

Capítulo 1

Gas de Fermi

DIBUJOS

$$\langle n_e \rangle = \frac{1}{z^{-1} e^{\beta e} + 1} = \frac{1}{e^{\beta(\mu - e)} + 1}$$

Si $\mu < 0$ como $e > 0$ siempre, ni aún en el estado de más baja energía se llega a ocupar el nivel (restan muchos niveles vacíos).

Sea que $T \rightarrow \infty$ entonces $\beta \rightarrow 0$ y se sigue que

$$e^{\beta(e - \mu)} \rightarrow \infty e > \mu$$

$$e^{\beta(e - \mu)} \rightarrow 0 e < \mu$$

$$e^{\beta(e - \mu)} \rightarrow 1 e = \mu$$

Luego, con $T = 0$ es Fermi un escalón. El valor de μ que determina el último estado ocupado se llama e_F

DIBUJO

$$f_{3/2}(z) = \frac{\lambda^3}{v} = \int_0^{\xi = \beta \mu} \frac{x^{1/2}}{\Gamma(3/2) 3/2} dx = \frac{4}{3} \frac{1}{\pi^{1/2}} (\beta \mu)^{3/2} = \frac{4}{3} \frac{1}{\pi^{1/2}} (\beta e_F)^{3/2}$$

1.1 Análisis del gas ideal de Fermi

La primera aproximación consiste en

- Caso no degenerado : $\frac{\lambda^3}{v} \ll 1$ que lleva a T alta y v alto por ende N/V chico.

$$z \ll 1 \quad f_\nu(z) \approx z \quad \frac{\lambda^3}{v} \approx z$$

Si vale la condición entonces

$$\frac{\lambda^3}{v} = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^{l+1} z^l}{l^{3/2}} \ll 1 \quad z \ll 1$$

$$\beta p V \approx 1 + \frac{\lambda^3}{v 2^{5/2}} \quad U = \frac{3}{2} \frac{N}{\beta} \left(1 + \frac{\lambda^3}{v 2^{5/2}} \right)$$

- $\frac{\lambda^3}{v} < 1$ entonces $z < 1$ y hay que expandir el virial,

$$\beta p V = \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{l-1} a_l \left(\frac{\lambda^3}{v} \right)^{l-1}$$

que igualando coeficientes se hace (¿?)

λ^3/v a orden 1 hay efectos cuánticos

$$f_{5/2}(z) = f_{3/2}(z) \cdot \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{l-1} a_l \left(\frac{\lambda^3}{v} \right)^{l-1}$$

- $\frac{\lambda^3}{v} \approx 1$ Cálculo numérico
- Caso altamente degenerado : $\frac{\lambda^3}{v} \gg 1$ se tiene $z \gg 1$ Se puede expandir $f_{\nu}(z)$ en función de $(\log z)^{-1}$ mediante lema de Sommerfeld $z \gg 1$ entonces $\log z \gg 1$
 $(\log z)^{-1} \ll 1$ $\log z = \beta \mu$

$$f_{5/2}(z) = \frac{8}{15\pi^{1/2}} (\log z)^{5/2} \left[1 + \frac{5\pi^2}{8} (\log z)^{-2} + \dots \right]$$

$$f_{3/2}(z) = \frac{4}{3\pi^{1/2}} (\log z)^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} (\log z)^{-2} + \dots \right]$$

y entonces

$$\frac{\lambda^3}{v} = \frac{4}{3\pi^{1/2}} (\log z)^{3/2} \quad \text{a orden 0}$$

$$\frac{h^3}{(2\pi m k T)^{3/2}} \frac{N}{V} \frac{3\pi^{1/2}}{4} (k T)^{3/2} = \mu^{3/2}$$

$$\frac{h^3}{\pi} \frac{N}{V} \frac{3}{(2m)^{3/2} 4} = \mu^{3/2} = e_F^{3/2}$$

$$\frac{\lambda^3}{v} \frac{3\pi^{1/2}}{4} (k T)^{3/2} = \mu^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} (\log z)^{-2} + \dots \right]$$

$$\frac{h^3}{\pi} \frac{N}{V} \frac{3}{(2m)^{3/2} 4} = e_F^{3/2} \approx \mu^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} (\log z)^{-2} \right]$$

$$e_F \approx \mu \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{\mu}{kT} \right)^{-2} \right]^{2/3} \approx \mu \left[1 + \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\mu} \right)^2 \right]$$

Anoté investigar este pasaje.

$$e_F \approx \mu \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{e_F} \right)^2 \right]$$

y consideramos

$$\frac{1}{\mu^2} \approx \frac{1}{e_F^2}$$

pués μ es muy grande.

$$\beta p v = \frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}(z)} \approx \frac{2\beta\mu}{5} \left[1 + \frac{5\pi^2}{8} \left(\frac{kT}{\mu} \right)^2 \right] \left[1 - \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{kT}{\mu} \right)^2 \right]$$

Hasta orden dos en T resulta

$$p v \approx \frac{2\mu}{5} \left[1 + \frac{\pi^2}{2} \left(\frac{kT}{\mu} \right)^2 \right] = \frac{2e_F}{5} \left[1 - \frac{\pi}{12} \left(\frac{kT}{e_F} \right)^2 \right] \left[1 + \frac{\pi^2}{2} \left(\frac{kT}{e_F} \right)^2 \right]$$

$$p v \approx \frac{2e_F}{5} \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{e_F} \right)^2 \right]$$

$$U = \frac{3}{2} p v \approx \frac{3}{5} N e_F \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{e_F} \right)^2 \right]$$

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} \approx \frac{N \pi^2 k^2 T}{2 e_F} \quad C_V \propto T$$

$$C_V \approx \frac{\pi^2}{2} N k \left(\frac{T}{T_F} \right)$$

DIBUJO T_F siempre estará en general en la zona clásica donde no vale la aproximación degenerada.

