

Licenciatura
Física
F 718m

MODELO UNIDIMENSIONAL DE UNA RED ACOTADA

Jaime Rössler Bonzi

Facultad de Ciencias

UNIVERSIDAD DE CHILE



Licenciatura
Física
F718m

ciatura
a

526319

UNIVERSIDAD DE CHILE
SANTO SANTIAGO ORIENTE
P.O. BOX 136

ERRATAS--

Errata 1-

En el lugar donde se hace referencia a esta errata fué omitido el siguiente párrafo:

—El transporte del campo local y total a la materia viene dado respectivamente por:

$$\phi_L = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \{q_k, p_k\} \frac{\sin L\pi j}{N} \frac{\sin L\pi k}{N} \omega_j \omega_k \quad (3-20)$$

$$\phi = -\frac{1}{2} \sum_{k=0}^{N-1} \{q_k, p_k\} \omega_k^2 \quad (3-21)$$

Por último, al pasar a coordenadas normales en (3-13) debemos tomar $f(t) = -g(t)$, dado (2-7); y por tanto:

$$\phi = \left[\frac{Y}{2N} \right]^{\frac{1}{2}} f(t) \sum_k p_k v_k [1 + (-1)^k] \quad (3-22)$$

NOTACION EMPLEADA/

Aprox. de H-F : aproximación de Hartree-Fock.

$J_n(x)$: función de Bessel de orden n.

(F.E.B.C.): condiciones de borde de extremos libres.

(C.B.C.): condiciones de borde cíclicas.

En general en la física del sólido teórica se trabaja con redes cristalinas no acotadas; tenemos como ejemplo de ello la derivación del teorema de Bloch, el tratamiento de bandas de conducción en los metales y el estudio del transporte de energía en una red (ver Ziman 59)

Aun en la mecánica estadística es habitual despreciar el efecto de las paredes que contienen un gas.

Por lo tanto es necesario introducir un artificio con el objeto que el número de grados de libertad coincida con el de una red acotada y así, con un número discreto de cuasi-momentos, poder calcular la densidad de estados (en el caso de fonones para conocer el calor específico; para electrones, aplicando el principio de exclusión de Pauli, determinar el nivel de Fermi, por ejemplo)

Esto se logra al imponer, para el caso de electrones, que la función de onda de un electrón (aprox. de H-F) satisfaga:

$$\Psi(\vec{X} + \vec{A}_i) = \Psi(\vec{X}) \quad (1-1)$$

donde \vec{A}_i , $i=1, 2, 3$ son las aristas de nuestro cristal y Ψ la función de onda de un electrón.

Análogamente para las vibraciones de un cristal con N_1, N_2, N_3 átomos por lado respectivamente, imponemos como condición de borde:

$$U(\vec{N}_i + \vec{n}) = U(\vec{n}) \quad (1-2)$$

donde $U(\vec{N}_i + \vec{n})$ representa el desplazamiento del equilibrio del átomo $\vec{n} = (n_1, n_2, n_3)$ y $\vec{N}_i = (N_i, 0, 0)$; ... $i=1, 2, 3$

Estas son las llamadas condiciones de borde cíclicas que designaremos por (CBC).

No obstante no estamos reproduciendo en ninguno de estos casos la situación real. Al plantear el problema correctamente se encuentran dificultades matemáticas graves; los extremos hacen el papel de "fuentes" y en vez de resolver una ecuación homogénea debemos tratar la ecuación inhomogénea (ver Ashkin 64)

Afortunadamente se tiene abundante evidencia que la perturbación producida por la "fuente" decae rápidamente hacia el interior de la muestra.

Sin embargo aún persisten problemas que resulta desatado plantear con condiciones de borde cíclicas; P.ej.

Consideremos una red unidimensional formada por N átomos iguales, de masa M ; postulamos que el potencial interatómico tiene un sólo mínimo, a una distancia A del centro del átomo y que:

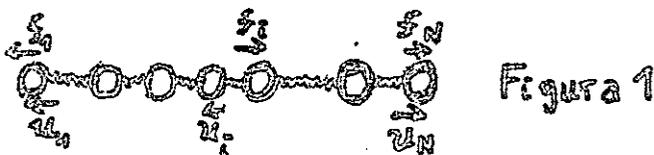
$$\Delta = \frac{V'(2A)}{AV''(A)} \quad (2-1)$$

donde V es el potencial interatómico, $V' = \frac{\partial V}{\partial x}$, $V'' = \frac{\partial^2 V}{\partial x^2}$ [ver nota (1)]. Entonces, para vibraciones pequeñas de los átomos el potencial puede ser reemplazado por un potencial armónico de constante elástica:

$$\gamma = V''(A) \quad (2-2)$$

que actúa entre los vecinos más próximos.

Sea $u_n(t)$ el desplazamiento del equilibrio de la masa N -ésima, y $f_n(t)$ la fuerza externa que actúa sobre ella (ver figura 1)



El Lagrangiano del sistema está dado por:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}M \sum_{n=1}^N \dot{u}_n^2 - \frac{1}{2}\gamma \sum_{n=1}^N (u_n - u_{n-1})^2 + \gamma \sum_{n=1}^N u_n f_n(t) \quad (2-3)$$

donde hemos adoptado la notación simplificatoria:

$$u_0 = u_1 \quad (2-4)$$

$$u_N = u_{N+1}$$

En la literatura se designan las condiciones de borde (2-4) por (FEBC) (condiciones de extremos libres), nombre que no es apropiado ya que negaría la existencia de fuerzas en los extremos por tanto debemos entenderlo en el sentido que la red no está ligada a sí misma por los extremos.

La transformación de coordenadas que separa nuestro Lagrangiano está dada por:

$$u_n = \left(\frac{2}{NM}\right)^{1/2} \sum_{k=0}^{N-1} q_k \cos\left[(n-\frac{1}{2})\frac{\pi k}{N}\right]$$

y su inversa:

(2-5)_a

$$q_k = \left(\frac{2M}{N}\right)^{1/2} \sum_{n=1}^N u_n \cos\left[(n-\frac{1}{2})\frac{\pi k}{N}\right]$$
(2-5)_b

siempre que impongamos la condición que el centro de gravedad del sistema esté en reposo:

$$\sum_{n=1}^N u_n = 0$$
(2-6)

lo que implica:

$$\sum_{n=1}^N f_n(t) = 0$$
(2-7)

En término de estas coordenadas nuestro Lagrangiano toma la forma:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{N-1} \{ \dot{q}_k^2 - \omega_k^2 q_k^2 + 2 q_k F_k(t) \}$$
(2-8)

donde hemos introducido la notación:

$$F_k(t) = \left(\frac{2}{NM}\right)^{1/2} \gamma \sum_{n=1}^N f_n(t) \cos\left[(n-\frac{1}{2})\frac{\pi k}{N}\right]$$
(2-9)_a

$$\omega_k^2 = \frac{4\gamma}{M} \text{sen}^2 \frac{\pi k}{2N}$$
(2-9)_b

La ecuación (2-8) implica $P_k = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} = \dot{q}_k$, lo cual nos permite replantear nuestro problema en el formalismo Hamiltoniano:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{N-1} \{ P_k^2 + \omega_k^2 q_k^2 - 2 q_k F_k(t) \}$$
(2-10)

Mediante las reglas de conmutación:

$$[q_k, p_l] = i\hbar \delta_{kl}$$
(2-11)_a

$$[q_k, q_l] = [p_k, p_l] = 0$$
(2-11)_b

transformamos nuestras coordenadas generalizadas dependientes del tiempo en operadores de la mecánica cuántica; reemplazando estos operadores queda desde ya formulado cuánticamente el problema.

