

Física Teórica 3 – primer cuatrimestre de 2024

Aproximación de sumas por integrales*

Veremos aquí nuevamente el problema de aproximar las sumas sobre estados cuánticos por integrales. Usaremos como ejemplo el problema del gas ideal en un potencial armónico isótropo. Una de las herramientas que tienen que llevarse de este apunte es la llamada aproximación semiclásica, en donde la suma sobre estados cuánticos es aproximada por una integral en el espacio de fase clásico.

En el problema general, uno tiene partículas no interactuantes en cierto potencial. Supondremos que el espectro es discreto. El estado de una partícula estará caracterizado por un vector de números enteros \mathbf{n} . La energía del estado \mathbf{n} será $\epsilon(\mathbf{n})$. En mecánica estadística, interesa calcular sumas de la forma

$$\sigma = \sum_{\mathbf{n}} f[\epsilon(\mathbf{n})]. \quad (1)$$

El objetivo es aproximar estas sumas por integrales.

En un potencial armónico isótropo, los estados de una partícula están caracterizados por tres números enteros mayores o iguales a cero, $\{n_1, n_2, n_3\}$. La energía del estado \mathbf{n} es

$$\epsilon(\mathbf{n}) = \hbar\omega(n_1 + n_2 + n_3) + \epsilon_0, \quad (2)$$

donde

$$\epsilon_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega. \quad (3)$$

Si hay una sola clase de partículas, la energía puede redefinirse de tal modo que el estado fundamental tenga energía cero,

$$\epsilon(\mathbf{n}) = \hbar\omega(n_1 + n_2 + n_3). \quad (4)$$

La mecánica estadística del gas en una trampa armónica involucra sumas de la forma

$$\sigma = \sum_{\mathbf{n}} f[\epsilon(\mathbf{n})] = \sum_{n_1, n_2, n_3=0}^{\infty} f[\hbar\omega(n_1 + n_2 + n_3)]. \quad (5)$$

Por ejemplo, el número de partículas en un gas de bosones,

$$N = \sum_{n_1, n_2, n_3=0}^{\infty} \frac{1}{z^{-1} \exp[\beta\hbar\omega(n_1 + n_2 + n_3)] - 1}. \quad (6)$$

O el logaritmo de la función de partición de un gas de fermiones,

$$\log \mathcal{Z} = \sum_{n_1, n_2, n_3=0}^{\infty} \log \left\{ 1 + z \exp \left[-\beta\hbar\omega(n_1 + n_2 + n_3) \right] \right\}. \quad (7)$$

*zanellaj@df.uba.ar

En el límite termodinámico, uno hace tender ω a cero, de modo que es razonable estudiar el caso en que $\beta\hbar\omega \ll 1$. Cuando esto sucede, la energía varía muy lentamente con \mathbf{n} . Entonces, es posible aproximar las sumas por integrales. Veremos varios métodos aplicables al problema del oscilador. Sorpresivamente, no todos conducen al mismo resultado. De todos estos métodos, el único que se generaliza a otros problemas es el de la aproximación semiclásica. Los otros son particulares del problema del oscilador armónico.

1.

La suma se aproxima por una integral triple y la integral triple se resuelve con un cambio de variables en coordenadas cartesianas:

$$\sigma = \sum_{n_1, n_2, n_3=0}^{\infty} f[\hbar\omega(n_1 + n_2 + n_3)] \simeq I = \int_0^{\infty} dn_1 \int_0^{\infty} dn_2 \int_0^{\infty} dn_3 f[\hbar\omega(n_1 + n_2 + n_3)]. \quad (8)$$

El cambio de variables $x = n_1$, $y = n_2$, $n = n_1 + n_2 + n_3$ tiene jacobiano igual a uno. La coordenada n puede variar entre cero e infinito. Fijado n , la coordenada x puede variar entre cero y n . Fijados n y x , la coordenada y puede variar entre cero y $n - x$:

$$I = \int_0^{\infty} dn \int_0^n dx \int_0^{n-x} dy f(\hbar\omega n). \quad (9)$$

Las integrales en x e y pueden resolverse inmediatamente:

$$I = \int_0^{\infty} dn \frac{n^2}{2} f(\hbar\omega n) = \frac{1}{(\hbar\omega)^3} \int_0^{\infty} d\epsilon \frac{\epsilon^2}{2} f(\epsilon). \quad (10)$$

2.

