Sólido de Einstein.

Universidad de Guanajuato. División de Ciencias e Ingenierías.
Edgar Ernesto Granados Betancourt, granadosbe2017@licifug.ugto.mx

1 Introducción.

En 1904, eel físico alemán Paul Drude, desarrollo un modelo sobre el sólido cristalino en el cual los átomos iban a estar distribuidos en una red tridimensional de tal manera que cada átomo esta unido a otros átomos vecinos por enlaces que van a estar oscilando como pequeños resortes. Mediante este modelo pudó Drude escplicar la absorción infrarroja por algunos sólidos. En 1906, Einstein mostró que los resultados de Planck sobre la distribución de la energía electromagnética podrían derivarse de dos supuestos, el primero era la consideración de que la luz estaba compuesta de cuantos (fundamento que le permitió explicar el efecto fotoeléctrico). La segunda consistia en que dichos cuantos de luz son emitidos y absorbidos por cargas oscilantes dentro de la materia y que vibran solo a ciertas energías cuantificadas; es decir, la luz va a ser emitida por dichas cargas oscilantes. Einstein aplicó la hipótesis cuántica a los osciladores clásicos de Drude y pudo desarrollar una teoría más extensa y rica sobre los sólidos critalinos.

2 Desde el ensamble canónico...

Consideraremos N osciladores armónicos cuánticos unidimensionales localizados y no-interactuantes, cuya frecuencia fundamental es ω, los cuales se encuentran en contacto con un reservorio de emperatura T. Los estados microscopicos del sistema estan caracterizados por el conjunto de números cuánticos $n_1, n_2, ..., n_N$, donde n_j es el j-esimo oscilador. Dado el estado microscopico n_j, la energía del estado se escribira como:

$$E(n_j) = \sum_{n=1}^{N}(n_j + \frac{1}{2})\hbar\omega \tag{1}$$

La **función de partición canónica** estara dada por la siguiente expresión:

$$Z = \sum_{n_j} e^{-}\beta E(n_j) \tag{2}$$

$$= \sum_{n_1,n_2,...,n_N} exp[-\sum_{n=1}^{N}(n_j + \frac{1}{2})\hbar\omega] \tag{3}$$

Esto es:

$$Z = \sum_{n_1=0}^{N}(n_1 + \frac{1}{2})\hbar\omega \bullet\bullet\bullet \sum_{n_N=0}^{N}(n_N + \frac{1}{2})\hbar\omega \tag{4}$$

Cómo todos los estados son totalmente posibles, se tendra que:

$$Z = [\sum_{n=0}^{\infty}(n + \frac{1}{2})\hbar\omega]^N \tag{5}$$

Diremos que:

$$Z_1 = \sum_{n=0}^{\infty}(n + \frac{1}{2})\hbar\omega \tag{6}$$

Escribiremos Z_1 de la siguiente forma:

$$Z_1 = e^{-}\frac{1}{2}\beta\hbar\omega \sum_{n=0}^{\infty} e^{-}\hbar\omega \tag{7}$$

Sea

$$\sum_{j=0}^{\infty} r^j = \frac{1}{1-r} \tag{8}$$

Entonces, si decimos que $r = e^-\beta\hbar\omega$, entonces podremos escribir:

$$Z_1 = e^{-\beta\hbar\omega}\sum_{j=0}^{\infty} r^j \tag{9}$$

Tendremos que:

$$Z_1 = \frac{e^-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega}{1-e^-\beta\hbar\omega} \tag{10}$$

3 Funciones termodínamicas.

La energía libre de Helmholtz por partícula (en este caso, por oscilador) va a estar dada por la siguiente expresión:

$$f = -\frac{1}{\beta}\frac{1}{N}lnZ \tag{11}$$

Entonces, al sustituir la función de partición cancónica, tendremos:

$$f = \frac{1}{2}\hbar\omega + k_BTln(1-e^-\frac{\hbar\omega}{k_BT}) \tag{12}$$

Recordando que:

$$\beta = \frac{1}{k_B}T \tag{13}$$

Donde K_B es la constante de Boltzmann. La entropía por oscilador es una función de la temperatura y estara dada por:

$$s = -\frac{\partial f}{\partial T} \tag{14}$$

Esto es:

$$s = -k_B\ln(1-\exp\frac{\hbar\omega}{k_BT}) + \frac{\hbar\omega}{T}\frac{\exp\frac{\hbar\omega}{k_BT}}{(\exp\frac{\hbar\omega}{k_BT}-1)^2} \tag{15}$$

El calor especifíco del sólido de Einstein va a ser:

$$c = T\frac{\partial s}{\partial T} \tag{16}$$

Es decir:

$$c = k_B(\frac{\hbar\omega}{k_BT})^2\frac{\exp\frac{\hbar\omega}{k_BT}}{(\exp\frac{\hbar\omega}{k_BT}-1)^2} \tag{17}$$

La energía interna termodínamica por oscilador es una función de la temperatura, dada por la siguiente expresión:

$$u = -\frac{1}{N}\frac{\partial\ln Z}{\partial\beta} = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z_1 \tag{18}$$

Es decir:

$$u = \frac{1}{2}\hbar\omega + \frac{\hbar\omega}{\exp\frac{\hbar\omega}{k_BT}-1} \tag{19}$$

En el límite clásico: $k_BT >> \hbar\omega$, donde se tendra que:

$$u \longrightarrow k_BT \tag{20}$$

En el límite de temperaturas bajas: $k_BT << \hbar\omega$, entonces:

$$u \longrightarrow \frac{1}{2}\hbar\omega \tag{21}$$

que es la energía del punto cero.

4 Referencias.

- Salinas, Silvio R. A. Introduction to statistical physics. Springer. Brasil. 2001.
- Sólidos cuánticos. Cuaderno de cultura cientifica.
  Recuperado de: https://culturacientifica.com/2020/03/24/solidos-cuanticos/ Fecha de consulta: 02 Mayo de 2021.