La ecuación de Schrödinger resultante del Hamiltoniano (2-10) es claramente separable y se reduce al estudio de N osciladores armónicos estimulados por fuerzas externas: las que aparecen en (2-9)_a

Para simplificar la notación definimos :

$$H(P, q, t) = \sum_{k=0}^{N-1} H_k(P_k, q_k, t) \quad (2-12)$$

además separamos cada H_k en una parte independiente del tiempo y una perturbación dependiente del tiempo:

$$H_k(P_k, q_k, t) = H_{k0}(P_k, q_k) + V_k(q_k, t) \quad (2-13)$$

con:

$$\left\{ \begin{array}{l} H_{k0}(P_k, q_k) = \frac{1}{2}(P_k^2 + \omega_k^2 q_k^2) \end{array} \right. \quad (2-14)_a$$

$$\left\{ \begin{array}{l} V_k(q_k, t) = -q_k F_k(t) \end{array} \right. \quad (2-14)_b$$

Sobre la función de onda de los N -óscilares en $t=0$, imponemos las condiciones cuánticas :

$$\langle \dot{u}_n(0) \rangle = 0, \quad \langle \dot{u}_n(0) \rangle = 0 \quad (2-15)$$

junto con la forma del paquete: $\langle \rangle$ representa un promedio sobre la función de onda.

Además suponemos las fuerzas nulas antes de $t=0$

$$f_n(t) = 0 \quad t < 0 \quad (2-16)$$

La solución cuántica de nuestro problema está dada por:

$$\Psi(q_k) = e^{-it \sum_{n_k} E_{n_k} - \frac{i}{2k} \int_0^t [\dot{x}_k^2 - \omega_k^2 x_k^2] dt} e^{i \sum_{n_k} \frac{q_k \dot{x}_k}{k}} \chi_{n_k}(q_k - x_k(t)) \quad (2-17)$$

ver: (Band 62) $\chi_{n_k}(q_k)$ representa la solución del k -ésimo oscilador armónico con Hamiltoniano (2-14), en la representación de posición y con n_k excitaciones, E_{n_k} representa la energía que

posee tal oscilador (nos dimos arbitrariamente nuestra solución correlacionada con tal forma de paquete de ondas). Finalmente $X_k(t)$ está determinado por la ecuación diferencial:

$$\ddot{X}_k = -\omega_k^2 X_k + F_k(t) \quad (2-18)$$

con condición de borde:

$$X_k(0) = 0, \dot{X}_k(0) = 0 \quad (2-19)$$

La solución explícita de la ecuación (2-18) con condiciones de borde (2-19) está dada por:

$$X_k(t) = \frac{1}{\omega_k} \int_0^t F_k(s) \text{Sen } \omega_k(t-s) ds \quad (2-20)_a$$

$$\dot{X}_k(t) = \int_0^t F_k(s) \text{Cos } \omega_k(t-s) ds \quad (2-20)_b$$

Dentro del cuadro de Schrödinger y sin usar una representación determinada, la solución (2-17) se expresa por:

$$|\psi\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t [\dot{X}_k^2 - \omega_k^2 X_k^2] dt} e^{\frac{i}{\hbar} q_k \dot{X}_k} e^{-\frac{i}{\hbar} p_k X_k} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0} |n_k\rangle \quad (2-21)$$

con $|n_k\rangle$ el ket del oscilador armónico k-ésimo en estado propio de energía; (2-21) es válido para $t > 0$, para $t < 0$ obviamente la solución es $e^{-\frac{i}{\hbar} H_0} |n_k\rangle$.

Con (2-18) podemos calcular los promedios:

$$\langle q_k(t) \rangle = \langle \psi(t) | q_k | \psi(t) \rangle = X_k(t) \quad (2-22)_a$$

$$\langle p_k(t) \rangle = \langle \psi(t) | p_k | \psi(t) \rangle = \dot{X}_k(t) \quad (2-22)_b$$

Lo que de paso permite ver que se satisface (2-15)

Otros promedios simples de calcular son:

$$\langle q_k^2 \rangle = X_k^2 + \langle n_k | q_k^2 | n_k \rangle \quad (2-23)_a$$

$$\langle p_k^2 \rangle = \dot{X}_k^2 + \langle n_k | p_k^2 | n_k \rangle \quad (2-23)_b$$

$$\langle q_k p_k \rangle = \langle p_k q_k \rangle = X_k \dot{X}_k \quad (2-23)_c$$

(2-22)y(2-23) señalan la relación entre el problema clásico y el cuántico.(2-23)indica que la energía interna del sistema está dada por la energía clásica adquirida por la acción de la fuerza más la energía cuántica propia del paquete inicial del estado estacionario.

La ecuación(2-22)indica que el centro de gravedad del paquete de ondas cuántico evoluciona como el oscilador clásico,esto expresa el hecho que la fuerza total que actua sobre la partícula satisface:

$$\langle F_k(q_k, t) \rangle = F_k(\langle q_k(t) \rangle, t) \quad (2-24)$$

y(2-22)no puede ser considerada una consecuencia general del teorema de Ehrenfest,sólo del caso particular en que la fuerza satisface (2-24).

Para mostrar como se llega a las relaciones(2-22)-(2-23) desarrollaremos(2-23)_b :

Daremos inicialmente las importantes relaciones entre

operadores:

$$e^A e^B = e^{A+B} e^{\frac{1}{2}[A,B]} \quad (2-25)_a$$

$$e^A e^B = e^B e^A e^{[A,B]} \quad (2-25)_b$$

(2-25)_{a,b} es válido: sólo para $[A,B], A] = [A,B], B] = 0$

$$e^A B e^{-A} = B + [A,B] + \frac{1}{2!}[A[A,B]] + \dots \quad (2-25)_c$$

$$e^A e^B e^{-A} = e^{e^A B e^{-A}} \quad (2-25)_d$$

De(2-21) tenemos:

$$\langle P_k^2 \rangle = \langle \eta_k | [P_k^0]^2 | \eta_k \rangle \quad (2-26)$$

Donde:

$$\begin{aligned} P_k^0 &= e^{i\frac{p_k}{\hbar} x_k} e^{-i\frac{p_k}{\hbar} x_k} P_k e^{i\frac{p_k}{\hbar} x_k} e^{-i\frac{p_k}{\hbar} x_k} = e^{i\frac{p_k}{\hbar} x_k} e^{\frac{i}{\hbar}(x_k - p_k x_k)} e^{-i\frac{p_k}{\hbar} x_k} e^{-i\frac{p_k}{\hbar} x_k} \\ &= P_k + \frac{i}{\hbar} [P_k x_k - p_k x_k, P_k] = P_k + \dot{x}_k \end{aligned} \quad (2-27)$$

Pero como $\langle \eta_k | P_k | \eta_k \rangle = 0$ se obtiene (2-23) al introducir (2-27)

en (2-26).

