$  é o número de prótons, nêutrons ou elétrons ou seja:

$$B_i = \int d^3r \rho_i(\vec{r}) \quad (5.5)$$

Dessa maneira, à temperatura zero obtém-se:

$$\Omega = E_{TFE}[\rho_i] - \sum_{i=p,n,e} \mu_i \int d^3r \rho_i(\vec{r}) \quad (5.6)$$

Minimizando o grande potencial termodinâmico acima com o vínculo adicional de um número constante de prótons, nêutrons e elétrons, obtém-se as seguintes equações:

$$(k_{F_p}^2(\vec{r}) + m^{*2}(\vec{r}))^{\frac{1}{2}} + g_v V_0(\vec{r}) + \frac{1}{2} g_\rho b_0(\vec{r}) + e A_0(\vec{r}) = \mu_p \quad (5.7)$$

$$(k_{F_n}^2(\vec{r}) + m^{*2}(\vec{r}))^{\frac{1}{2}} + g_v V_0(\vec{r}) - \frac{1}{2} g_\rho b_0(\vec{r}) = \mu_n \quad (5.8)$$

$$(k_{F_e}^2(\vec{r}) + m_e^2(\vec{r}))^{\frac{1}{2}} - e A_0(\vec{r}) = \mu_e \quad (5.9)$$

Dadas as densidades tentativas iniciais, a subrotina principal do nosso programa calcula primeiro os campos e então os potenciais químicos, de forma a assegurar que o número de prótons e nêutrons sejam fixos dentro da célula, e que haja também neutralidade de carga, ou seja, o número de elétrons seja igual ao de prótons. Em cada iteração, ajusta-se o potencial químico às quantidades corretas. Na aproximação de Thomas-Fermi, isto equivale a realizar o seguinte processo:

$$\int d^3r \rho_i(r) = \int d^3r \frac{k_{F_i}^3(r)}{3\pi^2} = \begin{cases} Z & \text{se } i = p, e \\ N & \text{se } i = n \end{cases} \quad (5.10)$$

Para realizar a inclusão das correções de segunda ordem de  $\hbar$  obtidas pelo método de Thomas-Fermi estendido, faz-se necessário computar a contribuição dos novos termos para a densidade (4.51), de maneira perturbativa (VON-EIFF; WEIGEL, 1992). Seja a densidade dada por  $\rho_i = \frac{k_{F_i}^3(r)}{3\pi^2} + \rho_i^{ETF}(r)$ , temos:

$$\begin{aligned} \int d^3r \rho_i(r) &= \int d^3r \left[ \frac{k_{F_i}^3(r)}{3\pi^2} + \rho_i^{ETF}(r) \right] = \\ &= \begin{cases} Z = Z_{TF} + Z_{TFE} & \text{se } i = p, e \\ N = N_{TF} + N_{TFE} & \text{se } i = n \end{cases} \end{aligned} \quad (5.11)$$

De maneira que agora calculamos as correções  $Z_{TFE}$  e  $N_{TFE}$  a partir dos campos e ajustamos os potenciais químicos às quantidades  $Z_{TF} = Z - Z_{TFE}$  e  $N_{TF} = N - N_{TFE}$  em vez de simplesmente Z e N.

## 5.2 SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DE KLEIN-GORDON

As equações de movimento (equações de Klein-Gordon) referentes aos campos mesônicos e eletromagnético (2.62) - (2.65) foram obtidas também no capítulo 2 deste trabalho, e agora procedemos à maneira de resolvê-las numericamente. Uma maneira de solucionar essas equações é realizar a expansão dos campos na base de um oscilador harmônico em três, duas, ou uma dimensão, dependendo do tipo de estrutura que se deseja estudar. Expandiremos por razões de simetria dos campos envolvidos apenas na base dos osciladores com o número quântico do momento angular orbital nulo, ou seja  $l=0$ . Aqui, nos ateremos à solução das equações para o caso 3D, ou seja, para as estruturas gota e bolha, com simetria esférica. A base desse oscilador 3D em coordenadas esféricas é dada pela função  $\psi_n(\vec{r}) = \Phi_n(r)Y_{00}(\Omega)$ , com  $Y_{00}(\Omega) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{\pi}}$  correspondendo ao harmônico esférico com  $l=0$ , e  $\Phi(r)$  dado por:

