

3 Gas ideal de Fermi-Dirac

Los fermiones son partículas de spin semi-entero. Supongamos el caso mas simple de spin 1/2, esto es, partículas para las cuales $S_z = \pm\hbar/2$, estados que vamos a denotar por $\sigma = \uparrow, \downarrow$. Denotemos por l a cada estado asociado a los números cuánticos $l = (\mathbf{p}, \sigma)$. Para partículas en una caja a potencial cero, la energía no depende de σ . Así, cada estado $\varepsilon_{\mathbf{p}}$ podrá alojar hasta dos partículas con spines opuestos, sin violar el principio de exclusión. De esta manera, la función gran partición (42) para el gas ideal de Fermi-Dirac puede escribirse como

$$\mathcal{Z}_{FD}(T, V, \mu) = \prod_{\mathbf{p}} \left(\sum_{n_{\mathbf{p}, \uparrow}=0}^1 e^{-\beta n_{\mathbf{p}, \uparrow}(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu)} \sum_{n_{\mathbf{p}, \downarrow}=0}^1 e^{-\beta n_{\mathbf{p}, \downarrow}(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu)} \right) = \prod_{\mathbf{p}} \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu)} \right)^2 \quad (160)$$

Para un gas de fermiones de spin s genérico, la potencia 2 de la expresión anterior se reemplaza por la degeneración $g = 2s + 1$. Así

$$\mathcal{Z}_{FD}(T, V, \mu) = \prod_{\mathbf{p}} \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu)} \right)^g \quad (161)$$

El potencial gran canónico resulta entonces

$$\Omega_{FD}(T, V, \mu) = -k_B T \ln \mathcal{Z}_{FD}(T, V, \mu) = -k_B T g \sum_{\mathbf{p}} \ln \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu)} \right) \quad (162)$$

de donde podemos calcular

$$\langle N \rangle = - \left(\frac{\partial \Omega_{FD}}{\partial \mu} \right)_{T, V} = \sum_{\mathbf{p}} \left(\frac{g e^{-\beta(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu)}}{1 + e^{-\beta(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu)}} \right) = \sum_{\mathbf{p}} \left(\frac{g}{e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu)} + 1} \right) = \sum_{\mathbf{p}} \langle n_{\mathbf{p}} \rangle \quad (163)$$

de donde

$$\langle n_{\mathbf{p}} \rangle = \left(\frac{g}{e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu)} + 1} \right) = \left(\frac{gz}{e^{\beta\varepsilon_{\mathbf{p}}} + z} \right) \quad (164)$$

Para el gas ideal de Fermi-Dirac el número medio de partículas nunca es divergente. El potencial químico puede tomar cualquier valor $-\infty < \mu < \infty$ y por lo tanto $0 \leq z < \infty$. Calculemos las funciones termodinámicas. Reemplazando las sumas por integrales en el límite termodinámico tenemos

$$P = -\frac{\Omega_{FD}}{V} = \frac{4\pi k_B T g}{(2\pi\hbar^2)^3} \int_0^\infty p^2 \ln(1 + z e^{-\beta p^2/2m}) dp \quad (165)$$

$$\langle N \rangle = \frac{4\pi V g}{(2\pi\hbar^2)^3} \int_0^\infty p^2 \left(\frac{z}{e^{\beta p^2/2m} + z} \right) dp \quad (166)$$

Haciendo el cambio de variable usual $x = p\sqrt{\beta/2m}$ tenemos que

$$P = -\frac{\Omega_{FD}}{V} = \frac{k_B T g}{\lambda_T^3} f_{5/2}(z) \quad (167)$$

$$\langle N \rangle = \frac{gV}{\lambda_T^3} f_{3/2}(z) \quad (168)$$

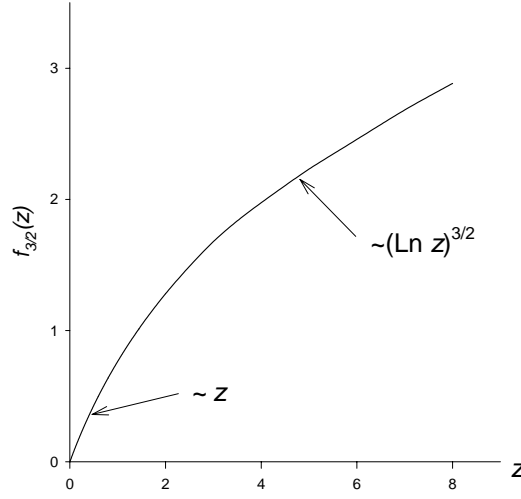


Figura 10: Funcion $f_{3/2}(z)$.

