

Capítulo 1

Gas de Fermi

La cosa comienza pasando al límite continuo, donde la $\sum_e \rightarrow V/h^3 \int d^3p$ siendo la energía $e = p^2/(2m)$

Luego, el gas ideal de Fermi sale de estas dos expresiones

$$\begin{aligned}\frac{P}{kT} &= \frac{4\pi}{h^3} \int_0^\infty dp p^2 \log(1 + z e^{-\beta p^2/(2m)}) = \frac{1}{\lambda^3} f_{5/2}(z) \\ \frac{1}{V/N} &= \frac{4\pi}{h^3} \int_0^\infty dp p^2 \frac{1}{z^{-1} e^{-\beta p^2/(2m)} + 1} = \frac{1}{\lambda^3} f_{3/2}(z)\end{aligned}\quad (1)$$

donde λ es la longitud de onda térmica (que es similar al ancho del paquete de onda de la partícula) Aquí en cada una de esas expresiones, en el RHS, podríamos incorporar un factor g que serían los grados de libertad internos $\deg(e)$ que no están asociados al momento \mathbf{p} . La ecuación (1) nos relaciona z con la densidad y de allí se extrae $\mu(V, T, N)$.

v nos da idea de qué tan separadas están las partículas.

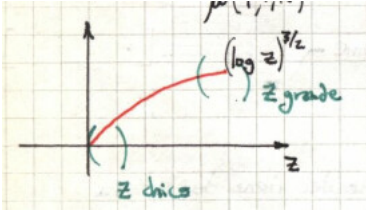
$$\begin{aligned}\lambda &= \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mkT}} & \lambda &\sim \frac{1}{T^{1/2}} \\ f_{5/2}(z) &= \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx x^2 \log(1 + z e^{-x^2}) = \sum_\ell^\infty (-1)^{\ell+1} \frac{z^\ell}{\ell^{5/2}} \\ f_{3/2}(z) &= z \frac{\partial}{\partial z} f_{5/2}(z) = \sum_\ell^\infty (-1)^{\ell+1} \frac{z^\ell}{\ell^{3/2}}\end{aligned}$$

En general será

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

que cumple

$$z \frac{dF_\nu(z)}{dz} = \frac{df_\nu(z)}{d\log(z)} = f_{\nu-1}(z).$$



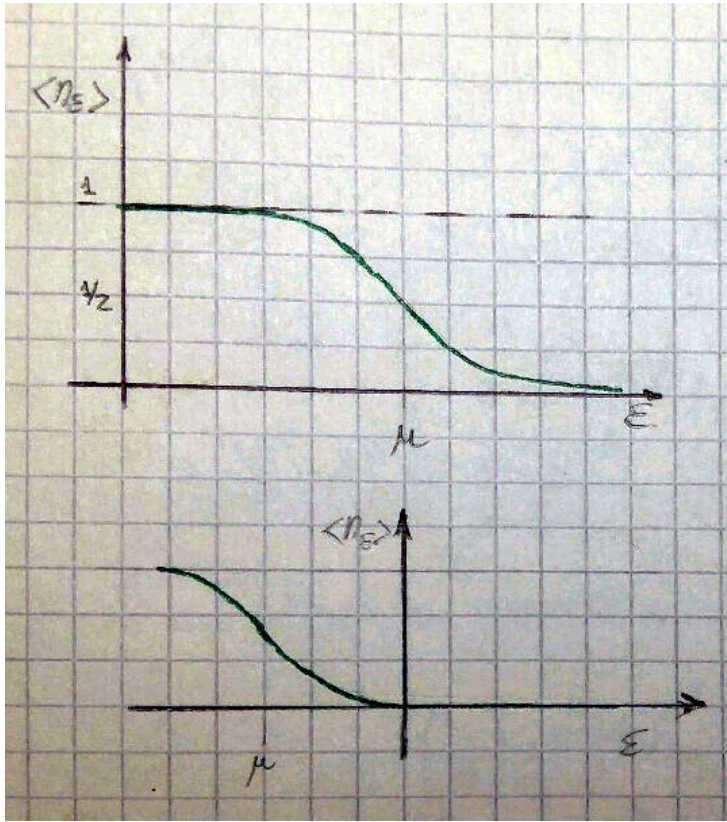
La física del problema dependerá de (a) la dimensión del sistema (b) la relación $e(p)$. Notemos que por ejemplo en 2D no hay condensación de Bose.

