Demostraciones

Joseph Panana Vera

06/02/2021

1 Demostración de la ecuación (15)

$$\mu = \varepsilon_F \left[1 + O\left(\left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F} \right)^2 \right) \right] \tag{1.1}$$

Partimos de la enegía y densidad de electrones

$$u = \int_{-\infty}^{\infty} g(\varepsilon)\varepsilon f(\varepsilon) d\varepsilon \tag{1.2}$$

$$n = \int_{-\infty}^{\infty} g(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon \tag{1.3}$$

Ambas integrales se pueden expresar en la forma

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} H(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon \tag{1.4}$$

donde

$$H(\varepsilon) = \begin{cases} \varepsilon g(\varepsilon), & para\ u \\ g(\varepsilon), & para\ n \end{cases} \tag{1.5}$$

Podemos expandir $H(\varepsilon)$ en serie de taylor alrededor de μ para $T \neq 0$

$$H(\varepsilon) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left. \frac{d^n H(\varepsilon)}{d\varepsilon^n} \right|_{\varepsilon=\mu} (\varepsilon - \mu)^n \tag{1.6}$$

Definimos

$$K(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\varepsilon} H(\varepsilon) d\varepsilon \tag{1.7}$$

con lo cual

$$H(\varepsilon) = \frac{dK(\varepsilon)}{d\varepsilon} \tag{1.8}$$

Reemplazando en la ecuación (1.4), tendremos

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dK(\varepsilon)}{d\varepsilon} f(\varepsilon) d\varepsilon \tag{1.9}$$

y si aplicamos la integración por partes

$$u = f(\varepsilon) \longrightarrow du = \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} d\varepsilon \tag{1.10}$$

$$dv = \frac{\partial K}{\partial \varepsilon} d\varepsilon \longrightarrow v = K(\varepsilon) \tag{1.11}$$

reemplazando

$$I = K(\varepsilon) f(\varepsilon)\Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} K(\varepsilon) \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} d\varepsilon \tag{1.12}$$

ya que $K(\varepsilon) = 0$ cuando $\varepsilon \longrightarrow -\infty$ y $f(\varepsilon) = 0$ cuando $\varepsilon \longrightarrow \infty$, por tanto

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} K(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon \tag{1.13}$$

como $K(\varepsilon)$ es diferenciable alrededor de μ, podemos expandirlo en serie de Taylor

$$K(\varepsilon) = K(\mu) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^n K(\varepsilon)}{d\varepsilon^n}\bigg|_{\varepsilon=\mu} (\varepsilon - \mu)^n \tag{1.14}$$

$$K(\varepsilon) = K(\mu) + (\varepsilon - \mu) \frac{dK(\varepsilon)}{d\varepsilon}\bigg|_{\varepsilon=\mu} + \frac{1}{2}(\varepsilon - \mu)^2 \frac{d^2 K(\varepsilon)}{d\varepsilon^2}\bigg|_{\varepsilon=\mu} + \ldots \tag{1.15}$$

reemplazando la ecuación (1.15) en (1.13)

$$I = K(\mu) \int_{-\infty}^{\infty} \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon + \frac{dK(\varepsilon)}{d\varepsilon}\bigg|_{\varepsilon=\mu} \int_{-\infty}^{\infty} (\varepsilon - \mu) \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon + \frac{1}{2} \frac{d^2 K(\varepsilon)}{d\varepsilon^2}\bigg|_{\varepsilon=\mu} \int_{-\infty}^{\infty} (\varepsilon - \mu)^2 \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon + \ldots \tag{1.16}$$

resolvemos las integrales del primer y segundo término

Primer término

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\varepsilon - \mu) d\varepsilon = 1 \tag{1.17}$$

Segundo término

$$\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} = \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1} \right) = -\frac{\beta}{\left(e^{\frac{1}{2}\beta(\varepsilon-\mu)} + e^{-\frac{1}{2}\beta(\varepsilon-\mu)} \right)^2} \tag{1.18}$$

reemplazando en la integral, donde tendremos en cuenta un cambio de variable $x = \beta(\varepsilon - \mu)$

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\varepsilon - \mu) \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon = \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{1}{\left(e^{\frac{x}{2}} + e^{-\frac{x}{2}} \right)^2} dx = 0 \tag{1.19}$$

donde $\forall$ a impares

$$\frac{1}{\beta^a} \int_{-\infty}^{\infty} x^a \frac{1}{\left(e^{\frac{x}{2}} + e^{-\frac{x}{2}} \right)^2} dx = 0 \tag{1.20}$$

Por tanto en la ecuación (1.16) solo quedaran los términos pares, entonces

$$I = K(\mu) + \frac{1}{2} \frac{d^2 K(\varepsilon)}{d\varepsilon^2}\bigg|_{\varepsilon=\mu} \int_{-\infty}^{\infty} (\varepsilon - \mu)^2 \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon + \ldots \tag{1.21}$$

Desarrollando la integral del segundo término de la ecuación (1.21), teniendo en cuenta el cambio de variable