donde

$$f_{5/2}(z) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty x^2 \ln [1 + ze^{-x^2}] dx = \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k+1} \frac{z^k}{k^{5/2}} \quad (169)$$

$$f_{3/2}(z) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty x^2 \left(\frac{z}{e^{x^2} + z} \right) dx = \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k+1} \frac{z^k}{k^{3/2}} \quad (170)$$

La funcion $f_{3/2}$ se muestra en la Fig.10.

Las ecuaciones de estado del gas de Fermi-Dirac se determinan eliminando z en función de ρ y T de la ecuación:

$$\lambda_T^3 \rho = g f_{3/2}(z) \quad (171)$$

Los distintos comportamientos de interés ocurren para valores de $z \ll 1$ y $z \gg 1$. Para valores pequeños de z tenemos del desarrollo en serie (170)

$$f_{3/2}(z) = z - \frac{z^2}{2^{3/2}} + \dots \quad (172)$$

Para valores grandes de z podemos obtener un desarrollo asintótico de la siguiente manera. Llamemos

$$\nu \equiv \beta\mu = \ln z.$$

Entonces, usando el cambio de variable $y = x^2$,

$$f_{3/2}(z) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty x^2 \left(\frac{1}{e^{x^2-\nu} + 1} \right) dx = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \sqrt{y} \left(\frac{1}{e^{y-\nu} + 1} \right) dy = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{y^{3/2} e^{y-\nu}}{(e^{y-\nu} + 1)^2} dy \quad (173)$$

donde en el último paso hemos integrado por partes. La función

$$\frac{e^{y-\nu}}{(e^{y-\nu} + 1)^2}$$

tiene un pico simétrico en $y = \nu$ y decae rápidamente para valores de $y \neq \nu$. Así, podemos desarrollar $y^{3/2}$ en serie de Taylor alrededor de $y = \nu$:

$$f_{3/2}(z) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dy \frac{e^{y-\nu}}{(e^{y-\nu} + 1)^2} \left[\nu^{3/2} + \frac{3}{2} \nu^{1/2} (y - \nu) + \frac{3}{8} \nu^{-1/2} (y - \nu)^2 + \dots \right] \quad (174)$$

$$= \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_{-\nu}^\infty dt \frac{e^t}{(e^t + 1)^2} \left[\nu^{3/2} + \frac{3}{2} \nu^{1/2} t + \frac{3}{8} \nu^{-1/2} t^2 + \dots \right] \quad (175)$$

Escribimos entonces

$$\int_{-\nu}^\infty = \int_{-\infty}^\infty - \int_{-\infty}^{-\nu}$$

La segunda integral es de orden $e^{-\nu}$. Así

$$f_{3/2}(z) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^\infty dt \frac{e^t}{(e^t + 1)^2} \left[\nu^{3/2} + \frac{3}{2} \nu^{1/2} t + \frac{3}{8} \nu^{-1/2} t^2 + \dots \right] + \mathcal{O}(e^{-\nu}) \quad (176)$$

$$= \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left(I_0 \nu^{3/2} + \frac{3}{2} I_1 \nu^{1/2} + \frac{3}{8} I_2 \nu^{-1/2} + \dots \right) + \mathcal{O}(e^{-\nu}) \quad (177)$$

donde

$$I_n \equiv \int_{-\infty}^\infty dt \frac{t^n e^t}{(e^t + 1)^2} \quad (178)$$

El término

$$\frac{e^t}{(e^t + 1)^2}$$

es una función par de t . Así, para n impar tenemos que $I_n = 0$. Para $n = 0$ tenemos