Sabíamos que

$$U(z, V, T) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Q(z, V, T)$$

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

y esto es válido para bosones, fermiones y boltzmanniones.



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

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).

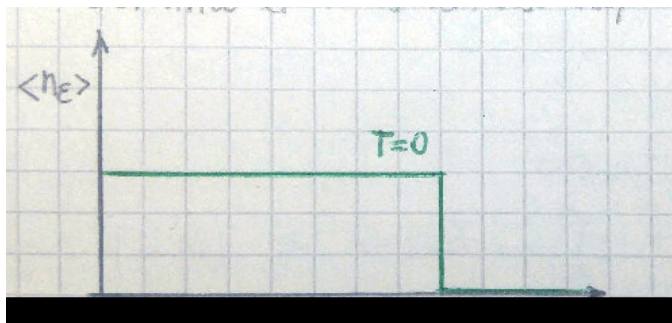
Sea que $T \rightarrow \infty$ entonces $\beta \rightarrow 0$ y se sigue que

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

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

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

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



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

Pathria 132 cuentas de
GC. Pathria 138 gases
simples.

1.0.1 Análisis del gas ideal de Fermi

La primera aproximación consiste en

- Caso no degenerado : $\lambda^3/v \ll 1$ que lleva a T alta y v alto por ende N/V chico (densidad baja). Es un gas diluído, el límite debería ir a Boltzmann (gas ideal clásico)

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

Si vale la condición entonces

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

y vemos que se puede invertir para conseguir la expresión de z ,

$$z \sim \frac{\lambda^3}{V} + \frac{1}{2^{3/2}} \left(\frac{\lambda^3}{V} \right)^2 \sim \frac{\lambda^3}{V} \ll 1$$

y se tiene $e^{\beta\mu} \ll 1$ y por ende $\mu \ll 0$. En el límite clásico $\mu \rightarrow -\infty$.

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

- $\frac{\lambda^3}{v} < 1$ 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 : $\lambda^3/v \gg 1$ (bajas temperaturas y altas densidades), se tiene $z \gg 1$. Se puede expandir $f_{\nu}(z)$ en función de $(\log)^{-1}$ 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, tomando la más burda,

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

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

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

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

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

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

Anoté investigar este pasaje.

Entonces si se tiene $0 < T \ll T_F$ resulta (realmente en la carpeta está al revés $\mu = e_F$], así que probablemente hay un cambio de signo y aproximaciones en el medio))

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

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 ($i?$) se anula con $T = 0$

Tomé notas de una evaluación más

$$f_{11/2}(z) \approx \frac{2}{\sqrt{\pi}} (\log z)^{1/2} \left[1 - \frac{\pi^2}{24} (\log z)^{-2} + \dots \right]$$

que harían llegar a una corrección (notar que arriba fui hasta orden cero nomás)

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

Otra cosa es la integral

$$N = \int_0^\infty g(e) n_e de \rightarrow \int_0^\infty \frac{g(e)}{e^{\beta(e-\mu)+1}} de$$

y vemos que la dimensionalidad entra en $g(e)$ mientras el denominador va al escalón con temperatura nula. En este último caso la integral es $\int^{e_F} g(e) de$. Pero para $T \sim 0$ la itnegral es más complicada y el lema de Sommerfeld ayuda,

$$\int_0^\infty \frac{\phi(x)}{e^{x-\xi} + 1} dx = \int_0^\xi \phi(x) dx + \frac{\pi^2}{6} \left. \frac{d\phi}{dx} \right|_{x=\xi} + \frac{7\pi^4}{360} \left. \frac{d^3\phi}{dx^3} \right|_{x=\xi} + \frac{31\pi^5}{15120} \left. \frac{d^5\phi}{dx^5} \right|_{x=\xi}$$