La suma se aproxima por una integral triple y la integral triple se resuelve con un cambio de variables que transforma los planos $n_1 + n_2 + n_3 = n$ en esferas de radio \sqrt{n} . La condición $n_1 + n_2 + n_3 = n$ puede llevarse a la forma $x^2 + y^2 + z^2 = n$ mediante el cambio de variables

$$n_1 = x^2, \quad n_2 = y^2, \quad n_3 = z^2. \quad (11)$$

Entonces,

$$I = 8 \int_0^{\infty} dx \int_0^{\infty} dy \int_0^{\infty} dz xyz f(\hbar\omega r^2). \quad (12)$$

En coordenadas esféricas, queda

$$I = 8 \int_0^1 d(\cos \theta) \int_0^{\pi/2} d\varphi \int_0^{\infty} dr \sin^2 \theta \cos \theta \frac{\sin 2\varphi}{2} r^5 f(\hbar\omega r^2). \quad (13)$$

Las integrales angulares pueden resolverse fácilmente:

$$I = \int_0^\infty dr r^5 f(\hbar\omega r^2) = \frac{1}{(\hbar\omega)^3} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^2}{2} f(\epsilon). \quad (14)$$

La integral de partida era la misma, así que no es ninguna sorpresa que hallamos llegado a la misma integral que antes.

3.

La aproximación semiclásica. Ahora ya no se trata simplemente de sustituir sumas por integrales. Hay un resultado en mecánica cuántica que permite asociar al elemento de volumen $d^3r d^3p$ en el espacio de fase clásico un número dn de estados cuánticos,

$$dn = \frac{d^3r d^3p}{h^3}. \quad (15)$$

Entonces, una suma sobre estados cuánticos de una función de la energía se aproxima del siguiente modo:

$$\sigma = \sum_{\mathbf{n}} f[\epsilon(\mathbf{n})] \simeq \frac{1}{h^3} \int d^3r \int d^3p f[H(\mathbf{r}, \mathbf{p})], \quad (16)$$

donde H es el hamiltoniano clásico. Para el caso del oscilador armónico isótropo,

$$\sigma \simeq I' = \frac{1}{h^3} \int d^3r \int d^3p f\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 r^2}{2}\right). \quad (17)$$

Mediante el cambio de variables

$$u^2 = \frac{p^2}{2m}, \quad v^2 = \frac{m\omega^2 r^2}{2}, \quad (18)$$

resulta

$$I' = \frac{8}{(h\omega)^3} \int d^3u \int d^3v f(u^2 + v^2). \quad (19)$$

Definiendo un vector $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^6$ con coordenadas cartesianas $\{u_1, u_2, u_3, v_1, v_2, v_3\}$, la integral anterior puede pensarse como una integral en d^6q ,

$$I' = \frac{8}{(h\omega)^3} \int d^6q f(q^2) = \frac{8\Omega_6}{(h\omega)^3} \int_0^\infty dq q^5 f(q^2). \quad (20)$$

Pero $\Omega_6 = \frac{2\pi^3}{\Gamma(3)} = \pi^3$. Así, cambiando a la variable $\epsilon = q^2$,

$$I' = \frac{1}{(h\omega)^3} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^2}{2} f(\epsilon). \quad (21)$$

Recuperamos los resultados anteriores, es decir, $I' = I$.