$$\Phi_n(r) = \frac{2^{\frac{1}{2}}\Gamma(n)^{\frac{1}{2}}}{b_B^{\frac{3}{2}}\Gamma(n + \frac{1}{2})^{\frac{1}{2}}} \mathcal{L}_{n-1}^{\frac{1}{2}}\left(-\frac{r^2}{b_B^2}\right) \exp\left(-\frac{r^2}{2b_B^2}\right), n = 1, 2, 3, \dots \quad (5.12)$$

Onde  $\mathcal{L}_n^m$  é o polinômio de Laguerre associado, e  $b_B$  é o comprimento do oscilador. Essa base satisfaz a condição de normalização:

$$\int_0^\infty dr r^2 \Phi_n(r) \Phi_{n'}(r) = \delta_{nn'} \quad (5.13)$$

As equações de Klein-Gordon radiais reduzem-se a uma forma condensada:

$$\left(-\frac{d}{dr^2} - \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + m_\xi^2\right) \xi = s_\xi \quad (5.14)$$

Onde o termo  $\xi$  representa os campos mesônicos e  $s_\xi$  as suas fontes. Essas equações são então resolvidas por um procedimento auto-consistente. Expandimos os campos e as fontes da seguinte maneira:

$$\xi(r) = \sum_{i=1}^{NB} a_i \phi_i(r) \quad (5.15)$$

$$s_\xi(r) = \sum_{i=1}^{NB} b_i \phi_i(r) \quad (5.16)$$

Substituindo as expressões para os campos e as fontes na equação de Klein-Gordon (5.14), obtém-se um sistema matricial de equações caracterizadas por uma forma tri-diagonal. Em 3D, tomando o produto com  $\langle \Phi_n |$  de ambos os lados, podemos ver que o lado esquerdo da equação é proporcional a:

$$\begin{aligned} \left\langle \Phi_n \left| -\frac{d}{dr^2} - \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + m_\xi^2 \right| \Phi_{n'} \right\rangle &= \left\{ \frac{1}{b_B^2} \left[ 2(n-1) + \frac{3}{2} \right] + m_\xi^2 \right\} \delta_{nn'} \\ &+ \frac{1}{b_B^2} \sqrt{n' \left( n' + \frac{1}{2} \right)} \delta_{n \ n'+1} \\ &+ \frac{1}{b_B^2} \sqrt{n \left( n + \frac{1}{2} \right)} \delta_{n+1 \ n'} \end{aligned} \quad (5.17)$$

Para a equação correspondente ao campo eletromagnético, temos convergência lenta devido ao caráter de longo alcance da interação. Por isso, resolvemos a equação (2.65) de maneira diferente, utilizando a função de Green para três dimensões,  $G_{3D}(r, r')$ , através da qual podemos escrever:

$$A_0(r) = \int_0^\infty dr' r'^2 G_{3D}(r, r') \rho_{ch}(r') \quad (5.18)$$

Com a densidade de carga  $\rho_{ch}(r') = e(\rho_p(r') - \rho_e(r'))$ , e

$$G_{3D}(r, r') = \frac{1}{r_{>}} \quad (5.19)$$

Onde  $r_{>}$  corresponde a  $r$  se  $r > r'$  e a  $r'$  se  $r' > r$ .

A contribuição total do campo eletromagnético para a energia pode ser calculada pela equação:

$$E_C = \frac{4\pi\alpha}{2} \int d^3r (\rho_p(r) - \rho_e(r)) \frac{1}{e} A_0(r) \quad (5.20)$$

Onde o termo  $4\pi\alpha$ , com  $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}$ , a constante de estrutura fina, foi adicionado para obtermos a energia em unidades mais convenientes, de  $[fm^{-1}]$ .