Calor específico Fermi (ζ ?)

- Caso totalmente degenerado : $\frac{\lambda^3}{v} \rightarrow \infty \quad (T \rightarrow 0) \quad z \rightarrow \infty$

La distribución de estados es escalón,

$$\langle N \rangle = \frac{4\pi V}{h^3} \int_0^{p_F} p^2 \left(\frac{1}{z^{-1} e^{\beta p^2/2m} + 1} \right) dp$$

$$z = e^{\beta\mu} \mathbf{y}$$

$$z(T \rightarrow 0) = e^{\beta e_F} \rightarrow \infty$$

$$\langle N \rangle = \frac{4\pi V}{h^3} \int_0^{p_F} p^2 dp$$

Notemos que

$$pV = \frac{4\pi V}{h^3} \int_0^{p_F} p^2 kT \log(1 + e^{-1/kT(p^2/2m - \mu_0)}) dp$$

tiene un comportamiento no trivial con $T \rightarrow 0$. Si $kT \rightarrow 0$ entonces si $e > \mu_0$ el $\log \rightarrow 0$ y si $e < \mu_0$ el $\log \rightarrow \infty$. Parecería que con $T \rightarrow 0$ es

$$pV = \frac{4\pi V}{h^3} \int_0^{p_F} p^2 \left(\frac{p^2}{2m} - \mu_0 \right) dp$$

y haciendo el cambio de variables de acuerdo a $p^2/2m = e$, que lleva a $pdp = mde$, se tiene

$$pV = \frac{4\pi V}{h^3} \int_0^{e_F} \sqrt{2em}^{3/2} (e - \mu_0) de$$

$$pV = \frac{4\pi V}{h^3} 2^{1/2} m^{3/2} \left(\frac{e_F^{5/2}}{5/2} - \mu_0 \frac{e_F^{5/2}}{3/2} \right) = \frac{4\pi V}{h^3} 2^{1/2} m^{3/2} e_F^{5/2} \frac{4}{15}$$

$$U = \frac{3}{2} pV = \frac{4\pi V}{h^3} 2^{1/2} m^{3/2} e_F^{5/2} \frac{2}{5}$$

$$p = \frac{2}{5} e_F \frac{\langle N \rangle}{V} \quad U = \frac{3}{5} e_F \langle N \rangle$$

A $T = 0$ tenemos presión y energía no nulas; las partículas no se acomodan todas en un único nivel energético (exclusión de Pauli). Para $T \approx 0$ (T bajas) el escalón en estados apenas se desdibuja

DIBUJO.

1.2 Cuánticos III –reubicar–

1.2.1 Los números de ocupación

DIBUJO

Se ve que para Bose $\mu < 0$ siempre pero $\langle n \rangle \rightarrow \infty$ si $\mu \rightarrow 0^+$. El gráfico es para T alta. Con T bajas todo tiende a suceder más pegado al eje $\beta(e - \mu) = 0$

Teniendo el límite sale la cuenta

1.2.2 Comportamiento de $f_{3/2}(z)$

$$f_{3/2}(z) = \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^{j+1} \frac{z^j}{j^{3/2}} \approx z - \frac{z^2}{2^{3/2}} \quad z \text{ chico}$$

$$f_{3/2}(z) = \frac{1}{\Gamma(3/2)} \int_0^{\infty} \frac{x^{1/2}}{z^{-1} e^x + 1} dx \approx \frac{1}{\Gamma(3/2)} \int_0^{\log z = \beta\mu} x^{1/2} dx$$

Notemos que con $\beta\mu$ grande el integrando es 1 o 0 (DIBUJO); en realidad es un escalón en el límite en que $\xi \equiv \beta\mu \rightarrow \infty$ **Definimos $\log z \equiv \xi$ para no especular con temperaturas.**

$$f_{3/2}(z) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} (\log z)^{3/2} \quad z \text{ muy alto}$$

$$f_{3/2}(z) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left[(\log z)^{3/2} + \frac{\pi^2}{8} (\log z)^{-1/2} + \dots \right]$$

El valor λ^3/v determina relación entre T, V, N que son los parámetros macroscópicos que uno fija.

1.2.3 Casos

- Comportamiento clásico: $\frac{\lambda^3}{v} \ll 1$ Altas T y bajas $n \equiv \frac{N}{V}$

$$\frac{\lambda^3}{v} = f_{3/2}(z) \approx z - \frac{z^2}{2^{3/2}}$$

y por inversión de la serie

$$z = \frac{\lambda^3}{v} + \left(\frac{\lambda^3}{v} \right)^2 2^{-3/2}$$

y entonces si $\frac{\lambda^3}{v} \ll 1$ se tiene que $z \ll 1$

Sabemos que en Boltzmann es

$$\frac{\lambda^3}{v} = z$$

$$\frac{pv}{kT} = \frac{v}{\lambda^3} f_{5/2}(z) \quad \frac{\lambda^3}{v} = f_{3/2}(z)$$

$$\frac{pv}{kT} = \frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}(z)} \approx \frac{z - z^2/2^{5/2}}{z - z^2/2^{3/2}} \approx 1 + \frac{1}{2^{3/2}} \left(\frac{\lambda^3}{v} \right)$$

siendo el último término una corrección cuántica.