La aproximación semiclásica de la suma sobre estados,

$$\sum_{\mathbf{n}} f[\epsilon(\mathbf{n})] \simeq \frac{1}{h^3} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{p} f[H(\mathbf{r}, \mathbf{p})], \quad (22)$$

tiene la ventaja de que no requiere resolver la ecuación de Schrödinger. Aún los problemas más sencillos, como el de una partícula dentro de una esfera o el de una partícula en una caja en un campo gravitatorio uniforme, tienen soluciones que involucran funciones especiales. El espectro de energías suele depender de los ceros de estas funciones, o de los ceros de sus derivadas. La distribución de estos ceros no es trivial, de modo que el solo hecho de plantear la suma sobre estados ya es un problema complicado.

4.

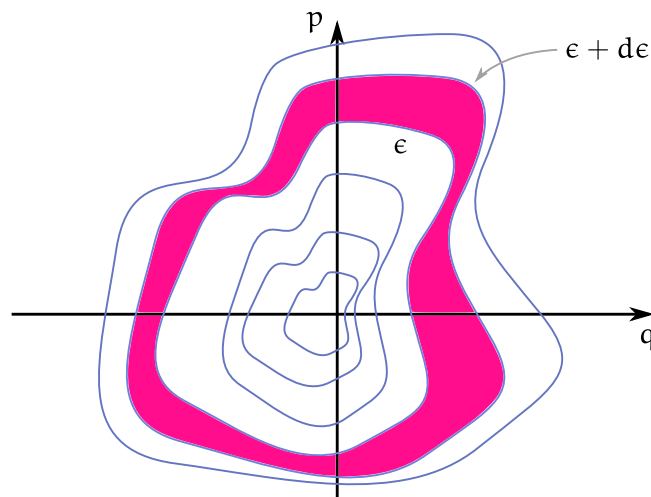
La aproximación semiclásica vía la densidad de estados. En la integral

$$I = \frac{1}{h^3} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{p} f[H(\mathbf{r}, \mathbf{p})], \quad (23)$$

el integrando es una función sólo de la energía. Uno puede pensar entonces en hacer un cambio de variables en donde una de las nuevas variables sea la energía. Las integrales en el resto de las variables serán cierta función de la energía, de modo que

$$I = \int_0^{\infty} d\epsilon g(\epsilon) f(\epsilon). \quad (24)$$

Hay que determinar $g(\epsilon)$, que es la llamada densidad de estados. La ecuación $H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \epsilon$ define una hipersuperficie en el espacio de fase. El espacio de fase puede pensarse como la unión de estas hipersuperficies, como si fueran las capas de una cebolla.



La figura muestra el caso de un solo grado de libertad. El plano qp puede descomponerse en la unión de las regiones infinitesimales definidas por las condiciones

$$\epsilon \leq H(q, p) < \epsilon + d\epsilon. \quad (25)$$

Cuando hay más de un grado de libertad, estas regiones son especies de láminas de espesor infinitesimal. Supongamos que $\Gamma(\epsilon)$ sea el volumen encerrado por la hipersuperficie $H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \epsilon$. Entonces $d\Gamma(\epsilon) = \Gamma(\epsilon + d\epsilon) - \Gamma(\epsilon)$ es el volumen de la región infinitesimal entre las hipersuperficies $H = \epsilon$ y $H = \epsilon + d\epsilon$. Luego,

$$\int d^3r \int d^3p f[H(\mathbf{r}, \mathbf{p})] = \int_0^\infty d\Gamma(\epsilon) f(\epsilon) = \int_0^\infty d\epsilon \Gamma'(\epsilon) f(\epsilon). \quad (26)$$

A partir de aquí leemos que la densidad de estados es

$$g(\epsilon) = \frac{1}{h^3} \Gamma'(\epsilon). \quad (27)$$

Entonces, lo que hay que hacer es calcular $\Gamma(\epsilon)$ y tomar su derivada. Todo se reduce, finalmente, a calcular el volumen del interior de las hipersuperficies $H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \epsilon$,

$$\Gamma(\epsilon) = \left(\int d^3r \int d^3p \right)_{H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \leq \epsilon}. \quad (28)$$

Esto tiene la apariencia del volumen calculado en el ensamble microcanónico, pero debe recordarse que, en su caso, el espacio de fase era el de las N partículas. Aquí es el espacio de fase de una sola partícula.