## 6 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Apresentamos aqui os resultados do cálculo numérico realizado, em que tentamos obter um refinamento dos resultados para a aproximação TF presentes nas referências (AVANCINI et al., 2008; MARUYAMA et al., 2006), ao mesmo tempo em que nos baseamos nos mesmos para verificar a confiabilidade das soluções. O uso das células de Wigner-Seitz nos permite traçar o perfil de densidade da matéria nuclear, isto é, como ela se distribui dentro da célula. No entanto isto também constitui uma limitação, o que se reflete no fato de que temos de escolher geometrias esfericamente simétricas (no caso tridimensional, que estamos estudando), onde na realidade podem aparecer estruturas intermediárias.

Mostramos também a energia total por partícula obtida para as geometrias gota e bolha para determinadas frações de prótons, em uma faixa de densidade bariônica global que vai de  $0.02 \text{ fm}^{-3}$  a  $0.16 \text{ fm}^{-3}$ , aproximadamente a densidade de saturação. Com esses dados, podemos fazer suposições sobre a geometria do estado fundamental para cada densidade global dada, no entanto faltam-nos as informações referentes às fases com geometria do tipo bastão, tubo e placa, com as quais poderíamos apresentar um panorama mais completo. Obtivemos, entretanto, por um método atrelado ao cálculo da tensão superficial da matéria nuclear, as densidades para as quais as geometrias características da pasta não constituem mais o estado fundamental, este sendo ocupado pela fase homogênea.

Em todos os nossos cálculos, foi utilizada a parametrização NL3 do modelo de Walecka não-linear, cujos valores dos parâmetros são dados na tabela (1), abaixo.

| Parâmetro | Valor                   |
|-----------|-------------------------|
| $M$       | 939 MeV                 |
| $m_s$     | 508.194 MeV             |
| $m_v$     | 782.501 MeV             |
| $m_\rho$  | 763 MeV                 |
| $g_s$     | 10.217                  |
| $g_v$     | 12.868                  |
| $g_\rho$  | 4.474                   |
| $\kappa$  | 20.862                  |
| $\lambda$ | -173.31                 |
| $\rho_0$  | $0.153 \text{ fm}^{-3}$ |

Tabela 1 – Valores dos parâmetros para a parametrização NL3



## 6.1 PERFIS DE DENSIDADE

A seguir, os gráficos dos perfis de densidade para a geometria gota, com a densidade bariônica global de  $0.02 \text{ fm}^{-3}$ . Os gráficos representam a densidade de nêutrons (n), prótons (p) e elétrons (e) em função do raio para a célula de Wigner-Seitz. A região onde os dados terminam representa a borda da célula.

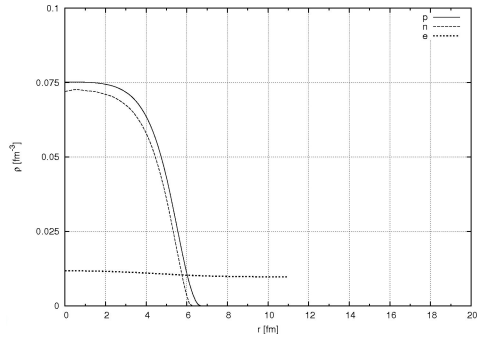


Figura 1 – Densidade de prótons, nêutrons e elétrons na célula para a geometria gota e  $Y_p = 0.5$

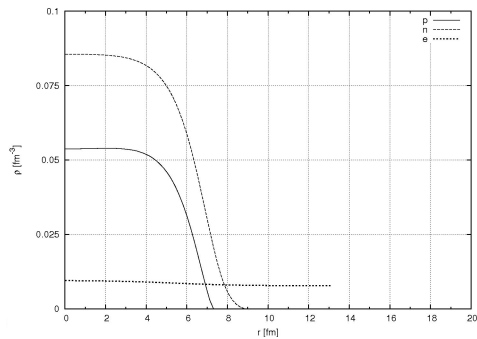


Figura 2 – Densidade de prótons, nêutrons e elétrons na célula para a geometria gota e  $Y_p = 0.4$

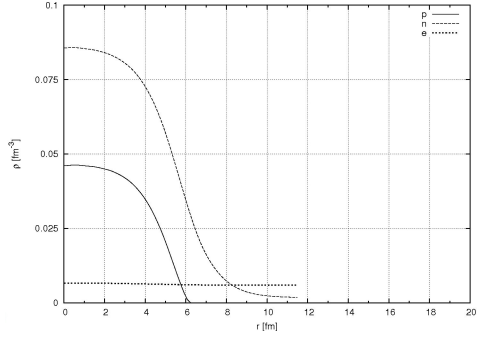


Figura 3 – Densidade de prótons, nêutrons e elétrons na célula para a geometria gota e  $Y_p = 0.3$