- Comportamiento cuántico : $\frac{\lambda^3}{v} \gg 1$ Bajas T y altas $n \equiv \frac{N}{V}$

A $T = 0$ determinamos la e_F como (con el límite de $T \rightarrow 0$)

$$\frac{\lambda^3}{v} = \frac{1}{\Gamma(3/2)} \int_0^{\log z = \beta\mu} x^{1/2} dx = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} (\log z)^{3/2}$$

$$\left(\frac{3\lambda^3 \sqrt{\pi}}{4v} \right)^{2/3} = \left(\frac{3h^3 \sqrt{\pi}}{4(2\pi mkT)^{3/2} v} \right)^{2/3} = \log z = \beta e_F$$

$$\frac{h^2}{2m} \left(\frac{3}{4\pi v} \right)^{2/3} = e_F = \frac{h}{2m} \left(\frac{6\pi^2}{v} \right)^{2/3}$$

A $T = 0$ la ocupación por nivel es un escalón ($e_F = \mu(T = 0)$)

$$\langle n_e \rangle = \begin{cases} 1 & e < e_F \\ 0 & e > e_F \end{cases}$$

1.2.4 Funciones termodinámicas con T baja y n alta

Usamos Sommerfeld

$$\frac{\lambda^3}{v} = f_{3/2}(z) \quad \mu = e_F$$

orden 1

$$\frac{\lambda^3}{v} = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} (\log z)^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} (\log z)^{-2} \right]$$

$$\frac{\lambda^3}{v} \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} (\log z)^{-2} \right]^{-1} \approx (\log z)^{3/2}$$

$$e_F \left(1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right) \approx \mu(T) \text{ cumple } \mu(T = 0) = e_F$$

Puede verse que con $\frac{\lambda^3}{v} \gg 1$ (T baja y n alta) es

$$C_V \approx \frac{N\pi^2 k^2 T}{2e_F}$$

DIBUJO

Aún a $T = 0$ hay presión no nula pero $S \rightarrow 0$ con $T \rightarrow 0$ respetando la tercera ley. Existe una relación de recurrencia

$$z \frac{\partial}{\partial z} f_\nu(z) = z \frac{\partial}{\partial z} \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{l+1} \frac{z^l}{l^\nu} = \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{l+1} \frac{l z^{l-1} z}{l^\nu} = \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{l+1} \frac{z^l}{l^{\nu-1}} = f_{\nu-1}(z)$$

$$f_\nu(z) = \int \frac{1}{z} f_{\nu-1}(z) dz$$

$$f_{3/2}(z) \approx \frac{4}{3\sqrt{\pi}} (\log z)^{5/2}$$

entonces

$$f_{5/2}(z) = \int dz \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \frac{(\log z)^{3/2}}{z} = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int dz \frac{2}{5} \frac{\partial}{\partial z} (\log z)^{5/2} = \frac{8}{15\sqrt{\pi}} (\log z)^{5/2}$$

Usamos

$$d(\log z)^n = n(\log z)^{n-1} / z$$

1.2.5 Sobre la aproximación de gas de Fermi para el núcleo

En lo que sigue una deducción más detallada del cálculo. Considero una caja de lados L

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L} \mathbf{n} \quad \hbar \mathbf{k} = \mathbf{p} = \frac{h}{L} \mathbf{n}$$

Tomo en el origen de coordenadas $n_i = \pm 1, \pm 2, \dots$ y así voy de $-L/2$ a $L/2 <$.

$$E = \frac{(\hbar |\mathbf{k}|)^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{m} \frac{2\pi^2}{L^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad n_i \in \mathbb{Z}$$

Quiero saber qué densidad de estados energéticos tengo. Para ello, en esféricas

$$E = \frac{\hbar^2}{m} \frac{2\pi^2}{L^2} r^2$$

donde r vive en la esfera (no es necesario tomar el octante y dividir sobre 8)

$$g(E) dE = N(r) dr = 4\pi r^2 dr$$

siendo $g(E) dE$ el número de puntos entre E y $E + dE$,

$$dE = \frac{(\hbar\pi)^2}{L^2 m} 4r dr$$

$$g(E) dE = \frac{L^3 m^{3/2} E^{1/2}}{\hbar^3 \pi^2 \sqrt{2}} dE$$

$$N = g \int_0^{e_F} g(E) dE = \sqrt{2} \frac{V m^{3/2}}{\hbar^3 \pi^2} \int_0^{e_F} e^{1/2} dE$$

$$N = \frac{V m^{3/2}}{\hbar^3 \pi^2} \frac{2^{3/2}}{3} e_F^{3/2}$$

$$\frac{1}{v} = \frac{m^{3/2}}{\hbar^3 \pi^2} \frac{2^{3/2}}{3} e_F^{3/2}$$

y entonces deducimos de aquí que

$$e_F = \frac{\hbar}{2m} \left(\frac{3\pi^2}{v} \right)^{2/3}$$

que coincide con la expresión para e_F con degeneración $g = 2$

¿Y estas cuentas sueltas?

$$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = r^2 \quad V = \frac{4}{3}\pi r^3 \quad dV = 4\pi r^2 dr$$

$$E = \frac{(\hbar\pi)^2}{2ma^2} r^2 \quad dE = \frac{(\hbar\pi)^2}{ma^2} r dr$$

$$N(r)dr = \frac{\pi}{2} r^2 dr$$

será lo mismo que el incremento en niveles energéticos

$$N(e)de = \frac{m^2 a^3}{\pi^2 \hbar^3} \left(\frac{E}{2} \right)^{1/2} dE$$

Pensamos un conjunto de nucleones como un gas de Fermi. Claramente

Recordemos que a $T = 0$ era
 $pV = 2/5 N e_F$ y $U = 3/5 N e_F$

$$N = 2 \int_0^{e_F} N(e) de$$

porque tenemos la ocupación en función de la energía

$$e_F \propto \left(\frac{N}{V} \right)^{2/3} \text{ según la definición de } e_F$$

Al aplicar este modelo (del gas de Fermi) al núcleo hacemos algunas consideraciones

$$R = a_0 A^{1/3} \quad V \propto A$$

siendo A el número de nucleones.