Empleando nuevamente(2-25)para transformar ahora(2-21)

obtenemos:

$$e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t X_1 F_1(t) dt} = e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t \left[\frac{1}{2} (\dot{X}_2 \cos \omega_2 t + \omega_2 X_2 \sin \omega_2 t) + \frac{1}{2} (\dot{X}_1 \sin \omega_1 t - \omega_1 X_1 \cos \omega_1 t) \right] dt} \quad (2-28)$$

Ahora es inmediato el paso al cuadro de interacción donde el operador de evolución resulta ser:

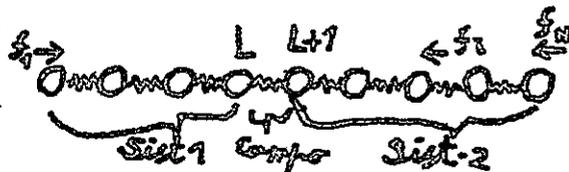
$$T_2(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t \left[\frac{1}{2} (\dot{X}_2 \cos \omega_2 t + \omega_2 X_2 \sin \omega_2 t) + \frac{1}{2} (\dot{X}_1 \sin \omega_1 t - \omega_1 X_1 \cos \omega_1 t) \right] dt} \quad (2-29)$$

III FLUJO DE ENERGIA

El problema del flujo de energía en una red unidimensional fue abordado por Ziman (Ziman 59) para la cadena cíclica y por Band (Band 65) para la cadena con extremos libres, sin embargo este último trabajo no nos pareció satisfactorio y reconsideraremos nuevamente el problema:

Supongamos nuestro sistema separado en dos subsistemas que interactúan a través del campo elástico existente entre los átomos extremos L y L+1 (ver fig. 2)

(En particular podríamos tomar L=0: el sistema 2 representa todo el sistema)



[Figura 2]

La energía interna del sistema en su totalidad, podemos escribirla como suma de la energía interna del sistema 1 más la energía interna del sistema 2 más la energía del campo existente entre ambos sistemas:

$$H_0 = H_0^{(1)} + H_0^{(2)} + H_c \quad (3-1)$$

con

$$H_0^{(1)}(u, \pi) = \frac{1}{2M} \sum_{m=1}^L \pi_m^2 + \frac{\gamma}{2} \sum_{m=1}^L (u_m - u_{m+1})^2 \quad (3-2)_a$$

$$H_0^{(2)}(u, \pi) = \frac{1}{2M} \sum_{m=L+1}^N \pi_m^2 + \frac{\gamma}{2} \sum_{m=L+1}^N (u_m - u_{m+1})^2 \quad (3-2)_b$$

$$H_c(u) = \frac{\gamma}{2} (u_{L+1} - u_L)^2 \quad (3-2)_c$$

Donde π_m está dado por:

$$\pi_m = M \dot{u}_m \quad (3-3)$$

Satisfaciendo las relaciones de cuantización:

$$[u_j, \pi_k] = i\hbar \delta_{jk} \quad (3-4)$$

Notemos que el operador de energía interna corresponde a la parte no perturbada del Hamiltoniano del subsistema.

La variación de energía del sistema 2 respecto al tiempo está dada por:

$$\dot{H}_0^{(2)} = \frac{i}{\hbar} [H, H_0^{(2)}] = \frac{i}{\hbar} [V^{(2)}, H_0^{(2)}] + \frac{i}{\hbar} [H_c, H_0^{(2)}] \quad (3-5)$$

donde $V = V^{(1)} + V^{(2)}$, en separación análoga a (3-1), (3-2).

La segunda parte de (3-5) corresponde al flujo de energía del campo intermedio entre ambos sistemas, al sistema 1, explícitamente:

$$\frac{i}{\hbar} [V^{(2)}, H_0^{(2)}] = \frac{\gamma}{M} \sum_{m=L+1}^N f_m^{(2)} \pi_m \quad (3-6)$$

$$\frac{i}{\hbar} [H_c, H_0^{(2)}] = \frac{i\gamma}{2M} \cdot \frac{1}{2\hbar} [(u_L - u_{L+1})^2, \pi_{L+1}^2] = \frac{\gamma}{2M} \{u_L - u_{L+1}, \pi_{L+1}\} \quad (3-7)$$

donde: $\{A, B\} \equiv AB + BA$

En lo que sigue, y hasta nueva indicación, omitiremos los campos externos; aunque la interpretación de los operadores a definir persiste al entender campo como campo interno

El paso de energía del campo intermedio al sistema 1 está dado por:

$$\frac{i}{\hbar} [H_c, H_0^{(1)}] = -\frac{\gamma}{2M} \{u_L - u_{L+1}, \pi_L\} \quad (3-8)$$

Por tanto el flujo neto de energía de izquierda a derecha a través del campo está dado por el promedio de (3-7) (flujo del campo al sistema 2) y el negativo de (3-8) (flujo del sistema 1 al campo) (ver nota 1):

$$\dot{E}_{\rightarrow L} = \frac{\gamma}{4M} \{u_L - u_{L+1}, \pi_L + \pi_{L+1}\} \quad (3-9)$$

y el flujo de energía hacia la derecha a través del campo en su totalidad está dado por:

$$\dot{E}_{\rightarrow} = \sum_{L=0}^{N-1} \dot{E}_{\rightarrow L} \quad (3-10)$$

En la nota 3. se hace un análisis bibliográfico comparativo sobre estos conceptos.

Asimismo, y sólo para delimitar bien el concepto de flujo de energía, definimos un operador ϕ que representa el transpaso total de energía del campo a la materia, por unidad de tiempo. Para esto hacemos uso de la separación del sistema descrita previamente, y en base a ella definimos un operador local ϕ_L como la suma del flujo de energía del campo a uno y otro sistema: la suma de (3-7) y (3-8) :

$$\phi_L = \frac{\gamma}{2M} \{u_L - u_{L+1}, \pi_{L+1} - \pi_L\} \quad (3-11)$$

Y al considerar el campo en su totalidad:

$$\phi = \sum_{L=0}^{N-1} \phi_L \quad (3-12)$$

Ahora si en vez de considerar el transpaso de energía del campo a la materia consideramos el transpaso de energía de la materia al campo (interno) obtenemos formulas idénticas salvo un signo obviamente; por tanto el flujo neto de energía a través de la cadena así como su variación de energía interna ^(son nulos) lo cual es de esperar por nuestra momentánea abstracción de los campos externos,

Si suponemos ahora dos fuerzas externas que actúan a ambos extremos de la cadena, el flujo total de energía a través de ella, como intermediaria para su transporte entre

dos puntos del exterior, está dado por la energía absorbida por la masa 1 al campo externo y la entregada por la masa N al exterior:



$$\dot{\phi} = \frac{\gamma}{2} [f(t) \dot{u}_1 - g(t) \dot{u}_N] = \frac{\gamma}{2M} [f(t) \pi_1 - g(t) \pi_N] \quad (3-13)$$