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

La distribución de estados es escalón,

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

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

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

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

Teniendo el límite sale la cuenta

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

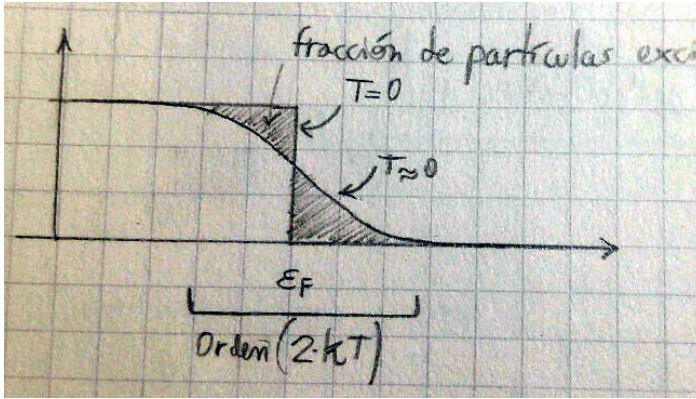
$$pV = \frac{4\pi V}{h^3} \int_0^{e_F} \sqrt{2em}^{3/2} (e - \mu_0) de$$

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

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

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

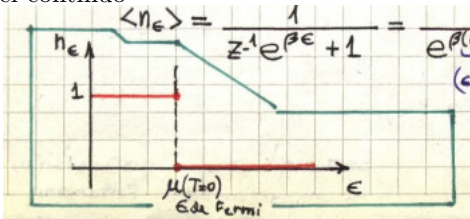
A $T = 0$ tenemos presión y energía no nulas; las partículas no se acomodan todas en un único nivel energético (exclusión de Pauli). Para $T \approx 0$ (T bajas) el escalón en estados apenas se desdibuja



En relación a esto último tenía el límite $T \rightarrow 0$ para la densidad de estados,

$$\langle n_e \rangle = \frac{1}{z^{-1} e^{\beta e} + 1} = \frac{1}{e^{\beta(e-\mu)} + 1} \quad T \rightarrow 0 \quad \begin{cases} 1 & e < \mu(T=0) \\ 0 & e > \mu(T=0) \end{cases}$$

y vemos que la cosa depende del signo de $(e - \mu)$ y $\sum_e \langle n_e \rangle = N$, pero en el continuo



$$\sum_e \langle n_e \rangle = N \quad \longrightarrow \quad \int_0^\infty g(e) n_e de = N$$

pero si tenemos el valor de la energía de Fermi basta integrar hasta allí,

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

donde $de g(e)$ dependerá de la relación entre E y p y la dimensión del problema.

Podemos definir una presión y energía de Fermi así

$$e_F = \frac{p_f^2}{2m} \quad e_F = kT_F$$

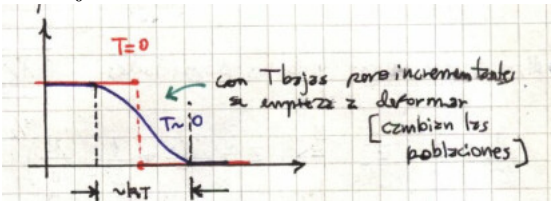
con un gas que tiene $T < T_F$ es un gas altamente degenerado y será

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

Ahora bien, si las partículas tienen spin entonces es $g = 2$ de modo que

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

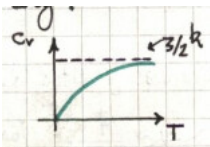
en este caso será más chica la energía de Fermi. Veamos qué pasa a temperaturas bajas con C_V y U . Para los números de ocupación se tiene el gráfico bajo estas líneas



Luego será

$$U = \sum_e e n_e = \frac{3}{5} N e_F \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{e_F} \right)^2 + \dots \right]$$

y entonces tendremos



Para la presión es $P(T = 0) = 2/3 U(T = 0)/V$ pero como $U = 3/5 N e_F$, hay presión porque al ser fermiones igualmente hay cierta repulsión: la visión clásica de $T = 0$ con partículas quietas no es apropiada.

El número de partículas excitados puede venir de $\sim N kT/e_F$ entonces estando relacionado con al análogo del kT . El Pathria comenta esto en pag. 199.