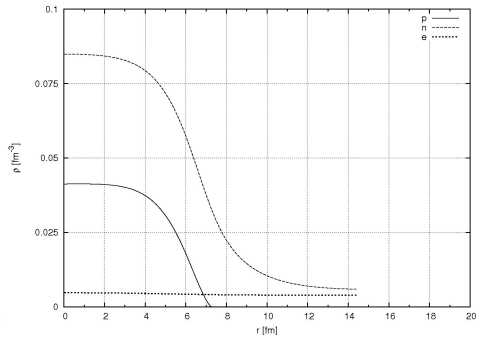


Figura 4 – Densidade de prótons, nêutrons e elétrons na célula para a geometria gota e  $Y_p = 0.2$

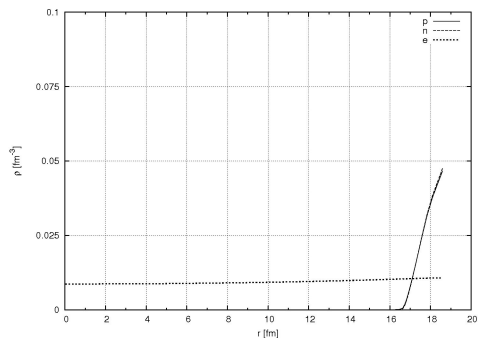


Figura 5 – Densidade de prótons, nêutrons e elétrons na célula para a geometria bolha e  $Y_p = 0.5$

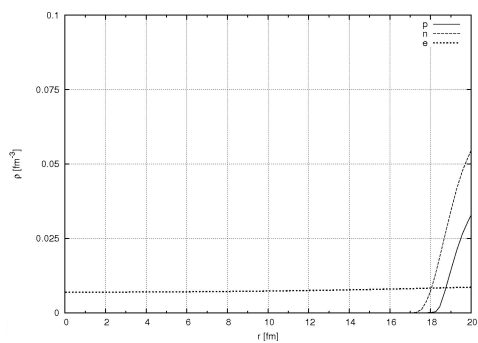


Figura 6 – Densidade de prótons, nêutrons e elétrons na célula para a geometria bolha e  $Y_p = 0.4$

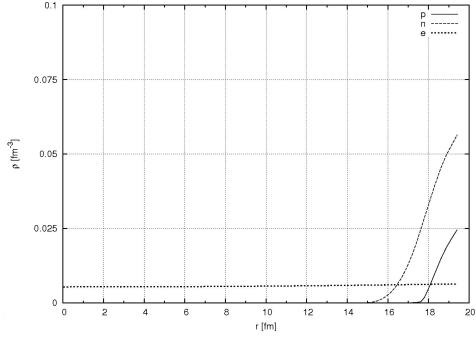


Figura 7 – Densidade de prótons, nêutrons e elétrons na célula para a geometria bolha e  $Y_p = 0.3$

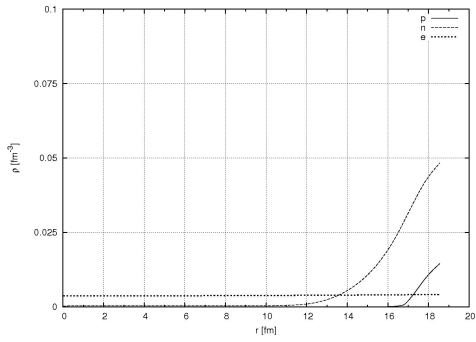


Figura 8 – Densidade de prótons, nêutrons e elétrons na célula para a geometria bolha e  $Y_p = 0.2$

Podemos notar como a matéria nuclear na geometria gota se configura na forma de uma região de grande densidade de bárions próximo ao centro da célula, que vai se tornando menos densa e eventualmente se torna nula conforme nos aproximamos da borda, exceto no caso dos elétrons, que preenchem a célula de maneira aproximadamente uniforme. Na geometria bolha, a configuração das densidades se inverte, com uma região de densidade bariônica baixa ou nula próxima ao centro da célula e densidades maiores conforme nos aproximamos da borda. As densidades bariônicas são menores nesse caso devido ao volume maior que corresponde às regiões externas da célula.