En base a (2-5)_a y (3-3) obtenemos

$$\pi_m = \left(\frac{2M}{N}\right)^{1/2} \sum_{k=0}^{N-1} P_k \cos\left[\left(m-\frac{1}{2}\right) \frac{\pi k}{N}\right] \quad (3-14)$$

con lo cual conseguimos expresiones en coordenadas normales para nuestros operadores (3-6)---(3-10)

Poniendo $L=0$ en (3-5) y de (3-6), (3-7) unido a (3-11), (2-9)_a obtenemos la siguiente expresión para la variación de energía interna de todo el sistema:

$$\dot{H}_0 = \sum_{k=0}^{N-1} P_k F_k(t) \quad (3-15)$$

El flujo de energía del campo al sistema 2 está dado

por:

$$\dot{E}_{c \rightarrow \text{Sist. 2}} = \frac{\alpha}{N} \sum_{j,k=0}^{N-1} \cos\left(\left(L+\frac{1}{2}\right) \frac{\pi j}{N}\right) \sin \frac{L\pi k}{N} \omega_k \{P_j, q_j\} \quad (3-16)$$

El flujo de izquierda a derecha entre los átomos L y $L+1$:

$$\dot{E}_L = \frac{1}{N} \sum_{j,k=0}^{N-1} \{q_j, P_k\} \sin \frac{L\pi j}{N} \cos \frac{L\pi k}{N} \omega_j v_k \quad (3-17)$$

El flujo total de energía a través del campo:

$$\dot{E}_{\rightarrow} = \frac{1}{4N} \sum_{j,k=0}^{N-1} \{q_j, P_k\} \omega_j v_k [1 - (-1)^{j+k}] \left\{ \cot \frac{\pi(j+k)}{2N} + \cot \frac{\pi(j-k)}{2N} \right\} \quad (3-18)$$

con:

$$v_j = \sqrt{\frac{\gamma}{M}} \cos \frac{\pi j}{2N} \quad (3-19)$$

Los operadores con sentido físico (3-15)---(3-22) prome-

diados con la solución del sistema total:

$$|N\rangle = \bigotimes_{k=0}^{N-1} |Y_k\rangle \quad (3-23)$$

dan los resultados clásicos debido a (2-22)---(2-23): sólo a-

parecen los operadores q_j, P_k, P_j, q_k, P_j al expresarlos en coor-

denadas normales. (Esto se puede visualizar rápidamente, ya que las expresiones (3-6)---(3-10), entendidas clásicamente, tienen un claro sentido físico)

IV FORMALISMO DE LA TEORIA CUANTICA DE CAMPOS

Mediante una combinación lineal de los operadores de momento y posición obtenemos los operadores de creación y destrucción de excitaciones para el oscilador armónico:

$$a_k = \left(\frac{\omega_k}{2\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \left\{ q_k + i \frac{p_k}{\omega_k} \right\} \quad (4-1)$$

\Leftrightarrow

$$\left\{ \begin{aligned} q_k &= \left(\frac{\hbar}{2\omega_k}\right)^{\frac{1}{2}} [a_k + a_k^+] & (4-2)_a \end{aligned} \right.$$

$$\left\{ \begin{aligned} p_k &= -i \left(\frac{\hbar\omega_k}{2}\right)^{\frac{1}{2}} [a_k - a_k^+] & (4-2)_b \end{aligned} \right.$$

definiciones coincidentes con las de (Band 65)

El operador a_k definido en (4-1) satisface:

$$|n\rangle_k = \frac{[a_k^+]^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle_k \quad (4-3)$$

$$a_k^+ a_k |n\rangle_k = n |n\rangle_k \quad (4-4)$$

Esto se demuestra a partir de las reglas básicas de conmutación:

$$[a_k, a_{k'}^+] = \delta_{kk'} \quad (4-5)$$

$$[a_k, a_{k'}] = [a_k^+, a_{k'}^+] = 0 \quad (4-6)$$

y de:

$$a_k |0\rangle_k = 0 \quad (4-7)$$

La forma de H_0 está dada por:

de donde se deduce $H_{0k} = \hbar \omega_k [a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2}]$ (4-8)

$[a_k, H_{0k}] = \hbar \omega_k a_k$ (4-9)

La forma de a_k en el cuadro de interacción está dada

por: $[a_k]_I = e^{iH_{0k} \frac{t}{\hbar}} a_k e^{-iH_{0k} \frac{t}{\hbar}}$ (4-10)_a

$[a_k^\dagger]_I = a_k^\dagger e^{i\omega_k t}$ (4-10)_b

La forma de los operadores (3-15) -- (3-22) en base a operadores de creación y destrucción es clara: el término $\{q_j, p_k\}$ toma la forma:

$\{q_j, p_k\} = -i\hbar \left[\frac{\omega_k}{\omega_j} \right]^{\frac{1}{2}} (a_j + a_j^\dagger)(a_k - a_k^\dagger)$ $j \neq k$ (4-11)

$\{q_k, p_k\} = -i\hbar (a_k a_k - a_k^\dagger a_k^\dagger)$ (4-12)

En general cualquier solución del problema de la red armónica acotada es expresable en la forma:

$|\Psi(t)\rangle = \bigotimes_{k=0}^{N-1} |\Psi_k(t)\rangle$ (4-13)

con: $|\Psi_k(t)\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} \alpha_{k,m}(t) |m\rangle_k$ (4-14)

Suponemos que la expresión (4-13) corresponde al cuadro de interacción (esto resulta útil en el estudio de los ejemplos). En tal caso; al hacer uso de (4-10) en (4-11), (4-12), (4-2)_b se obtienen los promedios:

$\langle P_k \rangle = \langle \Psi_k | P_k | \Psi_k \rangle = 2 \left[\frac{\hbar \omega_k}{2} \right]^{\frac{1}{2}} L_m J_k(t)$ (4-15)

$\langle \{q_j, p_k\} \rangle = 4\hbar \left[\frac{\omega_k}{\omega_j} \right]^{\frac{1}{2}} \text{Re} J_j(t) L_m J_k(t)$ (4-16)

Con: $J_j(t) = e^{-i\omega_j t} \sum_{m=0}^{\infty} \alpha_{k,m}^*(t) \alpha_{k,m+1}(t) \sqrt{m+1}$ (4-17)

$\langle \{q_k, p_k\} \rangle = 2\hbar L_m K_k(t)$ (4-18)

Con: $K_k(t) = \sum_{m=0}^{\infty} \alpha_{k,m+2}(t) \alpha_{k,m}^*(t) \sqrt{(m+1)(m+2)} e^{-2i\omega_k t}$ (4-19)

Las formas de (4-17) y (4-18) obviamente imponen una indeterminación del número de fonones (o excitaciones) como condición para el transporte de energía; no obstante desde un punto de vista computacional es mucho más rápido el empleo de (2-22)-(2-23) para el cálculo de los promedios (3-15)-(3-22).

En particular deducimos de (3-18) y (4-17) que la condición para un flujo neto de energía no nulo es una indeterminación en el número de fonones, tal que exista probabilidad no nula de encontrar el sistema en un número de excitaciones n y $n+1$ al mismo tiempo.

Para terminar expresaremos dentro de la teoría computacional la solución (2-28) en el cuadro de interacción.