Para un núcleo se tienen $N=A-Z$ neutrones, siendo Z protones y A nucleones.

$$E = \frac{3}{5} N_T e_F \text{ (a } T = 0)$$

y tenemos un e_F de protones y de neutrones, que son

$$e_{Fp} \propto \left(\frac{Z}{A} \right)^{2/3} \quad e_{Fn} \propto \left(\frac{A-Z}{A} \right)^{2/3}$$

$$E = \frac{3}{5} \left[Z \left(\frac{Z}{V} \right)^{2/3} + (A-Z) \left(\frac{A-Z}{V} \right)^{2/3} \right] = \frac{3}{5} \left(\frac{Z^{5/3} + (A-Z)^{5/3}}{A^{2/3}} \right)$$

donde hemos supuesto ambos pozos iguales. Si los pozos no fueran iguales cambia la e_F .

Se minimiza E con $Z = N = A/2$ (simetría)

$$f_4 \propto E - E_0 = \frac{3}{5A^{2/3}} [Z^{5/3} + (A - Z)^{5/3} - 2(A/2)^{5/3}]$$

que se puede reescribir en función de $D = (N - Z)/2 = (A - 2Z)/2 = A/2 - Z$ (que será chico) y de esta manera

$$Z = \frac{A}{2} - D \quad A - Z = \frac{A}{2} + D$$

$$f_4 \propto \frac{3}{5} \left(\frac{[A/2 - D]^{5/3} + [A/2 + D]^{5/3} - 2[A/2]^{5/3}}{A^{2/3}} \right)$$

y que con un Taylor en $D \approx 0$ resulta

$$f_4 \propto \frac{(A/2 - Z)^2}{A} \propto D^2 \text{ término de simetría}$$

1.2.6 Cuánticos 3 – más material para reubicar–

Un esquema de temas: comportamiento de los números de ocupación gas de Fermi : comportamiento de $f_\nu(z)$ con $\nu = 3/2$ gas de Fermi con condiciones extremas

$$\lambda^3/v \ggg 1 \quad \lambda^3/v \lll 1$$

e_F con degeneración g funciones termodinámicas con $\lambda^3/v \ggg 1$ $S \rightarrow 0$ con $T \rightarrow 0$ Aproximación de gas de Fermi para núcleo densidad de estados $g(e)$

La expresión para $\mu(T)$ con $T \geq 0$ sale de

$$\begin{aligned} \frac{\lambda^3}{v} &= \frac{4}{3\sqrt{\pi}} (\log z)^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} (\log z)^{-2} \right] \\ (\log z)^{3/2} &= \frac{3\sqrt{\pi}h^3}{(2\pi m)^{3/2}(kT)^{3/2}4v} \frac{1}{\left[1 + \frac{\pi^2}{8} (\log z)^{-2} \right]} \\ \mu &= \left(\frac{3\sqrt{\pi}}{4v} \right)^{2/3} \frac{h^2}{2\pi m} \left(1 + \frac{\pi^2}{8 \log^2 z} \right)^{-2/3} \\ \mu &= e_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{e_F} \right)^2 \right] \end{aligned}$$

y con T baja podemos escribir todo en función de la e_F .

$$E = \frac{3}{5} N e_F \quad \text{con } T = 0$$

Lo importante de tener $f_{3/2}(z)$ en función de λ^3/v , desde

$$\lambda^3/v = f_{3/2}(z)$$

DIBUJO

es que vemos que z chico lleva a λ^3/v grande y consecuentemente z grande lleva a λ^3/v grande.

Luego,

clásico $z \ll 1$

$$\frac{\lambda^3}{v} \ll 1 \text{ independientemente}$$

cuántico $z \gg 1$

$$\frac{\lambda^3}{v} \gg 1 \text{ independientemente}$$

Con $T = 0$ es $\mu(T = 0) = e_F$ DIBUJO escalón

Cuántico (límite máximo) entonces

$$z \rightarrow \infty \Rightarrow \frac{\lambda^3}{v} = \frac{4(\log z)^{3/2}}{3\sqrt{\pi}}$$

$$\frac{\lambda^3}{v} = \frac{4}{2\sqrt{\pi}} (\beta e_F)^{3/2} \text{ con } z = e^{\beta e_F}$$

Entonces e_F es el nivel tal que debajo de él hay N estados. En el espacio de momentos las partículas ocupan una esfera de radio p_F .

1.2.7 Estadísticas –otra cosa para reubicar–

Esta sección es un sketchi

$$\langle n \rangle_i = \frac{1}{e^{\beta(e_i - \mu)} + a} \quad \begin{cases} a = 0 & \text{MB} \\ a = -1 & \text{BE} \\ a = 1 & \text{FD} \end{cases}$$

DIBUJO

Hay un yeite en la deducción que refiere a que abajo es lo mismo usar orden 1 que orden dos y reemplazo $(\beta\mu)^{-2}$ por $(\beta e_F)^{-2}$

Graficamos $1/e^x + a$ En la zona clásica coinciden las tres y es

$$e^{\beta(e_i - \mu)} \gg 1 \forall e_i \text{ de interés}$$

$$z^{-1} e^{\beta e_i} \gg 1 \quad \beta(e_i - \mu) \gg 0$$

$$e^{\beta e_i} \gg z \quad e_i \gg \mu$$

de (2) se deduce que como e_i pueden ser ≈ 0 entonces $0 \gg \mu$ y por lo tanto $e^{\beta\mu} \equiv z \ll 1$ de (1)

$$1 \gg e^{\beta\mu} \quad 0 \gg \beta\mu$$

Clásicamente $e^{\beta\mu}$ domina sobre z

$$\mu < 0 \text{ y } |\mu| \gg 1$$

Bose $\mu < \text{todo } e$

Fermi μ sin restricción

Para $z \gg 1$ conviene definir $\xi = \log z$ y entonces

$$f_\nu(z) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty \frac{x^{\nu-1}}{e^{x-\xi} + 1} dx$$

Siendo ξ grande se tendrá que

$$F = \frac{1}{e^{x-\xi} + 1} = \begin{cases} 1 & x < \xi \\ 1/2 & x = \xi \\ 0 & x > \xi \end{cases}$$