Para frações de prótons mais baixas, no entanto, ocorre o fenômeno conhecido como *neutron drip*, onde uma densidade relativamente pequena porém não desprezível de nêutrons “escapa” para regiões mais externas da célula no caso da geometria gota, e para regiões mais internas no caso da geometria bolha. A fração de prótons para a qual isso acontece depende da geometria e das características do cálculo, como mostramos na tabela (2):

| Geometria   | $Y_p$ |
|-------------|-------|
| Gota (TFE)  | 0.37  |
| Gota (TF)   | 0.30  |
| Bolha (TFE) | 0.29  |
| Bolha (TF)  | 0.20  |

Tabela 2 – Frações de prótons máximas para a ocorrência do *neutron drip*

## 6.2 ENERGIA POR PARTÍCULA

A seguir, mostramos graficamente a energia total por partícula para a geometria gota em duas frações de prótons diferentes,  $Y_p = 0.5$  e  $Y_p = 0.3$ . A linha sólida indica o cálculo realizado utilizando a aproximação TFE, enquanto a linha intermitente indica aquele realizado utilizando a aproximação TF. Acreditamos que o aparecimento de pontas mais ou menos suaves nos gráficos TFE seja o resultado de irregularidades no cálculo numérico.

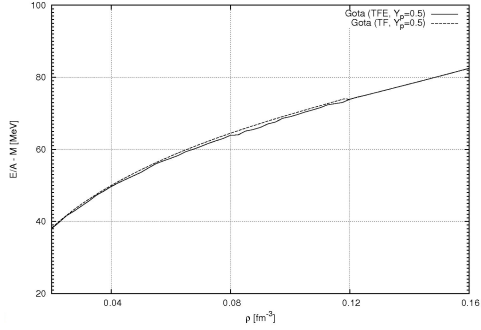


Figura 9 – Energia total por partícula para a geometria gota, com fração de prótons  $Y_p = 0.5$  (TF e TFE)

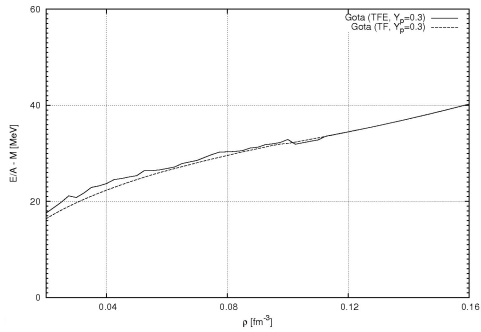


Figura 10 – Energia total por partícula para a geometria gota, com fração de prótons  $Y_p = 0.3$  (TF e TFE)

Nas figuras (9) e (10) percebemos que a correção TFE aumentou ligeiramente a energia por partícula para densidades de até  $0.12 \text{ fm}^{-3}$  para a fração de prótons  $Y_p = 0.5$  e até  $0.10 \text{ fm}^{-3}$  para a fração de prótons  $Y_p = 0.3$ . Esse tipo de alteração era esperada para uma correção de segunda ordem como é o caso da aproximação TFE. Observamos também que as energias para a fração de prótons menor são bastante mais baixas em toda a faixa de densidades, devido à diminuição da energia da interação coulombiana.

Em ambas as geometrias, os resultados TFE se aproximam dos resultados TF a partir da densidade de  $0.12 \text{ fm}^{-3}$ . Isto coincide aproximadamente com a transição da fase pasta para a fase homogênea, que analisaremos mais adiante.

Em seguida, na figura (11), exibimos a energia total por partícula para a geometria bolha com a fração de prótons  $Y_p = 0.5$ . Diferentemente dos casos analisados anteriormente (geometria gota) o efeito da correção de segunda ordem foi abaixar a energia por partícula para densidades globais menores que  $0.10 \text{ fm}^{-3}$ , incluindo uma correção particularmente grande para densidades mais baixas, na região de  $0.02 \text{ fm}^{-3}$  a  $0.06 \text{ fm}^{-3}$ .