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\varepsilon - \mu)^2 \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon = \frac{1}{\beta^2} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \frac{1}{\left(e^{\frac{x}{2}} + e^{-\frac{x}{2}}\right)^2} dx \tag{1.22}$$

$$= \frac{1}{\beta^2} \frac{\pi^2}{3} \tag{1.23}$$

reemplazando en la ecuación (1.21)

$$I = K(\mu) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2 K(\varepsilon)}{d\varepsilon^2} \right|_{\varepsilon=\mu} \frac{1}{\beta^2} \frac{\pi^2}{3} + \dots \tag{1.24}$$

$$I = K(\mu) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left. \frac{d^2 K(\varepsilon)}{d\varepsilon^2} \right|_{\varepsilon=\mu} + \dots \tag{1.25}$$

usando la ecuación (1.8)

$$I = K(\mu) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left. \frac{d}{d\varepsilon} \left(\frac{dK(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right) \right|_{\varepsilon=\mu} + \dots \tag{1.26}$$

$$I = \int_{-\infty}^{\mu} H(\varepsilon) d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left. \frac{dH(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=\mu} + \dots \tag{1.27}$$

Aplicando para la ecuación (1.3) con $H(\varepsilon) = g(\varepsilon)$

$$n = \int_{0}^{\mu} g(\varepsilon) d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left. \frac{dg(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=\mu} + O\left((K_B T)^4 \right) \tag{1.28}$$

$$n = \int_{0}^{\mu} g(\varepsilon) d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 g'(\mu) + O\left((K_B T)^4 \right) \tag{1.29}$$

se debe introducir la corrección

$$\int_{0}^{\mu} H(\varepsilon) d\varepsilon = \int_{0}^{\varepsilon_F} H(\varepsilon) d\varepsilon + (\mu - \varepsilon_F) H(\varepsilon_F) \tag{1.30}$$

en la ecuación (1.29)

$$n = \int_{0}^{\varepsilon_F} g(\varepsilon) d\varepsilon + (\mu - \varepsilon_F) g(\varepsilon_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 g'(\varepsilon_F) + O\left((K_B T)^4 \right) \tag{1.31}$$

como

$$n = \int_{0}^{\varepsilon_F} g(\varepsilon) d\varepsilon \tag{1.32}$$

entonces al reemplazarlo en la ecuación (1.31), se obtendra

$$0 = (\mu - \varepsilon_F) g(\varepsilon_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 g'(\varepsilon_F) + O\left((K_B T)^4 \right) \tag{1.33}$$

Despejando μ se obtiene

$$\mu = \varepsilon_F \left[1 - \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 \frac{g^{'}(\varepsilon_F)}{\varepsilon_F g(\varepsilon_F)} + O\left((K_B T)^4\right) \right] \qquad [1.34]$$

Para electrones libres en 3 dimensiones, la densidad de estados $g(\varepsilon) = \varepsilon^{\frac{1}{2}}$

$$\mu = \varepsilon_F \left[1 - \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 \frac{1}{2\varepsilon_F^2} + O\left((K_B T)^4\right) \right] \qquad [1.35]$$

$$\mu = \varepsilon_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12}\left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right)^2 + O\left((K_B T)^4\right) \right] \qquad [1.36]$$

Por tanto

$$\mu = \varepsilon_F \left[1 + O\left(\left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right)^2\right) \right] \qquad [1.37]$$

2 Demostración de la ecuación (22)

$$g(\varepsilon_F) = \frac{m k_F}{\pi^2 \hbar^2} \qquad [2.1]$$

Tenemos en cuenta que la densidad de energía y densidad de electrones

$$u = \frac{U}{V} = \frac{1}{4\pi^3} \int \varepsilon(\vec{k}) f(\varepsilon(\vec{k})) d\vec{k} \qquad [2.2]$$

$$n = \frac{N}{V} = \frac{1}{4\pi^3} \int f(\varepsilon(\vec{k})) d\vec{k} \qquad [2.3]$$

Por tanto evaluaremos integrales de la forma

$$\frac{1}{4\pi^3} \int F(\varepsilon(\vec{k})) d\vec{k} \qquad [2.4]$$

donde

$$F(\varepsilon(\vec{k})) = \begin{cases} \varepsilon(\vec{k}) f(\varepsilon(\vec{k})), \; para \; u \\ f(\varepsilon(\vec{k})), \; para \; n \end{cases} \qquad [2.5]$$

Expresando la ecuación (2.4) en coordenadas esféricas

$$= \frac{1}{4\pi^3} \int F(\varepsilon(\vec{k})) 4\pi k^2 dk = \int F(\varepsilon(\vec{k})) \frac{k^2 dk}{\pi^2} \qquad [2.6]$$

Haciendo un cambio de variable

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad [2.7]$$

$$k^2 dk = \frac{m}{\hbar^2} \left(\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} d\varepsilon \qquad [2.8]$$

Por tanto, cuando reemplacemos la ecuación (2.8) en (2.6)

$$= \int \frac{1}{\pi^2} \frac{m}{\hbar^2} \left(\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} F(\varepsilon(\vec{k})) d\varepsilon \qquad [2.9]$$

Donde definimos la densidad de estados

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{\pi^2}\frac{m}{\hbar^2}\left(\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} \qquad [2.10]$$

y si tenemos en cuenta que

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \qquad [2.11]$$

Acomodando la ecuación (2.10)

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{\pi^2}\frac{m}{\hbar^2}\left(\frac{\varepsilon k_F^2}{\frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}}\right)^{\frac{1}{2}} \qquad [2.12]$$

con lo cual

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{\pi^2}\frac{mk_F}{\hbar^2}\left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_F}\right)^{\frac{1}{2}} \qquad [2.13]$$

cuando $\varepsilon = \varepsilon_F$ tendremos

$$g(\varepsilon_F) = \frac{mk_F}{\pi^2\hbar^2} \qquad [2.14]$$