

Ejercicio Bosones

Enunciado

Considere un sólido unidimensional, que puede modelarse como N átomos iguales unidos por resortes iguales de frecuencia Ω . El largo de cada resorte es a , con lo cual la longitud total del sólido es $L = Na$ (suponga que hay suficientes resortes como para que esta longitud sea macroscópica). Los modos normales del sólido están etiquetados por un número natural $n = 1, \dots, N$, y su frecuencia exacta es $\omega = 2\Omega \left| \sin \left(\frac{ka}{2} \right) \right|$, donde $k = \frac{\pi n}{L}$.

- Bajo la aproximación de Debye, es decir en el límite $ka \ll 1$, obtenga una expresión aproximada para $\omega(k)$ y compárela gráficamente con la expresión exacta. Obtenga la velocidad del sonido $c = \frac{\omega}{|k|}$, la densidad de estados $g(\omega)$ y la frecuencia de Debye ω_D .
- Bajo la misma aproximación, y en el límite de bajas temperaturas ($kT \ll \omega_D$), calcule la fuerza f asociada a los fonones en función de T , L y c (recuerde que, en el caso unidimensional, $-f$ juega el rol de p). *Un valor útil:* $\zeta(2) = \frac{\pi^2}{6}$.
- Muestre que para estas condiciones se cumple que $U = -fL$ (definimos la energía de forma que valga 0 en el estado fundamental).
- ¿Seguirá valiendo la relación $U = -fL$ fuera del límite de bajas temperaturas y de la aproximación de Debye? Discuta y justifique realizando las cuentas que considere necesarias.

Resolución

(a) Bajo la aproximación de Debye, hacemos tender $a \rightarrow 0$ y nos quedamos con una relación de dispersión aproximadamente lineal

$$\omega = 2\Omega \left| \sin \left(\frac{ka}{2} \right) \right| \approx 2\Omega \frac{a}{2} |k| \quad (1)$$

donde la velocidad del sonido corresponde al coeficiente de dicha relación lineal $c = a\Omega$.

Para calcular la densidad de estados podemos escribir a la suma sobre estados como suma sobre los posibles k . Recordando que los k permitidos van desde 0 hasta π/a , equiespaciados por una separación de $\Delta k = \pi/L$ entre ellos

$$\sum_{\text{estados}} = \frac{1}{\Delta k} \sum_{k=0}^{\pi/a} \Delta k \approx \frac{L}{\pi} \int_0^{\pi/a} dk \quad (2)$$

Realizando el cambio de variables $\omega = ck$

$$\sum_{\text{estados}} \approx \frac{L}{\pi c} \int_0^{c\pi/a} d\omega \quad (3)$$

podemos identificar que la densidad de estados es $g(\omega) = \frac{L}{\pi c}$.

Por último, debemos garantizar que el número de modos normales sea igual al número de grados de libertad. En este caso, al tener N átomos en un problema unidimensional, hay N grados de libertad. Este número debe coincidir con la integral de la densidad de estados $g(\omega)$ entre 0 y ω_D

$$N = \int_0^{\omega_D} g(\omega) = \frac{L}{\pi c} \omega_D \quad (4)$$

Despejando ω_D y recordando que $L = Na$

$$\omega_D = \frac{\pi c}{a} \quad (5)$$

El gráfico lo hacemos solo en el rango de valores que puede tomar k según el enunciado, es decir $0 < k \leq \frac{\pi}{a}$

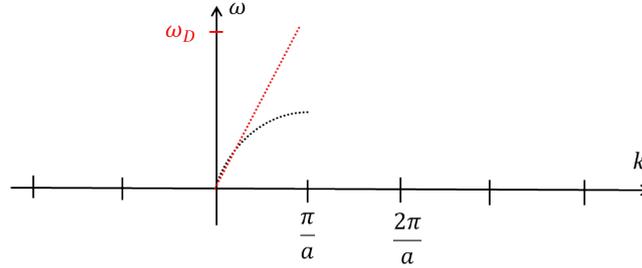


Figura 1

(b) Para obtener la fuerza asociada a los fonones, recordamos que estos se distribuyen según la estadística de Bose-Einstein. Partimos de la expresión general para $\ln(Z_{GC})$ para bosones

$$\ln(Z_{GC}) = - \sum_{\text{estados}} \ln(1 - e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)}) \quad (6)$$

y reemplazamos la suma sobre estados por una integral sobre energías, y recordamos que para fonones $\mu = 0$ y $\epsilon = \hbar\omega$. La energía del estado fundamental del oscilador armónico ($\hbar\omega/2$) no la consideramos como contribución asociada a los fonones, ya que cada uno de estos es una *excitación* del oscilador.

$$\ln(Z_{GC}) = - \int_0^{\omega_D} d\omega g(\omega) \ln(1 - e^{-\beta\hbar\omega}) \quad (7)$$