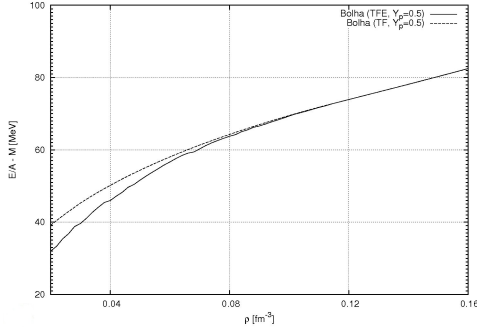


Figura 11 – Energia total por partícula para a geometria bolha, com fração de prótons  $Y_p = 0.5$  (TF e TFE)

Na figura (12), comparamos o comportamento da energia para as geometrias gota e bolha, ambas com fração de prótons  $Y_p = 0.5$  e na aproximação TFE. É visível como a queda acentuada na energia da fase bolha faz com que esta esteja bem abaixo da energia da fase gota para densidades de  $0.02 \text{ fm}^{-3}$  a  $0.08 \text{ fm}^{-3}$ . Na faixa entre as densidades de  $0.08 \text{ fm}^{-3}$  a  $0.12 \text{ fm}^{-3}$ , contudo, acontece o oposto.

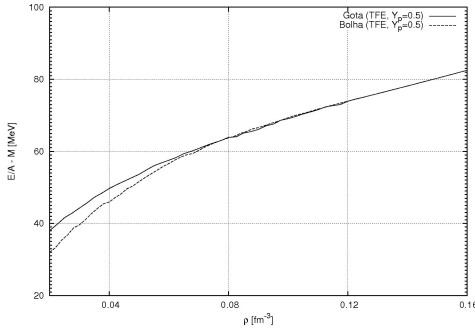


Figura 12 – Comparação da energia total por partícula para as geometrias gota e bolha, com fração de prótons  $Y_p = 0.5$  (TFE)

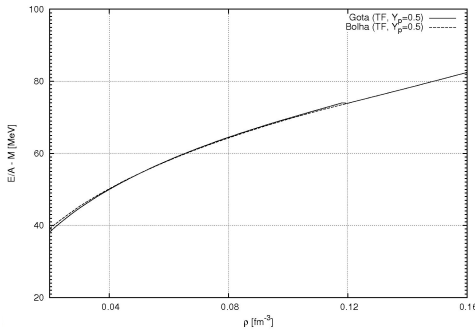


Figura 13 – Comparação da energia total por partícula para as geometrias gota e bolha, com fração de prótons  $Y_p = 0.5$  (TF)



Já na figura (13), fazemos uma comparação análoga, mas na aproximação TF. Pode-se observar como a energia da fase gota é um pouco menor do que a da fase bolha na região de densidades entre  $0.02 fm^{-3}$  e  $0.5 fm^{-3}$ , e um pouco maior entre  $0.05 fm^{-3}$  e  $0.12 fm^{-3}$ .

Esse resultado é particularmente interessante porque nos leva à suposição de que, ao levar em conta a correção devido aos termos de segunda ordem, a fase bolha seja o estado fundamental em ao menos parte da faixa de baixas densidades, enquanto que a fase gota possivelmente o é em uma região intermediária, o que é o inverso do que se obtém quando ignora-se a correção. Resultados concordantes com a nossa análise do caso TF encontram-se na referência (AVANCINI et al., 2008).

Finalmente, em densidades altas, o estado fundamental da matéria nuclear tende a ser ocupado pela fase homogênea. Quando isso acontece, temos que a tensão superficial da matéria nuclear é igual a zero, o que equivale a dizer que não há estruturas geométricas como as que encontramos na pasta. Determinamos as densidades mínimas para as quais isso ocorre, utilizando a equação (6.1) a seguir para calcular a tensão superficial  $\sigma$ .

$$\sigma = \int_{-\infty}^{\infty} dr \left[ \left( \frac{\partial \phi_0}{\partial r} \right)^2 - \left( \frac{\partial V_0}{\partial r} \right)^2 - \left( \frac{\partial b_0}{\partial r} \right)^2 \right] \quad (6.1)$$