En el caso particular del oscilador armónico, como H es cuadrático en r y en p , la ecuación $H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \leq \epsilon$ define el interior de un elipsoide en seis dimensiones. El mismo cambio de variables que usamos en la sección anterior, conduce al siguiente resultado:

$$\Gamma(\epsilon) = \frac{(2\pi)^3}{\omega^3} \int_0^{\sqrt{\epsilon}} dq q^5 = \frac{(2\pi)^3 \epsilon^3}{6\omega^3}. \quad (29)$$

La densidad de estados es

$$g(\epsilon) = \frac{1}{h^3} \Gamma'(\epsilon) = \frac{1}{(\hbar\omega)^3} \frac{\epsilon^2}{2}. \quad (30)$$

Finalmente, llegamos a los mismos resultados de antes:

$$I = \frac{1}{(\hbar\omega)^3} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^2}{2} f(\epsilon). \quad (31)$$

5.

En el caso del oscilador armónico, la energía es una función tan sencilla de los números n_i , que es posible, con un poco de combinatoria, transformar la suma triple en una suma simple. La suma simple puede ser, entonces, aproximada por una integral. Sorprendentemente, aunque la suma es la misma, sólo que escrita de otro modo, la integral no se reduce a la que obtuvimos con los otros métodos.

La energía depende únicamente de la suma $n_1 + n_2 + n_3$. La suma sobre estados puede organizarse como

$$\sigma = \sum_{n_1, n_2, n_3=0}^{\infty} f[\hbar\omega(n_1 + n_2 + n_3)] = \sum_{n=0}^{\infty} \Omega(n)f(\hbar\omega n), \quad (32)$$

donde $\Omega(n)$ es el número de estados tales que $n_1 + n_2 + n_3 = n$. El número de maneras de sumar un entero n mediante tres enteros no negativos (teniendo en cuenta el orden de los sumandos) es equivalente al problema de distribuir n fichas indistinguibles en tres urnas distinguibles:

$$\Omega(n) = \frac{(n+2)!}{2!n!} = \frac{(n+2)(n+1)}{2}. \quad (33)$$

Entonces,

$$\sigma = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n+2)(n+1)}{2} f(\hbar\omega n). \quad (34)$$

Ahora bien, la aproximación directa de esta suma por una integral es

$$\begin{aligned} \sigma &\simeq I'' = \int_0^{\infty} dn \frac{(n+2)(n+1)}{2} f(\hbar\omega n) \\ &= \frac{1}{(\hbar\omega)^3} \int_0^{\infty} d\epsilon \frac{\epsilon^2}{2} f(\epsilon) + \frac{3}{2(\hbar\omega)^2} \int_0^{\infty} d\epsilon \epsilon f(\epsilon) + \frac{1}{\hbar\omega} \int_0^{\infty} d\epsilon f(\epsilon). \end{aligned} \quad (35)$$

Aunque la suma no ha cambiado, su aproximación por una integral conduce a un resultado distinto de los anteriores. Vemos que

$$I'' = I + \frac{3}{2(\hbar\omega)^2} \int_0^{\infty} d\epsilon \epsilon f(\epsilon) + \frac{1}{\hbar\omega} \int_0^{\infty} d\epsilon f(\epsilon). \quad (36)$$

Aunque esta es una mejor aproximación, cuando $\omega \rightarrow 0$, el término dominante es el primero:

$$I'' \simeq I. \quad (37)$$

Así, en este régimen, terminamos recuperando los resultados de las secciones anteriores. En algunos problemas, no es del todo claro que los otros términos puedan despreciarse siempre. Ver al respecto el problema 6 de la Guía 6.