Aplicando el método de integración por partes

$$\ln(Z_{GC}) = - \frac{L}{\pi c} \omega_D \ln(1 - e^{-\beta\hbar\omega_D}) + \frac{L}{\pi c} \int_0^{\omega_D} d\omega \frac{\beta\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \quad (8)$$

Como estamos en el límite de bajas temperaturas, los fonones ocuparán solo los estados con $\omega \ll \omega_D$, con lo cual podemos aproximar la integral anterior por una integral impropia. Además podemos despreciar el primer término ya que $\ln(1 - e^{-\beta\hbar\omega_D})$ tiende a cero cuando $\beta \rightarrow \infty$

$$\ln(Z_{GC}) \approx \frac{L}{\pi c} \int_0^{\infty} d\omega \frac{\beta\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \quad (9)$$

y realizar el cambio de variables $t = \beta\hbar\omega$, obtenemos

$$\ln(Z_{GC}) \approx \frac{L}{\pi c} \frac{1}{\beta\hbar} \int_0^{\infty} dt \frac{t}{e^t - 1} \quad (10)$$

Y aquí, recordando la definición de las funciones $g_\nu(z)$, notamos que el resultado de la integral es $\Gamma(2)g_2(1) = \zeta(2) = \pi^2/6$, con lo cual

$$\ln(Z_{GC}) \approx \frac{L}{\pi c} \frac{kT}{\hbar} \zeta(2) = \frac{\pi L k T}{6 c \hbar} \quad (11)$$

A partir de este resultado podemos calcular el potencial grancanónico como $\Xi = -kT \ln(Z_{GC})$. La fuerza (en analogía con la presión) la podemos calcular a partir de la relación de Gibbs-Duhem. Para 1D esta se escribe

$$T.S + f.L - \mu N = U \quad (12)$$

con lo cual, si pasamos restando el primer y tercer término, obtenemos

$$f.L = \Xi = -kT \ln(Z_{GC}) \quad (13)$$

De ahí podemos obtener que

$$f = -\frac{\pi(kT)^2}{6c\hbar} \quad (14)$$

Otra forma de calcular la fuerza hubiera sido a partir de

$$f = \left. \frac{\partial \Xi}{\partial L} \right)_{T,\mu} \quad (15)$$

(c) Para calcular la energía media del sistema partimos de

$$U = \int_0^{\omega_D} d\omega g(\omega) \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \quad (16)$$

Podemos notar en el límite de bajas temperaturas (donde reemplazamos ω_D por ∞) esta expresión se parece mucho a la ec (9), excepto por un factor β . En efecto, si multiplicamos la ec (9) por kT , notamos que coincide. Si notan esto en este punto, se evitan repetir todas las cuentas para calcular U , ya que comprobamos que

$$U = kT \ln(Z_{GC}) = -\Xi = -fL \quad (17)$$

(d) Notarán que si no se aplica el límite de bajas temperaturas, la relación $U = -fL$ deja de valer ya que no podemos despreciar el término de borde de la ec (8).

Aun más, al salirse de la aproximación de Debye, la densidad de estados ya no será independiente de ω . No es necesario calcular cuanto vale, pero simplemente saber que al aplicar integración por partes para el $\ln(Z_{GC})$ ahora se obtiene

$$\ln(Z_{GC}) = -\int_0^{\omega_D} d\omega g(\omega) \ln(1 - e^{-\beta\hbar\omega}) = -\frac{L}{\pi c} \omega_D \ln(1 - e^{-\beta\hbar\omega_D}) + \int_0^{\omega_D} d\omega \frac{\beta\hbar G(\omega)}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \quad (18)$$

donde $G(\omega)$ es la primitiva de $g(\omega)$, es decir $G'(\omega) = g(\omega)$. Por otro lado, la expresión para U seguirá siendo

$$U = \int_0^{\omega_D} d\omega g(\omega) \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \quad (19)$$

La igualdad entre U/kT y la integral de la expresión (18) solo valdrá si $G(\omega) = g(\omega)\omega$. Esta condición solo podrá cumplirse en el caso que $g(\omega) = cte$. Para ver esto, podemos derivar de ambos lados de $G(\omega) = g(\omega)\omega$, y recordar que $G'(\omega) = g(\omega)$

$$g(\omega) = g'(\omega)\omega + g(\omega) \quad (20)$$

por lo tanto

$$0 = g'(\omega)\omega \quad (21)$$

con lo cual $g(\omega)$ debe ser una constante.

Quiénes no se den cuenta de esto, notarán al calcular la densidad de estados fuera de la aproximación de Debye que

$$g(\omega) = a\sqrt{\frac{C}{m} - \frac{\omega^2}{4}} \quad (22)$$

y que al realizar integración por partes para $\ln(Z_{GC})$ obtienen una función diferente a la que integran para calcular U .

Hay muchos caminos y maneras de justificar este inciso. No se preocupen si la suya no coincide con alguna de las que elegí acá. Mientras sea correcta, será tenida en cuenta.