En este supuesto $\xi \gg 1$ podemos integrar

$$f_\nu(z) \approx \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty x^{\nu-1} dx$$

donde suponemos $T \gtrsim 0$ con lo cual $\beta\mu \rightarrow \infty, \xi \rightarrow \infty$ y $z^{-1} \rightarrow 0, e^{-\xi} \rightarrow 0$

$$f_\nu(z) \approx \frac{\xi^\nu}{\Gamma(\nu)\nu}$$

Con $\nu = 3/2$ resulta

$$f_{3/2}(z) \approx \frac{(\log z)^{3/2}}{\Gamma(3/2)3/2}$$

$$\frac{\lambda^3}{v} = \frac{4}{3} \frac{1}{\pi^{1/2}} (\beta\mu)^{3/2} \rightarrow \left(f_{3/2}(z) \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \right)^{2/3} \frac{1}{\beta} = e_F$$

$$\frac{h^2}{2m} \left(\frac{3}{4v\pi} \right)^{2/3} = \mu = e_F(\mu \text{ a } T = 0)$$

La $e_F(\mu \text{ a } T = 0)$ es la energía hasta la cual se hallan ocupados los niveles energéticos. Con $T \gtrsim 0$ la ocupación es un escalón

DIBUJO

La e_F es el valor de $\mu(T = 0)$

La energía U es

$$U = \frac{3}{2} pV = \frac{3V}{2\beta\lambda^3} f_{3/2}(z) = \frac{3N}{2\beta} \frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}(z)}$$

Tenemos una aproximación de Sommerfeld para z grande

$$f_{3/2}(z) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} (\log z)^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} (\log z)^{-2} + \dots \right]$$

$$f_{5/2}(z) = \frac{8}{15\sqrt{\pi}} (\log z)^{5/2} \left[1 + \frac{5\pi^2}{8} (\log z)^{-2} + \dots \right]$$

$$U = \frac{3N}{5\beta} (\log z) \left[1 + \frac{5\pi^2}{8} (\log z)^{-2} + \dots \right] \left[1 + \frac{\pi^2}{8} (\log z)^{-2} + \dots \right]^{-1}$$

$$U = \frac{3\mu}{5} \left[1 + \frac{5\pi^2}{8} (\log z)^{-2} + \dots \right] = \frac{3\mu}{5} + \frac{15\pi^2\mu}{60} \left(\frac{1}{\beta\mu} \right)^2 + \dots$$

$$C_v \equiv \frac{\partial}{\partial T} U/N \cong \frac{\pi^2}{2} \frac{k^2 T}{\mu}$$

entonces con $T \gtrsim 0$ es $C_v \propto T$ y con $T = 0$ es

$$\frac{U}{N} = \frac{3}{5} e_F$$

$$\frac{U}{N} = \frac{3}{5} e_F \left(1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{T}{\underbrace{e_F/k}_{\equiv T_F}} \right)^2 + \dots \right)$$

Para $z \approx 1$ se debe expandir en el virial

$$\frac{pV}{NkT} = \sum_{l=1}^{\infty} a_l \left(\frac{\lambda^3}{gv} \right)^{l-1} (-1)^{l-1}$$

Sabemos que

$$\frac{p}{kT} = \frac{f_{5/2}(z)}{\lambda^3}$$

y entonces con las expresiones de f_ν ,

$$\frac{pV}{NkT} = \frac{\sum_{j=1}^{\infty} (-1)^{j+1} z^j / j^{5/2}}{\sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k+1} z^k / k^{3/2}}$$

Debemos usar toda la serie

$$\left[\sum_{l=1}^{\infty} a_l \left(\frac{\lambda^3}{gv} \right)^{l-1} (-1)^{l-1} \right] \left[\sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k+1} z^k / k^{3/2} \right] = \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^{j+1} z^j / j^{5/2}$$

Resultan

$$\begin{cases} a_1 = 1 \\ a_2 = -0.17678 \\ a_3 = -0.00330 \end{cases}$$

$$\frac{pV}{NkT} = 1 + 0.17678 \underbrace{\left(\frac{\lambda^3}{gv} \right)}_{\propto T^{-3/2}} - 0.00330 \left(\frac{\lambda^3}{gv} \right)^2$$

Usando

$$U = 3/2 pV$$

$$\frac{U}{N} \cong 3/2 kT \left(1 + 0.17678 \left(\frac{\lambda^3}{gv} \right) \right)$$

$$\frac{\partial}{\partial T} \frac{U}{N} = C_v = 3/2 kT \left(1 + 0.17678 \left(\frac{\lambda^3}{gv} \right) \right) + \frac{3}{2} kT 0.17678 \frac{h^3}{gv(2\pi mk)^{3/2} 2/3 T^{5/2}}$$

y se puede despejar

$$c_v = \frac{3}{2} k \left[1 - 0.08839 \left(\frac{\lambda^3}{gv} \right) \right]$$

1.3 Estudio de un metal – título tentativo –

1.3.1 Estudio de un metal

Modelamos un metal como una red de átomos que pueden oscilar y un gas de electrones

$$(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \quad N \text{ átomos}$$

$$(\mathbf{x}_1^0, \dots, \mathbf{x}_N^0) \quad \text{Equilibrio fundamental}$$

PICTURE

Los desplazamientos del equilibrio serán

$$\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_i^0 = \vec{\xi}_i$$

Planteo de un potencial de pequeñas oscilaciones

$$K = \sum_i \frac{m}{2} |\vec{\xi}_i|^2 \quad \text{cinética}$$

$$V = V(\{\mathbf{x}_i^0\}) + \underbrace{\sum_i \frac{\partial V}{\partial \mathbf{x}_i} \bigg|_{\mathbf{x}_i}}_{=0} (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_i^0) + \sum_{i,j} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial \mathbf{x}_i \partial \mathbf{x}_j} (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_i^0) (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_j^0)$$