EJEMPLO 0.1 Problema 4

Gas de electrones 2D. Altamente degenerado, entonces la temperatura está en $0 < T \ll T_C$. Se puede partir desde

$$\langle E \rangle = PA$$

y vemos que vale en general para D dimensiones

$$PL^D = \frac{2}{D} \langle E \rangle$$

y luego

$$\frac{PA}{kT} = \log Z_{GC} = 2 \sum_p \log(1 + z e^{-\beta e_P})$$

donde el primer dos está asociado al spin. En el paso al continuo resulta

$$\frac{PA}{kT} = \frac{2A}{h^3} \int 2\pi dp \log(1 + z e^{-\beta e_P})$$

o bien

$$\frac{4\pi Am}{h^2} \left(e \log(1 + z e^{-\beta e_P}) \Big|_0^\infty + \beta \int \frac{e de}{e^{\beta(e-\mu)} + 1} \right)$$

donde se ve que el primer término desaparece y entonces si es $T = 0$ basta integrar hasta la energía de Fermi y con $T \sim 0$ hay que usar el lema de Sommerfeld, en cuyo caso tenemos

$$\frac{4\pi Am}{h^2} \left(\frac{\beta \mu^2}{2} + \frac{\pi^2}{6\beta} \right)$$

de manera que finalmente

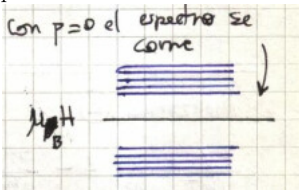
$$\langle E \rangle = \frac{4\pi Am \mu^2}{2h^2} \left(1 + \frac{\pi^2}{3\mu^2} (kT)^2 \right).$$

EJEMPLO 0.2 Problema 5

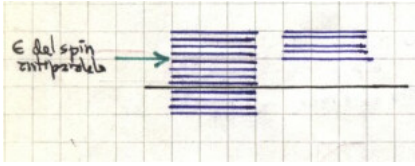
Tenemos electrones en presencia de un campo \mathbf{H} . El spin interactuará con el campo y será

$$\frac{p^2}{2m} + s \mu_B H$$

donde $s = -1$ implica que el spin está paralelo al campo y $s = +1$ implica que está antiparalelo



A una temperatura $T = 0$ el estado minimiza $F = U - TS$ de manera que $F = U$ pero para $T \sim 0$ el estado minimizará con un compromiso entre U y S por las combinaciones posibles



La $e_F = \mu_B H$ para que todos se hallen paralelos al campo. De aquí surge una relación entre la densidad y la energía. Entonces

$$n_+ = \frac{1}{e^{\beta(p^2/(2m) + s\mu_B H - \mu)} + 1} \quad n_- = \frac{1}{e^{\beta(p^2/(2m) - s\mu_B H - \mu)} + 1}$$

e integrando llevo a $N_+ + N_- = N$. Serán $M = \mu_B(N_+ - N_-)$ y luego será

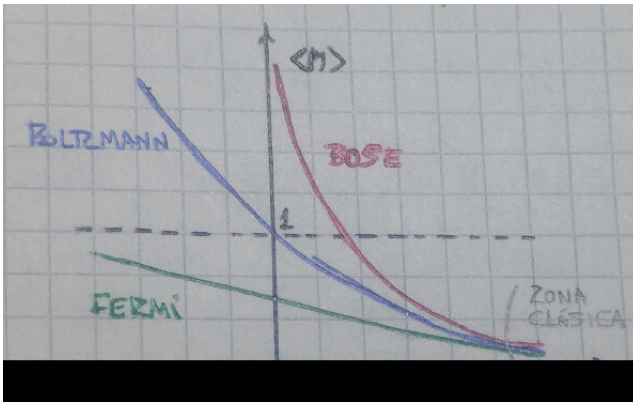
$$\chi = \lim_{H \rightarrow 0} \left(\frac{M}{H} \right)$$

si este límite es positivo tendremos paramagnetismo, magnetización proveniente del acople entre el campo y el spin mientras que si es negativo tendremos diamagnetismo, magnetización proveniente del acople del momento angular orbital con el campo.

Comentario suelto: metal se puede pensar como un sólido elástico más un gas de electrones. Un fonon es una excitación en la red.

1.1 Cuánticos III –reubicar–

1.1.1 Los números de ocupación



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 $\beta(e - \mu) = 0$

1.1.2 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.

1.1.3 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 $T \rightarrow 0$)

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

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

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

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

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

Estoy ya lo grafiqué antes. Hay que consolidar todo este material.

1.1.4 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

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

1.1.5 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 $E + dE$,

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

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

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

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

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

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

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

1.1.6 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

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

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

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

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

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 .

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 $(\beta e_F)^{-2}$

1.1.7 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

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

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

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

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

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

1.2 Estudio de un metal – título tentativo –

1.2.1 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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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.