Si suponemos para $t=0$

$$|\Psi(t=0)\rangle = \bigotimes_{k=0}^{N-1} |m_k\rangle \quad (4-20)$$

tenemos entonces:

$$|\Psi(t)\rangle = \bigotimes_{k=0}^{N-1} e^{iW_k(t)/2\hbar} e^{i[B_k(t)\alpha_k^\dagger + B_k^*(t)\alpha_k]} |m_k\rangle \quad (4-21)$$

con:

$$B_k(t) = \left[\frac{1}{2\omega_k \hbar} \right]^{\frac{1}{2}} \int_0^t F_k(s) e^{i\omega_k s} ds \quad (4-22)$$

donde $F_k(s)$ está dado por (2-9)_a

$$W_k(t) = \int_0^t X_k(s) F_k(s) ds \quad (4-23)$$

Para expandir directamente en la forma (4-14) ocupamos (2-25)_a y (4-7), al suponer por simplicidad, $|m_k\rangle = |0\rangle_k$ obtenemos:

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \bigotimes_{k=0}^{N-1} e^{iW_k(t)/2\hbar} e^{-\frac{1}{2}|B_k(t)|^2} e^{iB_k(t)\alpha_k^\dagger} |0\rangle_k \\ &= \bigotimes_{k=0}^{N-1} e^{iW_k(t)/2\hbar} e^{-\frac{1}{2}|B_k(t)|^2} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[iB_k(t)]^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle_k \right\} \quad (4-24) \end{aligned}$$

Se tiene en este caso $\alpha_{k,m} \neq 0 \forall m \Rightarrow \alpha \neq 0 \forall m$, nunca hay nada similar a una determinación del número de fonones.

V ESTUDIO DE ALGUNOS EJEMPLOS

1-)

Consideremos el problema de una cadena de osciladores armónicos estimulados por dos fuerzas iguales pero de sentido opuesto, aplicadas en los extremos (ver (2-7)).

Estudiaremos la variación de energía interna total del sistema y el flujo local de energía en el punto L:

De (3-15), (2-22)_c, (2-9)_a y (2-20)_b obtenemos:

$$\begin{aligned} \langle \dot{E}(t) \rangle &= \sum_{k=0}^{N-1} \frac{2\gamma^2}{NM} f(t) [1 - (-1)^k] \int_0^t f(s) [1 + (-1)^k] \cos \omega_k(t-s) ds \cdot \cos^2 \frac{\pi k}{2N} \\ &= \sum_{k=0}^{N-1} \frac{4\gamma^2}{NM} \cos^2 \frac{\pi k}{2N} [1 - (-1)^k] \int_0^t f(s) f(t) \cos \omega_k(t-s) ds \end{aligned} \quad (3-1)$$

Para $N \rightarrow \infty$ se tiene $\sum_{k=0}^{N-1} \rightarrow \frac{2N}{\pi} \int_0^{\pi/2} d\theta$ con $\theta = \frac{k\pi}{2N}$ y:

$$\begin{aligned} \langle \dot{E}(t) \rangle &= \frac{8\gamma^2}{NM} \int_0^{\pi/2} d\theta \left\{ \cos^2 \theta \int_0^t f(t) f(s) \cos [2\alpha(t-s) \sin \theta] ds \right\} \\ &= \frac{2\gamma^2}{M} \int_0^t f(t) f(t-s) [J_0(2\alpha s) + J_2(2\alpha s)] ds \\ &= \frac{2\gamma^2}{M\alpha} \int_0^t f(t) f(t-s) \frac{J_1(2\alpha s)}{s} ds \end{aligned} \quad (5-2)$$

donde:

$$\alpha = \sqrt{\frac{\gamma}{M}} \quad (5-3)$$

Para el cálculo del flujo local de energía usamos (3-17), (2-22)_{a,b}

y (2-20)_{a,b}:

$$\begin{aligned} \langle \dot{E}(t) \rangle &= \frac{2}{N} \sum_{j,k=0}^{N-1} X_j \dot{X}_k \frac{\sin \frac{L\pi j}{N}}{N} \cos \frac{L\pi k}{N} \cdot \alpha \cos \frac{\pi k}{2N} \cdot \omega_j \\ &= \frac{4\gamma^2 \alpha}{N^2 M} \left\{ \sum_{j=0}^{N-1} \int_0^t [1 - (-1)^j] \cos \frac{\pi j}{2N} f(s) \sin \omega_j(t-s) ds \cdot \frac{\sin \frac{L\pi j}{N}}{N} \right\} \\ &\quad \times \left\{ \sum_{k=0}^{N-1} \int_0^t [1 - (-1)^k] \cos^2 \frac{\pi k}{2N} f(s) \cos \omega_k(t-s) ds \cos \frac{L\pi k}{N} \right\} \end{aligned} \quad (5-4)$$

Tomando el límite $N \rightarrow \infty$ se tiene:

$$\begin{aligned} \langle \dot{E}_L \rangle &= \frac{\gamma^2 \alpha}{M} \left\{ \int_0^t ds f(t-s) \left[\frac{J(2s\alpha)}{2L+1} + \frac{J(2s\alpha)}{2L-1} \right] \right\} \left\{ \int_0^t ds f(t-s) \left[\frac{J(2s\alpha)}{2L} + \frac{1}{2} \frac{J(2s\alpha)}{2L+2} + \frac{1}{2} \frac{J(2s\alpha)}{2L-2} \right] \right\} \\ &= 2\gamma\alpha L \left\{ \int_0^t ds \frac{f(t-s)}{s} \frac{J(2s\alpha)}{2L} \right\} \cdot \left\{ \int_0^t ds \frac{f(t-s)}{s} \left[\frac{(2L+1)J(2s\alpha)}{2L+1} + \frac{(2L-1)J(2s\alpha)}{2L-1} \right] \right\} \quad (5-5) \end{aligned}$$

Vemos de (5-5) que para tiempos chicos respecto a $\frac{1}{\alpha}$, el flujo es positivo y va tendiendo a cero a medida que $L \rightarrow \infty$. Recordemos que siempre hay que considerar un L muy chico respecto a N en nuestra imagen física, al pasar al límite $N \rightarrow \infty$. En (5-4) se ve inmediatamente que $\langle \dot{E}_{N+1} \rangle = -\langle \dot{E}_L \rangle$, lo cual no sucede con ec. (5-5)

2-)

Estudiamos el problema de un golpe dado a una cadena en su primer átomo el cual adquiere un momento $M\alpha\Delta$. Suponemos que para $t \ll 0$ los estados energéticos están bien definidos.

La solución cuántica de nuestro problema está dada por (2-28) al reemplazar las fuerzas en (2-20) por deltas de Dirac:

$$f_1(t) = S(t) \frac{M\alpha\Delta}{\gamma} \quad (5-6)_a$$

$$f_m(t) = -\frac{S(t) M\alpha\Delta}{(N-1)\gamma} \quad m \neq 1 \quad (5-6)_b$$

(5-6)_b asegura que el centro de gravedad del sistema esté inmóvil. Tenemos pues, salvo un factor de fase:

$$|\psi_k\rangle = e^{i\varphi_k} \left[\frac{2M}{N} \right]^{\frac{1}{2}} \alpha \Delta \left(\frac{N}{N-1} \right) \cos \frac{\pi k}{2N} |\pi_k\rangle \quad (5-7)$$

en el cuadro de interacción.