Es cero porque está evaluado en el mínimo.

$$V = V_0 + \sum_{i,j} \frac{1}{2} k_{ij} \vec{\xi}_i \cdot \vec{\xi}_j \quad \text{potencial}$$

siendo las constantes de fuerza k_{ij} las que controlan la interacción

$$H = V_0 + \frac{m}{2} |\vec{\xi}_i|^2 + \sum_{i,j} \frac{1}{2} k_{ij} \vec{\xi}_i \cdot \vec{\xi}_j$$

Este hamiltoniano se puede pasar a modos normales diagonalizando la matriz de fuerzas

$$H = V_0 + \frac{m}{2} \sum_i^{3N} (\dot{q}_i^2 + \omega_i^2 q_i^2)$$

y ω_i son las frecuencias de los $3N$ modos normales del sistema de N grados de libertad en 3D. En modos normales el hamiltoniano del sistema es el de $3N$ osciladores armónicos independientes (no acoplados. Puede resolverse mediante los operadores de bajada y de subida (cuántica) resultando en

$$E = \sum_i^{3N} \left(n_i + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_i$$

donde n_i es el número de fonones (ocupación) del modo normal i -ésimo.

Estos fonones, cuasipartículas, son bosones porque pueden ser

$$n_i = 0, 1, 2, \dots, \infty$$

y su número total no está fijo ($\mu = 0$ pues la energía no depende del número de fonones)

$$n_i = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_i} - 1}$$

pues $\hbar\omega_i$ es la energía del estado i -ésimo

$$n_i = \frac{1}{e^{\hbar\omega_i/kT} - 1}$$

$$E = V_0 + \frac{1}{2} \sum_i^{3N} \hbar\omega_i + \sum_i^{3N} n_i \hbar\omega_i$$

La función de partición canónica será

$$Q = \sum_E e^{-\beta E} = \sum_E e^{-\beta(\frac{1}{2} \sum \hbar\omega_i + \sum n_i \hbar\omega_i)}$$

$$Q = \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} \dots \sum_{n_N=0}^{\infty} e^{-\beta \sum (\hbar\omega_i/2 + n_i \hbar\omega_i)}$$

$$Q = \sum_{n_1} e^{-\beta(\hbar\omega_1/2 + n_1 \hbar\omega_1)} \sum_{n_2} e^{-\beta(\hbar\omega_2/2 + n_2 \hbar\omega_2)} \dots$$

$$Q = \prod_i^{3N} \left(\sum_{n_i=0}^{\infty} e^{-\beta(\hbar\omega_i/2 + n_i \hbar\omega_i)} \right) = \prod_i^{3N} \left(\sum_{n_i=0}^{\infty} e^{-\beta n_i \hbar\omega_i} \right) e^{-\beta \hbar\omega_i/2}$$

$$Q = \prod_i^{3N} \left(\frac{1}{1 - e^{-\beta \hbar\omega_i}} \right) e^{-\beta \hbar\omega_i/2} = \prod_i^{3N} \left(\frac{1}{e^{\beta \hbar\omega_i} - e^{-\beta \hbar\omega_i}} \right)$$

$$\log Q = \sum_i^{3N} \log \left(\frac{1}{e^{\beta \hbar\omega_i} - e^{-\beta \hbar\omega_i}} \right) = \sum_i^{3N} -\log (e^{\beta \hbar\omega_i} - e^{-\beta \hbar\omega_i})$$

$$\log Q = \sum_i^{3N} -\log \left(2 \sinh \left(\frac{\hbar\omega_i}{2kT} \right) \right)$$

Si quisiéramos pasar al continuo resultaría (con $N \rightarrow \infty$)

$$\log Q = - \int_0^{\infty} d\omega g(\omega) \log \left[2 \sinh \left(\frac{\beta \hbar\omega}{2} \right) \right]$$

donde $g(\omega)$ es la densidad de estados y

$$d\omega g(\omega) = \# \text{ de modos normales con frecuencia entre } \omega \text{ y } \omega + d\omega$$

Tenemos dos métodos de cálculo de energía

$$\begin{array}{l|l}
 E = \sum_i^{3N} (n_i + 1/2) \hbar \omega_i & -\frac{\partial \log Q}{\partial \beta} = \sum_i^{3N} \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_i} - e^{-\beta \hbar \omega_i}} (e^{\beta \hbar \omega_i} + e^{-\beta \hbar \omega_i}) \frac{\hbar \omega_i}{2} \\
 \sum_i^{3N} \hbar \omega_i \left(\frac{1/2 e^{\beta \hbar \omega_i} + 1/2}{e^{\beta \hbar \omega_i} - 1} \right) & -\frac{\partial \log Q}{\partial \beta} = \sum_i^{3N} \left(\frac{e^{\beta \hbar \omega_i} + e^{-\beta \hbar \omega_i}}{e^{\beta \hbar \omega_i} - e^{-\beta \hbar \omega_i}} \right) \frac{\hbar \omega_i}{2} \\
 \sum_i^{3N} \frac{\hbar \omega_i}{2} \left(\frac{e^{\beta \hbar \omega_i} + 1}{e^{\beta \hbar \omega_i} - 1} \right) & = \sum_i^{3N} \left(\frac{e^{2\beta \hbar \omega_i} + 1}{e^{2\beta \hbar \omega_i} - 1} \right) \frac{\hbar \omega_i}{2}
 \end{array}$$

Por supuesto ambas coinciden. Observemos que

$$\# \text{ de fonones} = \sum_i^{3N} n_i$$

es una cantidad que no es fija (se crean y se destruyen). Por ello podemos evaluar fácilmente el Q .