$$I_0 = -2 \int_0^\infty dt \frac{d}{dt} \frac{1}{(e^t + 1)} = 1. \quad (179)$$

Para $n > 0$ par tenemos

$$I_n = -2 \left[\frac{\partial}{\partial \lambda} \int_0^\infty dt \frac{t^{n-1}}{(e^{\lambda t} + 1)} \right]_{\lambda=1} = -2 \left[\frac{\partial}{\partial \lambda} \lambda^{-n} \right]_{\lambda=1} \int_0^\infty du \frac{u^{n-1}}{(e^u + 1)} \quad (180)$$

$$= 2n \int_0^\infty du \frac{u^{n-1}}{(e^u + 1)} = (n-1)!(2n)(1 - 2^{1-n})\zeta(n) \quad (181)$$

donde $\zeta(n)$ es la función zeta de Riemann ($\zeta(2) = \pi^2/6$, $\zeta(4) = \pi^4/90$, $\zeta(6) = \pi^6/945$). Por lo tanto

$$f_{3/2}(z) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left[(\ln z)^{3/2} + \frac{\pi^2}{8} (\ln z)^{-1/2} + \dots \right] + \mathcal{O}(z^{-1}) \quad (182)$$

$$= \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left[\left(\frac{\mu}{k_B T} \right)^{3/2} + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{\mu}{k_B T} \right)^{-1/2} + \dots \right] + \mathcal{O}(e^{-\beta\mu}) \quad (183)$$

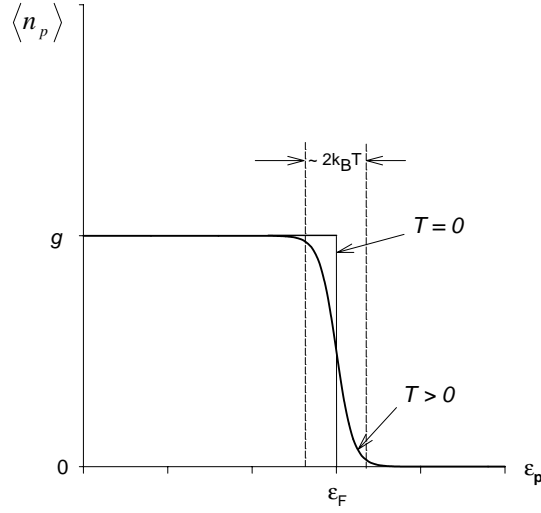


Figura 11: Valor medio de los números de ocupación.

3.0.3 Bajas temperaturas/Altas densidades ($\lambda_T^3/v \gg 1$)

Este es el régimen en el cual los efectos cuánticos, en particular el principio de exclusión de Pauli, se vuelven relevantes. A bajas temperaturas tendremos que

$$\frac{\lambda_T^3 \rho}{g} = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left[\left(\frac{\mu}{k_B T} \right)^{3/2} + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{\mu}{k_B T} \right)^{-1/2} \right] + \mathcal{O} \left[\left(\frac{T}{\mu} \right)^{3/2} \right] \quad (184)$$

y recordemos que

$$\lambda_T \equiv \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T} \right)^{1/2}.$$

Vemos que cuando $T \rightarrow 0$ el potencial químico tiende a un valor constante $\mu = \epsilon_F$, que define la **energía de Fermi**:

$$\epsilon_F \equiv \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{6\pi^2}{g} \rho \right)^{2/3} \quad (185)$$

Para entender el significado físico de ϵ_F examinemos $\langle n_p \rangle$ en las cercanías del cero absoluto:

$$\langle n_p \rangle \approx \frac{g}{e^{\beta(\epsilon_p - \epsilon_F)} + 1} \quad (186)$$

En el límite $T \rightarrow 0$ ($\beta \rightarrow \infty$) la exponencial en el denominador diverge para todo valor $\epsilon_p > \epsilon_F$ y se anula para todo valor $\epsilon_p < \epsilon_F$. Así, tenemos que

$$\langle n_p \rangle_{T=0} = \begin{cases} g & (\epsilon_p < \epsilon_F) \\ 0 & (\epsilon_p > \epsilon_F) \end{cases} \quad (187)$$