Se demuestra rápidamente, usando (5-7), que :

$$\begin{cases} \langle U_i(t=0) \rangle = 0 \\ \langle \pi_i(t=0) \rangle = -\frac{M\alpha\Delta}{N-1} \quad i \neq 1 \\ \langle \pi_1(t=0) \rangle = M\alpha\Delta \end{cases} \quad (5-8)$$

que son relaciones con claro sentido físico.

Calculemos el flujo local de energía (3-17); para ello:

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \dot{q}_j, P_k^2 | \Psi \rangle &= 2 \dot{x}_j \dot{x}_k \\ &= 2 \frac{\text{Sen } \omega_j t}{\omega_j} \cos \omega_k t \cos \frac{\pi j}{2N} \cos \frac{\pi k}{2N} \cdot 2M\alpha^2 \frac{\Delta^2 N}{(N-1)^2} \end{aligned} \quad (5-9)$$

y:

$$\langle \dot{E}_L \rangle = \frac{4M\alpha^3 \Delta^2}{(N-1)^2} \left[\sum_{j=0}^{N-1} \text{Sen } \omega_j t \cos \frac{\pi j}{2N} \text{Sen } \frac{\pi j}{N} \right] \cdot \left[\sum_{k=0}^{N-1} \cos \omega_k t \cos^2 \frac{\pi k}{2N} \cos \frac{\pi k}{N} \right] \quad (5-10)$$

Tomando nuevamente el límite $N \rightarrow \infty$ obtenemos:

$$\begin{aligned} \langle \dot{E}_L(s) \rangle &= M\alpha^3 \Delta^2 \left[J_{2L+1}(2\alpha s) + J_{2L-1}(2\alpha s) \right] \left[J_{2L}(2\alpha s) + \frac{1}{2} J_{2L+2}(2\alpha s) + \frac{1}{2} J_{2L-2}(2\alpha s) \right] \\ &= \frac{M\alpha \Delta^2 L}{s^2} J_{2L}(2\alpha s) \cdot \left[J_{2L+1}(2\alpha s) \cdot (2L+1) + J_{2L-1}(2\alpha s) \cdot (2L-1) \right] \end{aligned} \quad (5-11)$$

Nótese que para tiempos chicos respecto a $\frac{1}{\alpha}$ la cantidad (5-11) es positiva como sería de esperar; además el flujo de energía se va amortiguando con el tiempo a medida que se va repartiendo la energía en el espacio en forma uniforme.

3-)

Supongamos que aplicamos dos fuerzas opuestas a las partículas L y $L+1$, de valor $\Delta \mathcal{V}$. En $t=0$ dejan de actuar dichas fuerzas. Nos interesa ver como se propaga la energía extra $\frac{\Delta \mathcal{V}^2}{2}$ del campo existente entre estos dos átomos.

Suponemos la cadena inicialmente en un estado propio de energía del Hamiltoniano válido para $t < 0$:

El problema se puede reducir al de una cadena sin fuerzas:

$$\begin{aligned}
 H &= \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{N-1} \left\{ P_k^2 + \omega_k^2 q_k^2 - \left(\frac{g}{NM} \right)^{1/2} \delta \Delta q_k \left[\cos\left(\frac{1}{2}\right) \frac{\pi k}{N} - \cos\left(\frac{1}{2}\right) \frac{\pi k}{N} \right] \right\} \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{N-1} \left\{ P_k^2 + \omega_k^2 (q_k - \lambda_k)^2 - \omega_k^2 \lambda_k^2 \right\}
 \end{aligned} \tag{5-12}$$

y sólo una constante tenemos;:

$$H = e^{-\frac{i\lambda_k P_k}{\hbar}} \left[\sum_{k=0}^{N-1} (P_k^2 + \omega_k^2 q_k^2) \right] e^{\frac{i\lambda_k P_k}{\hbar}} = e^{-\frac{i\lambda_k P_k}{\hbar}} H_0 e^{\frac{i\lambda_k P_k}{\hbar}} \tag{5-13}$$

donde:

$$\lambda_k = \left(\frac{M}{2N} \right)^{1/2} \Delta \frac{\text{Sen} L \frac{\pi k}{N}}{\text{Sen} \frac{\pi k}{2N}} \tag{5-14}$$

en (5-13), (5-12)

Por tanto las funciones propias de (5-13) están dadas, en término de funciones propias de H_0 , por:

$$|\psi\rangle = \bigotimes_{k=0}^{N-1} e^{-\frac{i\lambda_k P_k}{\hbar}} |n_k\rangle \quad (t=0) \tag{5-15}$$

Calculemos el promedio de $\{q_j, p_k\}$ para $t > 0$.

Tenemos:

$$\langle \{q_j, p_k\} \rangle = \left[\bigotimes_{l=0}^{N-1} \langle n_l | \right] \{q_j, p_k\} \left[\bigotimes_{m=0}^{N-1} |n_m\rangle \right] \tag{5-16}$$

donde:

$$\begin{aligned}
 p_j^0 &= e^{i\lambda_j p_j / \hbar} [p_j]_I e^{-i\lambda_j p_j / \hbar} = [p_j]_I - i\omega_j \text{Sen} \omega_j t \frac{\lambda_j}{\hbar} [p_j, q_j] = [p_j]_I - \lambda_j \omega_j \text{Sen} \omega_j t \\
 q_j^0 &= e^{i\lambda_j p_j / \hbar} [q_j]_I e^{-i\lambda_j p_j / \hbar} = [q_j]_I + \cos \omega_j t \left(\frac{i\lambda_j}{\hbar} \right) [p_j, q_j] = [q_j]_I + \cos \omega_j t \lambda_j
 \end{aligned} \tag{5-17}$$

y los operadores momento y posición en el cuadro de interacción:

$$[p_j]_I = p_j \cos \omega_j t - \frac{q_j}{\omega_j} \text{Sen} \omega_j t ; [q_j]_I = q_j \cos \omega_j t + \frac{p_j}{\omega_j} \text{Sen} \omega_j t \tag{5-18}$$

Con el mismo método empleado para probar (2-22), (2-23) obtenemos:

$$\langle \Psi | \{ P_j, q_k \} | \Psi \rangle = -2\omega_j \lambda_j \lambda_k \text{Sen} \omega_j t \text{Cos} \omega_k t \quad (5-19)$$

Por tanto el flujo local de energía es:

$$\langle \dot{E}_{\rightarrow P} \rangle = -4\gamma \Delta^2 \alpha \left[\sum_{j=0}^{N-1} \frac{\text{Sen} P \omega_j}{N} \frac{\text{Sen} L \omega_j}{N} \text{Cos} \omega_j t \right] \left[\sum_{k=0}^{N-1} \frac{\text{Cos} P \omega_k}{N} \frac{\text{Cos} \omega_k}{2N} \frac{\text{Sen} L \omega_k}{N} \text{Sen} \omega_k t \right] \quad (5-20)$$