Desde E se puede evaluar el C_v

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial E}{\partial T} &= \sum_i^{3N} \frac{\hbar \omega_i}{2} \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\cosh \beta \hbar \omega_i}{\sinh \beta \hbar \omega_i} \right) \\
 C_v &= \sum_i^{3N} \frac{\hbar \omega_i}{2} \left[\frac{\sinh \beta \hbar \omega_i}{\sinh \beta \hbar \omega_i} \frac{\partial \beta \hbar \omega_i}{\partial T} - \frac{\cosh^2 \beta \hbar \omega_i}{\sinh^2 \beta \hbar \omega_i} \frac{\partial \beta \hbar \omega_i}{\partial T} \right] \\
 C_v &= \sum_i^{3N} \frac{\hbar \omega_i}{2} \frac{\hbar \omega_i}{2k} \left(\frac{-1}{T^2} \right) \left(\frac{-1}{\sinh^2 \beta \hbar \omega_i} \right)
 \end{aligned}$$

Tenemos el modelo de Einstein, que usa $\omega_i = \omega_E \forall i$ y entonces

$$\begin{aligned}
 C_v &= 3Nk \left(\frac{\hbar \omega_E}{kT} \right)^2 \frac{1}{[e^{\hbar \omega_E/kT} - e^{-\hbar \omega_E/kT}]^2} \\
 C_v &= 3Nk \left[\left(\frac{1}{t} \right)^2 \left(\frac{1}{e^{1/(2t)} - e^{-1/(2t)}} \right)^2 \right]
 \end{aligned}$$

Con $T \gg 1$ es $[\dots] \rightarrow 1$ y $C_v = 3Nk$ (clásico). Con $T < 1$ se comporta exponencialmente.

Dibujo

$C_v \rightarrow 3Nk$ con $T \gg 1$, $C_v \rightarrow 0$ con $T \rightarrow 0$ Tiende a cero muy rápidamente

1.3.2 Modelo de Debye

Las frecuencias se distribuyen continuamente de modo que hay

$$\int_0^{\omega_D} g(\omega) d\omega = 3N$$

modos normales; es decir que se integra hasta una frecuencia de corte ω_D . $g(\omega)$ la extraemos de considerar frecuencias permitidas de una onda plana de sonido en un sólido de lados L .

$$\mathbf{p} = \frac{h}{L} \mathbf{n} = \frac{h}{2\pi} \mathbf{k} \quad \rightarrow \quad \mathbf{k} = \frac{2\pi}{L} \mathbf{n} \quad \delta|\mathbf{k}| = \frac{(2\pi)^3}{V}$$

$$c_s = \frac{\omega}{|\mathbf{k}|} \quad \rightarrow \quad 4\pi k^2 \frac{V}{(2\pi)^3} dk = 1 \text{ esféricas}$$

$$d|\mathbf{k}| = \frac{d\omega}{c_s}$$

y será

$$\frac{V}{2\pi^2} k^2 dk = \frac{V}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{c^3} d\omega$$

$$g(\omega) d\omega = g(k) dk \quad \rightarrow \quad g(\omega) = \frac{V\omega^2}{2\pi^2 c^3}$$

$$\int_0^{\omega_D} \frac{V\omega^2}{2\pi^2 c^3} d\omega = \frac{V\omega_D^3}{6\pi^2 c^3} = 3N$$

$$\omega_D = c \left(\frac{18\pi^2}{v} \right)^{1/3}$$

En realidad hay que considerar los tres modos: uno longitudinal y dos transversales,

$$\int_0^{\omega_D} \frac{V\omega^2}{2\pi^2} \left(\frac{1}{c_L^3} + \frac{2}{c_T^3} \right) d\omega = \frac{V\omega_D^3}{6\pi^2} \left(\frac{1}{c_L^3} + \frac{2}{c_T^3} \right) = 3N$$

$$\omega_D = \left(\frac{1}{c_L^3} + \frac{2}{c_T^3} \right)^{-1/3} \left(\frac{18\pi^2}{v} \right)^{1/3}$$

$$\frac{V}{2\pi^2 c^3} = \frac{9N}{\omega_D^3} \quad \rightarrow \quad g(\omega) = \frac{9N}{\omega_D^3} \omega^2$$

$$C_v = \sum_i^{3N} k_B \left(\frac{\hbar\omega_i}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{-\left(\frac{\hbar\omega_i}{k_B T}\right)}}{(1 - e^{-\left(\frac{\hbar\omega_i}{k_B T}\right)})^2}$$

Había unas cuantitas de los diferenciales discretos que se pueden referir nomás.

La suma en los $3N$ modos normales (estados de fonones) puede pasarse a integral

$$C_v = \int_0^{\omega_D} g(\omega) k_B \left(\frac{\hbar \omega}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{-\left(\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right)}}{(1 - e^{-\left(\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right)})^2} d\omega$$

Usando la aproximación de Debye es

DIBUJO

$$g(\omega) = \frac{9N}{\omega_D^3} \omega^2$$

$$C_v = \int_0^{\omega_D} \frac{9N}{\omega_D^3} \omega^2 k_B \left(\frac{\hbar \omega}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{-\left(\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right)}}{(1 - e^{-\left(\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right)})^2} d\omega$$

reemplazamos

$$x = \frac{\hbar \omega}{k_B T} \quad dx = \frac{\hbar}{k_B T} d\omega$$

$$k_B \int_0^{\hbar \omega_D / (k_B T)} \frac{9N}{\omega_D^3} \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^3 x^4 \frac{e^{-x}}{(1 - e^{-x})^2} dx$$

$$C_v = 3N k_B \left(\int_0^{\beta \hbar \omega_D \equiv x_D} \frac{3x^4 e^{-x}}{x_D^3 (1 - e^{-x})^2} dx \right)$$

$$D(x_D) \equiv \frac{3}{x_D^3} \int_0^{x_D} \frac{x^4 e^{-x}}{(1 - e^{-x})^2} dx = \frac{3}{x_D^3} \int_0^{x_D} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx$$