El significado físico de esta expresión es claro. El principio de exclusión de Pauli no permite mas de g partículas en cada autoestado de \mathbf{p} . En el estado fundamental del gas las partículas ocupan los estados

de menor energía posible, y por lo tanto van llenando los niveles inferiores hasta alcanzar un valor finito ε_F . Así ε_F es simplemente el menor autoestado de energía por debajo del cual hay $\langle N \rangle_{T=0}/g$ niveles. En el espacio de los momentos las partículas ocupan una esfera de radio $p_F = \sqrt{2m\varepsilon_F}$, llamado **momento de Fermi**, cuya superficie se denomina **superficie de Fermi**. Con esta interpretación podemos calcular directamente la energía de Fermi, sin tomar ningún límite. Cada estado en el espacio de momentos ocupa un volumen $(2\pi\hbar)^3/V$. Así una esfera de radio p_F contendrá

$$\frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \frac{4}{3} \pi p_F^3 = \frac{\langle N \rangle}{g}$$

estados, de donde recuperamos la expresión (185). A temperaturas suficientemente bajas $\langle n_{\mathbf{p}} \rangle$ tiene el comportamiento que se muestra en la Fig.11. Únicamente una pequeña fracción de las partículas con energías del orden de $k_B T$ por debajo de ε_F son excitadas por encima de ε_F , mientras que las restantes permanecen con sus energías fijas. Por lo tanto únicamente las partículas con energías en torno a ε_F podrán alterar su estado ante una perturbación externa, como por ejemplo un campo eléctrico.

Para obtener las funciones termodinámicas del gas a bajas temperaturas tenemos que considerar el siguiente término en el desarrollo (184), el cual puede escribirse como

$$\varepsilon_F^{3/2} = \mu^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{k_B T}{\mu} \right)^2 \right] = \mu^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F} \right)^2 \left(\frac{\varepsilon_F}{\mu} \right)^2 \right] = \mu^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F} \right)^2 \right] + \mathcal{O} \left[\left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F} \right)^4 \right] \quad (188)$$

$$\frac{\mu}{\varepsilon_F} \approx \frac{1}{\left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F} \right)^2 \right]^{2/3}} = 1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F} \right)^2 + \dots \quad (189)$$

$$\mu = \frac{\nu}{\beta} = \varepsilon_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F} \right)^2 + \dots \right] \quad (190)$$

El parámetro de la expansión es $k_B T/\varepsilon_F$. Si definimos la **temperatura de Fermi** como

$$k_B T_F \equiv \varepsilon_F \quad (191)$$

entonces bajas temperaturas y altas densidades significa que $T \ll T_F$. En este dominio se dice que el gas se encuentra *degenerado*, dado que todas las partículas tienden a estar en el estado de menor energía posible.

La energía interna viene dada por

$$U = \sum_{\mathbf{p}} \langle n_{\mathbf{p}} \rangle \varepsilon_{\mathbf{p}} = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \frac{2\pi}{m} \int_0^\infty p^4 \langle n_{\mathbf{p}} \rangle dp \quad (192)$$

Integrando por partes

$$U = \frac{V}{4\pi^2 \hbar^3 m} \int_0^\infty \frac{p^5}{5} \left(-\frac{\partial}{\partial p} \langle n_{\mathbf{p}} \rangle \right) dp = \frac{V \beta g}{20\pi^2 \hbar^3 m^2} \int_0^\infty p^6 \frac{e^{\beta \varepsilon_{\mathbf{p}} - \nu}}{(e^{\beta \varepsilon_{\mathbf{p}} - \nu} + 1)^2} dp \quad (193)$$

Usando el cambio de variable $y = \beta p^2/2m$ obtenemos

$$U = \frac{Vg}{20\pi^2 \hbar^3 m} (2mk_B T)^{5/2} \int_0^\infty y^{5/2} \frac{e^{y-\nu}}{(e^{y-\nu} + 1)^2} dy \quad (194)$$

Siguiendo el mismo procedimiento que usamos para obtener el desarrollo de $f_{3/2}$, desarrollamos $y^{5/2}$ en serie de Taylor alrededor de $y = \nu$:

$$U = \frac{Vg}{20\pi^2\hbar^3m}(2mk_BT)^{5/2} \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{e^t}{(e^t+1)^2} \left[\nu^{5/2} + \frac{5}{2}\nu^{3/2}t + \frac{15}{8}\nu^{1/2}t^2 + \dots \right] \quad (195)$$

$$= \frac{Vg}{20\pi^2\hbar^3m}(2mk_BT)^{5/2} \left[\nu^{5/2} + \frac{5}{8}\pi^2\nu^{1/2} + \dots \right] \quad (196)$$