Tomando el límite $N \rightarrow \infty$:

$$\langle \dot{E}_{\rightarrow P} \rangle = \frac{\gamma \Delta^2 \alpha}{2} \left[\frac{J(2\alpha t)}{2(L-P)} - \frac{J(2\alpha t)}{2(L+P)} \right] \left[\frac{J(2\alpha t)}{2P-2L-1} + \frac{J(2\alpha t)}{2P-2L+1} - \frac{J(2\alpha t)}{2P+2L-1} - \frac{J(2\alpha t)}{2P+2L+1} \right]$$

$$= \frac{\gamma \Delta^2}{t} \left[\frac{J(2\alpha t)}{2L-P} - \frac{J(2\alpha t)}{2L+P} \right] \left[\frac{(P-L)J(2\alpha t)}{2(P-L)} - \frac{(P+L)J(2\alpha t)}{2(P+L)} \right] \quad (5-21)$$

Para tiempos chicos respecto a $\frac{1}{\alpha}$ el flujo está dado por:

$$\langle \dot{E}_{\rightarrow P} \rangle = \frac{\gamma \Delta^2}{t} \left[\frac{J(2\alpha t)}{2(P-L)} \right]^2 (P-L) \quad (5-22)$$

O sea que es negativo o positivo según $P < L$ ó $P > L$, como era de esperar: la energía al "romperse las paredes que la tenían encerrada" fluye en ambos sentidos, desde su ubicación inicial.

Si L es suficientemente grande la expresión (5-22) dominara hasta que $t \approx \frac{2L}{2\alpha} + L$

Para $P > L$ el flujo es negativo hasta $t \approx \frac{2L}{2\alpha}$ o sea que inicialmente la energía fluye en mayor cantidad hacia el extremo finito.

Es interesante notar de (5-21) que la propagación de la energía es instantánea; esto es una consecuencia del empleo de un potencial no retardado.

no retardado.

La solución del problema 3-) nos será útil para comparar las condiciones de borde cíclicas y de extremos libres; calcularemos la energía encerrada entre los átomos L y L+1 como función del tiempo:

Elegimos este problema por tener un sentido físico rápidamente accesible así como presentar resultados simples, que permitan efectuar la comparación.

$$\begin{aligned} \langle E_c \rangle &= \langle \Psi | \sum_{L, L+1}^2 | \Psi \rangle = \\ &= \frac{\gamma}{NM} \sum_{j,k=0}^{N-1} \left\{ \sum_{l=0}^{N-1} \langle n_{2l} \rangle \right\} q_j^0 q_k^0 \left\{ \sum_{m=0}^{N-1} \langle n_m \rangle \right\} \left[\cos(\omega_j t - \frac{1}{2} \pi j) - \cos(\omega_k t + \frac{1}{2} \pi k) \right] \left[\cos(\omega_j t - \frac{1}{2} \pi j) - \cos(\omega_k t + \frac{1}{2} \pi k) \right] \end{aligned} \quad (5-23)$$

con q_j^0 definido en (5-17), se tiene por tanto:

$$\begin{aligned} \langle E_c \rangle &= \frac{2\gamma\Delta^2}{N^2} \sum_{j,k=0}^{N-1} \cos \omega_j t \cos \omega_k t \sin^2 \frac{L\pi j}{N} \sin^2 \frac{L\pi k}{N} + \\ &+ \frac{\hbar}{2N\alpha} \sum_{j=0}^{N-1} \omega_j^2 \sin^2 \frac{L\pi j}{N} \cdot (2n_j + 1) \end{aligned} \quad (5-24)$$

El segundo término corresponde a la energía cuántica del estado estacionario; tomando el límite $N \rightarrow \infty$ en el primer término:

$$\langle E_c \rangle = \frac{\gamma\Delta^2}{2} \left[J_0(2\alpha t) - J_{\frac{1}{2}}(2\alpha t) \right]^2 \quad (5-25)$$

Se ve de la fórmula (5-25) como se va disipando la energía con el tiempo; para $t \rightarrow \infty$ sólo aparece la parte cuántica de (5-24); en todo caso, desde el punto de vista del gas de fonones, no hay intercambio de energía entre ellos, sino que una simple superposición espacial tal que le corresponde una densidad uniforme de energía. Es similar a considerar el proceso de mezcla de dos gases muy

diluidos y a distinta temperatura.

También vamos el efecto de los extremos: para $L \rightarrow \infty$ sólo aparece el $J_0(t)$ y se va perdiendo la dependencia en L , dado que:

$$\frac{J_0(2\alpha L)}{4L} \underset{L \rightarrow \infty}{\sim} (4L)^{-\frac{1}{2}}$$

Resolvamos el mismo problema en la cadena cíclica: (para informarse sobre la cadena cíclica ver (Ziman 59) y (Kittel 66))

Suponemos que nuestra cadena tiene $2N+1$ átomos, y utilizamos la transformación a coordenadas normales:

$$r_l = \left[\frac{2}{(2N+1)M} \right]^{\frac{1}{2}} \left\{ \sum_{k=0}^N q_k^{(1)} \cos \frac{2\pi k l}{2N+1} + \sum_{k=1}^N q_k^{(2)} \sin \frac{2\pi k l}{2N+1} \right\} \quad (5-26)$$

Hemos supuesto nulo el momentum total de la cadena .

El Hamiltoniano es:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \sum_{\alpha=1}^2 \left\{ [P_k^{(\alpha)}]^2 + \omega_k^2 [q_k^{(\alpha)}]^2 - 2 q_k^{(\alpha)} F_k(t) \right\} \quad (5-27)$$

con $P_k^{(\alpha)}$ el momentum canónico conjugado de $q_k^{(\alpha)}$ y:

$$F_k(t) = \gamma \sum_{\tau=0}^{2N} C^{(\alpha)} \left(\frac{2\pi k \tau}{2N+1} \right) \left[\frac{2}{(2N+1)M} \right]^{\frac{1}{2}} f_{\tau}(t) \quad (5-28)_a$$

$$\begin{cases} C^{(1)} = \text{Sen} \\ C^{(2)} = \text{Cos} \end{cases} \quad (5-28)_b$$

$$\omega_k = 2\alpha \frac{\text{Sen} \pi k}{2N+1} \quad (5-28)_c$$

para nuestro problema particular $\alpha \neq 0$

Para $t < 0$ se tiene:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \sum_{\alpha} \left\{ [P_k^{(\alpha)}]^2 + \omega_k^2 [q_k^{(\alpha)} - \lambda_k^{(\alpha)}]^2 - \omega_k^2 \lambda_k^{(\alpha)2} \right\} \quad (5-29)$$

con:

$$\lambda_k^{(\alpha)} = \frac{\gamma \Delta}{\omega_k^2} \left[\frac{2}{(2N+1)M} \right]^{\frac{1}{2}} \left\{ C^{(\alpha)} \left(\frac{2\pi k L}{2N+1} \right) - C^{(\alpha)} \left(\frac{2\pi k (L+1)}{2N+1} \right) \right\} \quad (5-30)$$

que

y la solución en el cuadro de interacción corresponde a estados

de pios de la energía para $t < 0$, es:

$$|\Psi\rangle = |\Psi(t=0)\rangle = \bigotimes_{k,\alpha} e^{-i\lambda_k^{(\alpha)} P_k^{(\alpha)} / \hbar} |\pi_k^{(\alpha)}\rangle \quad (5-31)$$

donde $|\pi_k^{(\alpha)}\rangle$ es un estado propio del Hamiltoniano sin perturbar obtenido al reemplazar $\lambda_k = 0$ en (5-29)