Esta equação está dada e demonstrada na referência (AVANCINI et al., 2010). Rigorosamente, essa expressão é válida somente na aproximação de superfície fina. Na presença do campo coulombiano, esta aproximação não se aplica bem, no entanto como a interação eletromagnética não deve influir diretamente nas propriedades de superfície, ainda podemos utilizar a equação (6.1) (MENEZES; PROVIDÊNCIA, 1999). Na tabela (3), damos os valores encontrados:

| $Y_p$ | $\rho$ (Gota) | $\rho$ (Bolha) |
|-------|---------------|----------------|
| 0.5   | 0.107         | 0.114          |
| 0.4   | 0.113         | 0.107          |
| 0.3   | 0.092         | 0.098          |
| 0.2   | 0.087         | 0.086          |

Tabela 3 – Transição para a fase homogênea para vários valores de  $Y_p$



## 7 CONCLUSÃO

Nesta dissertação, nosso principal intento foi o de explorar uma maneira de prover um refinamento aos cálculos já realizados na literatura do comportamento das fases exóticas da matéria nuclear em estrelas de nêutrons utilizando o modelo de Walecka não-linear. Tal refinamento provém da expansão Wigner-Kirkwood das densidades e da energia, e da subsequente inclusão dos termos de segunda ordem em  $\hbar$  (aproximação de Thomas-Fermi estendida) às expressões utilizadas anteriormente em outros estudos. Este processo de adicionar a correção proveniente do modelo TFE aos algoritmos existentes foi a principal contribuição advinda deste trabalho. Atingimos parcialmente nossos objetivos, visto que, apesar de termos confiança no método empregado, nosso algoritmo foi incapaz de produzir resultados satisfatórios para frações de prótons baixas devido a problemas de implementação, e que algumas flutuações numéricas não puderam ser totalmente eliminadas.

No entanto, vários dos nossos resultados apresentaram maior confiabilidade, em particular para a matéria nuclear simétrica. Obtivemos curvas para a energia que se aproximam dos resultados originais (Thomas-Fermi), porém acrescentam a eles uma correção da ordem de 1-10% em grande parte da faixa de densidades. Encontramos também os valores da densidade global para os quais a fase pasta deixa de ser relevante e dá lugar a uma fase homogênea. Nossos dados indicaram também uma inversão nas geometrias dos estados fundamentais da pasta quando as correções de segunda ordem são adicionadas ao cálculo, um efeito que não esperávamos a princípio. No entanto, estados ligados às geometrias bolha e gota são praticamente degenerados, e uma pequena correção é capaz de mudar os estados mais favoráveis. Será de grande importância a continuação do estudo desse problema para determinar se de fato este é um efeito físico ou se foi introduzido por defeitos numéricos.

Em nosso trabalho com o algoritmo, detectamos possíveis entraves a ser resolvidos, de forma que a eficiência e precisão dos cálculos possam ser melhoradas. O principal deles é o cálculo numérico das derivadas e do laplaciano dos momentos de Fermi utilizados para o cálculo das correções de segunda ordem. Uma solução que está em fase de implementação ao final deste trabalho é o cálculo analítico de tais derivadas a partir das expansões dos campos na base do oscilador harmônico que, supomos, resultará em uma melhora na convergência do programa. Outra possibilidade que foi tentada é a implementação do

cálculo diretamente a partir das expressões (4.53) - (4.55), no entanto essa técnica resultou em problemas numéricos que ainda não foram resolvidos. Esperamos que com a solução desses entraves seja possível estender o cálculo para frações de prótons menores, obtendo uma visão mais completa do problema.

Além do aprimoramento do algoritmo, há outras perspectivas a serem exploradas com relação ao trabalho. O cálculo das estruturas com geometrias bidimensionais e unidimensionais na aproximação Thomas-Fermi estendida é uma delas. Este cálculo nos permitiria mapear a geometria dos estados fundamentais da pasta em função da densidade, um dado fundamental para analisar a ocorrência da fase pasta nas estrelas de nêutrons. Outro caminho de exploração seria variar a parametrização do modelo verificando, desta maneira, a sensibilidade dos resultados à mudança dos parâmetros. Estudos mais extensos permitiriam também a inclusão da temperatura no modelo, a partir das funções de distribuição para prótons, nêutrons e elétrons. Tais procedimentos já foram realizados (MARUYAMA et al., 2006; AVANCINI et al., 2008, 2010) na aproximação Thomas-Fermi, e trazem resultados importantes.