El caso límite $T \rightarrow \infty$ (clásico) resulta en $D(x_D) = 1$ pues el integrando es como x^2 y entonces

$$C_v = 3N k_b$$

DIBUJITO bosquejo

Trabajando sobre $D(x_D)$ se tiene

$$\frac{3}{x_D^3} = \left[\int_0^{x_D} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx \right]$$

e integrando por partes ($u = x^4$ y $dv = e^x / (e^x - 1)^2 dx$) se arriba a

$$\frac{3x_D}{1 - e^{x_D}} + \frac{12}{x_D^3} \int_0^{x_D} \frac{x^3}{e^x - 1} dx$$

Con $x \ll 1$ es

$$e^x - 1 = x \left(1 + \frac{x}{2} + \frac{x^2}{6} \right)$$

$$\frac{1}{e^x - 1} = \frac{1}{x} \left(1 + \frac{x}{2} + \frac{x^2}{6} \right)^{-1} \approx \frac{1}{x} \left(1 - \left[\frac{x}{2} + \frac{x^2}{6} \right] + \left[\frac{x}{2} + \frac{x^2}{6} \right]^2 \right)$$

y quedándonos a orden 2

$$\frac{1}{e^x - 1} \approx \frac{1}{x} \left(1 - \frac{x}{2} + \frac{x^2}{12} \right) = \frac{1}{x} - \frac{1}{2} + \frac{x}{12}$$

$$3x_D \left(-\frac{1}{x_D} + \frac{1}{2} - \frac{x_D}{12} \right) + \frac{12}{x_D^3} \int_0^{x_D} \left(x^2 - \frac{x^3}{2} + \frac{x^4}{12} \right) dx = 1 - \frac{x_D^2}{20}$$

llegamos a

$$C_v = 3Nk_b \left[1 - \frac{x_D^2}{20} \right] = 3Nk_b \left[1 - \frac{(\hbar\omega_D)^2}{20(kT)^2} \right]$$

Con $x_D \ll 1$ ($T \gg 1$) tiende al valor clásico (Pettit & Dulong)

Con $x_D \gg 1$

$$D(x_D) = \frac{3x_D}{1 - e^{x_D}} + \frac{12}{x_D^3} \int_0^{x_D} \frac{x^3}{e^x - 1} dx$$

y como podemos integrar entre 0 e ∞ con lo cual

$$\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}$$

DIBUJO

$$D(x_D) = \frac{4}{5} \frac{\pi^4}{x_D^3} = \frac{4\pi^4}{5} \left(\frac{kT}{\hbar\omega_D} \right)^3$$

DIBUJO Ley de Dulong y Pettit

$$C_v = 3Nk_B \left(\frac{4\pi^4}{5} \right) \left(\frac{k}{\hbar\omega_D} \right) T^3$$

Con $x_D \gg 1$ ($T \ll 1$) tiende a 0 como resulta experimentalmente.

1.3.3 Gas de electrones en metales

Consideramos bajas temperaturas y altas densidades

=

Usamos aproximación de Sommerfeld (1928)

$$\begin{aligned} &= \\ &= \\ &= \\ &= \end{aligned}$$

Veamos que la e_F disminuye con el aumento de v y m . Para la distribución de Fermi teníamos

DIBUJO

$$\begin{aligned} &= \\ &= \\ &= \end{aligned}$$

Usamos que

$$\begin{aligned} &= \\ &= \end{aligned}$$

Si $kT' \ll kT_F$ entonces

$$=$$

dice que con $\delta e = 2kT'$ es $n_e \sim 0.11$ y es $2kT'$ justamente el apartamiento del caso degenerado

Si, como sucede con T_{AMB} en un gas de electrones por ejemplo,

$$T_{AMB} \ll T_F$$

se tiene

$$T_F = e_F/k_B$$

DIBUJO

La T_F es una propiedad de las partículas del gas que mide la sensibilidad ante cambios en la temperatura.

Para saber si me hallo muy lejos del comportamiento tipo escalón ($T = 0$) evalúo T_F . Si resulta $T < T_F$ entonces la variación $2kT$ es aproximadamente el e tal que $n_e = 0.11$.

Asimismo para el C_v se tenía

$$C_v = \frac{\pi^2}{2} Nk \left(\frac{T}{T_F} \right)$$

Gas de Fermi

Modelando un sólido como

gas de Fermi (electrones) + gas de fonones (átomos centrales)

se tienen

$$C_v = \alpha T + \beta T^3$$

y vemos que a T_{AMB} (alta) domina el término de fonones y a muy baja T ($T \lesssim 1$) el de electrones.

* idea

Dibujito

Evaluando la desigualdad $T < T_F$ podemos ver si la distribución tiene pinta de escalón o de rampa.

1.3.4 Emisión termoiónica

Modelaremos un gas de electrones confinado en un potencial W creado por una red de iones positivos.

DIBUJO

Veamos emisión en \hat{z} . Necesitaremos

$$K > W \quad \frac{p_z^2}{2m} > W \quad p_z > (2mW)^{1/2}$$

y sea $n\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}$ flujo de electrones a través del área A en la unidad de tiempo, R el número de electrones en la unidad de tiempo y de área nv_z , i.e.

$$R = n \frac{p_z}{m} = \frac{Np_z}{Vm}$$

$$=$$

$$=$$

Pasamos $dp_x dp_y = p' 2\pi dp'$ (polares)

$$=$$

$$=$$

a T altas resulta

$$=$$

$$=$$

a T bajas también es

$$=$$

con lo cual la integral da lo mismo

$$=$$

pero aquí

$$\frac{\lambda^3}{v} \approx z = e^{\mu/(kT)} \quad \rightarrow \quad \frac{h^3}{v(2\pi mkT)^{3/2}} = z$$

$$R = \frac{4(kT)^{1/2}}{v(2\pi m)^{1/2}} e^{-W/(kT)}$$