Tenemos ahora:

$$\begin{aligned} \langle E_c \rangle &= \frac{\gamma}{2} \langle \Psi | (u_{L+1} - u_L)^2 | \Psi \rangle = \\ &= \frac{1}{2\gamma\Delta^2} \sum_{\substack{\alpha, \beta \\ k=1, \dots, N}} \omega_\alpha^2 \omega_\beta^2 \lambda_\alpha^{(\alpha)} \lambda_\beta^{(\beta)} \langle \pi_\alpha^{(\alpha)} \pi_\beta^{(\beta)} | [q_\alpha^{(\alpha)}] [q_\beta^{(\beta)}] | \pi_\alpha^{(\alpha)} \pi_\beta^{(\beta)} \rangle \end{aligned} \quad (5-32)$$

con:

$$[q_\alpha^{(\alpha)}]_t = e^{i\lambda_\alpha^{(\alpha)} P_\alpha^{(\alpha)} / \hbar} [q_\alpha^{(\alpha)}]_0 e^{-i\lambda_\alpha^{(\alpha)} P_\alpha^{(\alpha)} / \hbar} = [q_\alpha^{(\alpha)}]_0 + \cos \omega_\alpha t \lambda_\alpha^{(\alpha)} \quad (5-33)$$

Procediendo como antes:

$$\langle E_c \rangle = \frac{\gamma\Delta^2}{2(2N+1)^2} \left[\sum_{\alpha=0}^N \cos \omega_\alpha t \right]^2 + \frac{1}{2N+1} \sum_{k,\alpha} \hbar \omega_k^{(\alpha)} \left(\pi_k^{(\alpha)} + \frac{1}{2} \right) S \left[\frac{\pi_k^{(\alpha)}(2L+1)}{2N+1} \right] \quad (5-34)$$

El segundo término de (5-34) es un residuo netamente cuántico correspondiente al estado de excitación de la cadena para $t \ll 0$.

Tomando el límite $N \rightarrow \infty$ se tiene:

$$\langle E_c \rangle = \frac{\gamma\Delta^2}{2} \left[J_0(2\alpha t) \right]^2 \quad (5-35)$$

De la comparación de (5-25) y (5-35) podemos apreciar las diferencias entre C.B.C y F.E.B.C así como el modo en que se amortigua esta diferencia a medida que vamos eligiendo el átomo L más lejano del extremo inicial: o sea que se confirma que la diferencia entre ambas condiciones de borde aparece sólo en los fenómenos de superficie donde resulta ilógico el empleo de C.B.C.

Hagamos notar, por último, que de las relaciones (5-28) y (2-9), considerando el rango de variación de k en ambos casos, la diferencia entre los valores específicos para las C.B.C y F.E.B.C es despreciable.

VI RECAPITULACION Y CONCLUSIONES

En base al formalismo planteado en (Band 65) hemos estudiado algunas propiedades básicas del modelo lineal armónico de una red acotada.

Se hizo especial énfasis en los siguientes aspectos:

A)-Básicamente el trabajo fué dirigido a aclarar el concepto de operador transporte de energía para la red acotada. Posteriormente buscamos una expresión para dicho operador dentro del formalismo de la teoría cuántica de campos.

Definimos el flujo de energía como el promedio entre el traspaso de energía desde la derecha de las masas a la izquierda del campo y el traspaso desde la derecha del campo a la izquierda de las masas, concepto coincidente con el de Ziman (Ziman 59) pero divergente con el de Band (Band 65) ya que él se limitó sólo al flujo de la materia al campo. Sin embargo es importante recordar que Ziman trató el problema para la cadena cíclica ; y el nuestro, al igual que el de Band , a la cadena acotada ; de allí que al pasar a coordenadas normales las expresiones nuestras no coincidan con las de Ziman, así como su posterior expresión en base a operadores de creación y destrucción de fonones : Mientras nuestros operadores crean modos estacionarios de vibración , los operadores introducidos por Ziman crean modos de vibración que se desplazan (running waves)

B)-Hemos comparado los resultados obtenidos en problemas con condiciones de borde cíclicas y de extremos libres para un ejemplo un tanto artificial ; a través de él vimos una coincidencia en los resultados para ambos casos , salvo cuando la perturbación era provocada cerca de los extremos . Asimismo hicimos notar que los calores específicos de la cadena lineal cíclica y con extremos li-

bres debían coincidir.

C)-Por último fuimos mostrando la coincidencia con los resultados clásicos a través de todo el desarrollo; esto se consiguió en forma elegante gracias a lo expuesto en (Band 62) . Asimismo relacionamos tal coincidencia con la forma que toma el teorema de Ehrefest en nuestro caso particular.

Queda abierto el problema de generalizar los conceptos y resultados mostrados en el presente trabajo a un cristal tridimensional; buscar un operador vectorial flujo de energía; estudiar los efectos de superficie, en particular comparar los calores específicos de cristales con extremos libres y con condiciones de borde cíclicas, donde se ignora el efecto de la superficie.

REFERENCIAS Y NOTAS/

(Ashkin64): M. Ashkin, Phys. Rev. 136, A821 (1964)

(Band 62): W. Band, Am. J. Phys. 30-646; (1962)

(Band 65): W. Band, and A. D. Bhatti, Am. J. Phys. 33-930; (1962)

(Kittel66): CH. Kittel, QUANTUM THEORY OF SOLIDS; New York John Wiley (1966)

(Kronig-Penney31): L. Kronig and W. G. Penney, Proc. Roy. Soc. (London) A 130, 499 (1931).

(Ziman 59): J. M. Ziman ELECTRONS AND PHONONS Oxford Clarendon Press. (1959)

NOTA 1 -

Si (2-1) no se satisface, habría que considerar, además de la interacción entre segundos vecinos, una modificación de las constantes elásticas hacia los extremos; ya que las distancias interatómicas tendrían distintos valores que allí en el centro de la cadena.

NOTA 2-

Para visualizar porque se promedian (3-7) y (3-8), consideremos el siguiente caso: la cantidad de energía que entra al campo local entre los átomos L y L+1, es igual a la que sale por la derecha, digamos igual a \dot{E} . Entonces es razonable decir que el flujo local de energía a través del campo es \dot{E} y no $2\dot{E}$.

NOTA 3-

UNIVERSIDAD DE CHILE
SEDE SANTIAGO ORIENTE
P.O. BOX 136
SANTO DOMINGO CENTRAL

Lo que Band (Band 65) planteó como operador local de transporte de energía: $S(n)$ en (18) corresponde al traspaso de energía del átomo n al campo, de izquierda a derecha. (De allí la diferencia de signo con (3-7) que es el paso de energía del campo al átomo L) por tanto lo que él define como S en (19) corresponde al flujo total de energía de la materia al campo hacia la derecha que designamos por \dot{S} ; igualmente podríamos definir un flujo de la materia al campo hacia la izquierda por \dot{S} de modo análogo a (3-8).

Lo que Ziman hace, y que nosotros adoptamos en (3-9) es definir: $\dot{S} = \dot{S} - \dot{S}$.