Dibujó

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

1.2.2 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,

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

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

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

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

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

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

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

Usando la aproximación de Debye es
DIBUJO

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

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

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.

1.2.3 Gas de electrones en metales

Consideramos bajas temperaturas y altas densidades

$$\frac{\lambda^3}{v} \gg 1 \quad \text{CASO DEGENERADO}$$

$$\frac{\lambda^3}{v} = f_{3/2}(z) \quad \text{con } z \gg 1 (T = 0)$$

Usamos aproximación de Sommerfeld (1928)

$$\frac{\lambda^3}{v} = \frac{4}{3\pi^{1/2}} [\log(x)]^{3/2} \quad \text{a orden cero}$$

$$\frac{h^3}{v(2\pi mkT)^{3/2}} = \frac{4}{3\pi^{1/2}} \left(\frac{e_F}{kT} \right)^{3/2}$$

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

$$e_F = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{32^3 \pi^2}{4v} \right)^{2/3} = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{6\pi^2}{v} \right)^{2/3}$$

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

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

DIBUJO

$$\frac{1}{e^{\frac{e-\mu(T)}{kT}} + 1}$$

Sea un δe

$$n_e = \frac{1}{e^{(e_F + \delta e - e_F + (\pi^2/12)(T'/T_F)^2 e_F)/(kT')} + 1} = \frac{1}{e^{\frac{\delta e}{kT'} + (\pi^2/12)(T'/T_F)} + 1}$$

Usamos que

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

y como $\pi^2/12 \sim 1$ se tiene $e^{\delta e/(kT') + kT'/(kT_F)}$

Si $kT' \ll kT_F$ entonces se tiene

$$\frac{1}{e^{\delta e/(kT')} + 1}$$

lo cual 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,

$$T_{\text{AMB}} \ll T_F$$

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

$$C_v = \frac{\pi^2}{2} Nk \left(\frac{T}{T_F} \right) \quad \text{Gas de Fermi}$$

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

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

1.2.4 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.

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

$$R = \sum_{e_i} \frac{n_i p_z}{Vm} \quad \frac{V \delta |p|}{h^3} = 1$$

$$R = \int_{(2mW)^{1/2}}^{\infty} dp_z \int_0^{\infty} dp_x \int_0^{\infty} dp_y \frac{1}{e^{[p^2/(2m)-\mu]/(kT)} + 1} \left(\frac{p_z}{m}\right) \frac{1}{h^3}$$

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

$$\frac{2\pi}{h^3} \int_{(2mW)^{1/2}}^{\infty} dp_z \left(\frac{p_z}{m}\right) \int_0^{\infty} \frac{p'}{e^{[p_z^2/(2m)+p'^2/(2m)-\mu]/(kT)} + 1} dp'$$

y con un cambio de variables $\xi = p'^2/(2mkT)$

$$\frac{2\pi}{h^3} \int_{(2mW)^{1/2}}^{\infty} dp_z 2p_z \int_0^{\infty} \frac{kT}{e^{p_z^2/(2mkT)} e^{\xi} e^{-\mu/(kT)} + 1} d\xi$$

$$\frac{4\pi kT}{h^3} \int_{(2mW)^{1/2}}^{\infty} dp_z p_z \log(1 + e^{[-p_z^2/(2m)+\mu]/(kT)})$$

a T altas resulta

$$R = \frac{4\pi kT}{h^3} \int_{(2mW)^{1/2}}^{\infty} dp_z p_z e^{[-p_z^2/(2m)+\mu]/(kT)}$$

y con otro cambio de variables $p_z^2/(2mkT) = e$

$$R = kT \int_{W/(kT)}^{\infty} 2mde e^{-e} e^{\mu/(kT)}$$

$$R = \frac{4\pi kT}{h^3} 2mkT e^{\mu/(kT)} e^{-W/(kT)} = \frac{8\pi m(kT)^2}{h^3} e^{(\mu-W)/kT}$$

a T bajas también es

$$\log(1 + e^{(\mu-p_z^2/sm)/kT}) \approx e^{[\mu-p_z^2/2m]/(kT)}$$

con lo cual la integral da lo mismo

$$R = \frac{8\pi m(kT)^2}{h^3} e^{(\mu-W)/kT} e^{-W/(kT)}$$

pero aquí

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

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