## REFERÊNCIAS

- AVANCINI, S. et al. Warm pasta phase in the thomas-fermi approximation. *Phys. Rev. C*, v. 82, p. 055807–1 – 055807–10, 2010.
- AVANCINI, S. et al. Warm and cold pasta phase in relativistic mean field theory. *Phys. Rev. C*, v. 78, p. 015802–1 – 015802–12, 2008.
- BOGUTA, J.; BODMER, A. Relativistic calculation of nuclear matter and the nuclear surface. *Nucl. Phys.*, A292, p. 413–428, 1977.
- BRACK, M.; BHADURI, R. *Semiclassical physics*. Boulder: Westview Press, 2003.
- BUNCA, J.; GMUCA, S. Asymmetric nuclear matter in the relativistic mean field approach with vector cross interaction. *Phys. Rev. C*, v. 68, p. 054318–1 – 054318–7, 2003.
- CENDELLES, M. *Semiclassical approach to relativistic nuclear mean field theory*. 124 p. Tese (Doutorado) — Universitat de Barcelona, Barcelona, 1992.
- CENDELLES, M.; SCHUCK, P.; VIÑAS, X. Thomas-fermi theory for atomic nuclei revisited. *Ann. Phys.*, v. 322, p. 363–396, 2007.
- CENDELLES, M. et al. On the relativistic extended thomas-fermi method. *Nucl. Phys.*, A519, p. 73–82, 1990.
- CENDELLES, M. et al. Semiclassical approximations in non-linear  $\sigma\omega$  models. *Nucl. Phys.*, A537, p. 486–500, 1992.
- CENDELLES, M. et al. A semiclassical approach to relativistic nuclear mean field theory. *Ann. Phys.*, v. 221, p. 165–204, 1993.
- CENDELLES, M. et al. Variational wigner-kirkwood  $\hbar$  expansion. *Ann. Phys.*, v. 266, p. 207–243, 1998.
- DE GROOT, S. R.; SUTTORP, L. G. *Foundations of electrodynamics*. Amsterdam: North-Holland, 1972.
- DEL ESTAL, M.; CENDELLES, M.; VIÑAS, X. Variational wigner-kirkwood approach to relativistic mean field theory. *Phys. Rev. C*, v. 56, p. 1774–1781, 1997.

GRAMMATICOS, B.; VOROS, A. Semiclassical approximations for nuclear hamiltonians. *Ann. Phys.*, v. 123, p. 359–380, 1979.

GREINER, W.; MARUHN, J. *Nuclear models*. Berlin: Springer-Verlag, 1996.

MARCHIOLLI, M. Mecânica quântica no espaço de fase: I. formulação de weyl-wigner. *Rev. Bras. Ensino Fís.*, v. 24, n. 4, p. 421–436, 2002.

MARUYAMA, T. et al. Pasta structures in compact stars. *Recent Developments in Physics*, v. 7, p. 1–57, 2006.

MENEZES, D.; PROVIDÊNCIA, C. Nucleation process in asymmetric hot nuclear matter. *Phys. Rev. C*, v. 60, p. 024313–1 – 024313–11, 1999.

PARR, R.; YANG, W. *Density-functional theory of atoms and molecules*. New York: Oxford University Press, 1989. (International series of monographs on chemistry, no. 16).

RING, P.; SCHUCK, P. *The nuclear many-body problem*. New York: Springer-Verlag, 1980.

SEROT, B. et al. *The relativistic nuclear many-body problem*. New York: Plenum, 1986. (Advances in nuclear physics, v.16).

VON-EIFF, D.; WEIGEL, M. Relativistic thomas-fermi calculations of finite nuclei including quantum corrections. *Phys. Rev. C*, v. 46, p. 1797–1810, 1992.