Reemplazando la expresión (190) para ν y conservando términos hasta orden cuadrático en k_BT/ε_F tenemos

$$U = \frac{Vg}{20\pi^2\hbar^3m}(2m\varepsilon_F)^{5/2} \left[\left(1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_BT}{\varepsilon_F} \right)^2 \right)^{5/2} + \frac{5}{12}\pi^2 \left(\frac{k_BT}{\varepsilon_F} \right)^2 + \dots \right] \quad (197)$$

$$= \frac{3}{5} \langle N \rangle \varepsilon_F \left[1 + \frac{5}{12}\pi^2 \left(\frac{k_BT}{\varepsilon_F} \right)^2 + \dots \right] \quad (198)$$

De esta última expresión podemos calcular la forma asintótica del calor específico a bajas temperaturas:

$$C_v = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{V, \langle N \rangle} = \frac{\rho\pi^2}{2} \frac{k_B^2 T}{\varepsilon_F} + \dots \quad (199)$$

Vemos que el calor específico tiende a cero linealmente cuando $T \rightarrow 0$ y por lo tanto satisface la tercera ley de la termodinámica.

Finalmente, integrando por partes dos veces la Ec.(169) obtenemos para $f_{5/2}(z)$ la expresión:

$$f_{5/2}(z) = \frac{8}{15\pi} \int_0^\infty y^{5/2} \frac{e^{y-\nu}}{(e^{y-\nu}+1)^2} dy \quad (200)$$

de donde usando el mismo procedimiento que anteriormente llegamos a la expresión

$$P = \frac{2}{5}\rho\varepsilon_F \left[1 + \frac{5}{12}\pi^2 \left(\frac{k_BT}{\varepsilon_F} \right)^2 + \dots \right] = \frac{2}{3} \frac{U}{V} \quad (201)$$

Esto nos muestra que aún a $T = 0$ se necesitan paredes externas para contener un gas ideal de Fermi, ya que la presión no se anula (a diferencia del gas ideal clásico y el gas de Bose). Esta es una manifestación del principio de exclusión de Pauli, que solo permite un número g de partículas con momento cero. Todas las restantes partículas tienen momento finito y dan lugar a la presión del punto cero.

3.0.4 Altas temperaturas/Bajas densidades ($\lambda_T^3/v \ll 1$)

Usando el desarrollo (172) en la Ec.(171) tenemos

$$\frac{\lambda_T^3}{gv} = z - \frac{z^2}{2^{3/2}} + \dots \quad (202)$$

Esta ecuación puede invertirse desarrollando z en una serie de potencias en λ_T^3/v ; reemplazando en la ecuación anterior y comparando iguales potencias se obtiene que:

$$z = \frac{\lambda_T^3}{gv} + \frac{1}{2^{3/2}} \left(\frac{\lambda_T^3}{gv} \right)^2 + \dots \quad (203)$$

Para partículas sin spin $g = 1$, el primer término de esta ecuación nos da la ecuación de estado correspondiente para el gas de Maxwell-Boltzmann (56).

Tenemos ademas de la Ec.(167)

$$\frac{P}{k_B T} = \frac{g}{\lambda_T^3} \left(z - \frac{z^2}{2^{5/2}} + \dots \right) = \frac{gz}{\lambda_T^3} \left(1 - \frac{z}{2^{5/2}} + \dots \right) \quad (204)$$

y usando la Ec.(203) tenemos

$$\frac{Pv}{k_B T} = 1 + \frac{1}{2^{5/2}} \frac{\lambda_T^3}{gv} + \dots \quad (205)$$

Esto es, tenemos la ecuación de estado del gas ideal mas correcciones. Vemos asi que el gas de Fermi-Dirac se comporta tambien como el gas de Maxwell-Boltzmann a altas temperaturas y bajas densidades, tal como fue anticipado.