

Física Teórica 3 – 1er. cuatrimestre de 2014

Algunos problemas resueltos de la Guía 6 (2da. parte)

Problema 4 . . . . .	1
Problema 7 . . . . .	6
Problema 8 . . . . .	10

**Problema 4**

Para un gas ideal de  $N$  electrones en un volumen  $V$ :

- (a) Calcular la energía de Fermi.
- (b) Calcular la energía total  $U$  a  $T = 0$ .
- (c) Muestre que para cualquier temperatura se cumple  $U = 3PV/2$ . Usando esta relación y lo hallado en (b), encuentre una expresión para la presión  $P$  a  $T = 0$ .

■ **Solución.** A modo de repaso, deduciremos las ecuaciones fundamentales y luego resolveremos lo que pide el problema. Todo empieza con la función de partición en el ensamble gran canónico para fermiones:

$$Z = \prod_i \sum_{n=0}^1 z^n e^{-n\beta\epsilon_i} = \prod_i (1 + ze^{-\beta\epsilon_i}).$$

La productoria es sobre todos los estados de un sola partícula. En el caso de un gas ideal, esos estados estarán caracterizados por cierto valor del impulso y un dado número de variables asociadas a los grados de libertad internos, como el espín. Supongamos para fijar ideas que hay un único grado de libertad interno, caracterizado por una variable discreta  $s$  que puede tomar  $g$  valores. Entonces

$$Z = \prod_{\mathbf{p},s} [1 + ze^{-\beta\epsilon_s(\mathbf{p})}].$$

Si la energía no depende de  $s$ , para cada valor de  $\mathbf{p}$  habrá  $g$  factores idénticos,

$$Z = \prod_{\mathbf{p}} [1 + ze^{-\beta\epsilon(\mathbf{p})}]^g.$$

En el caso general el logaritmo de  $Z$  queda en términos de una suma

$$\log Z = \sum_{s=1}^g \sum_{\mathbf{p}} \log [1 + ze^{-\beta\epsilon_s(\mathbf{p})}].$$

Al hacer tender  $V$  a infinito, la suma sobre  $\mathbf{p}$  puede reemplazarse por una integral. Hay varias maneras de plantearlo, pero el resultado termina siendo el que se ha usado ya para gases ideales clásicos,

$$\sum_{\mathbf{p}} \rightarrow V \int \frac{d^3p}{h^3}.$$

Entonces queda

$$\log Z = \frac{V}{h^3} \sum_{s=1}^g \int d^3p \log [1 + ze^{-\beta\epsilon_s(\mathbf{p})}].$$

Si la energía no depende de  $s$ , resulta

$$\log Z = \frac{gV}{h^3} \int d^3p \log [1 + ze^{-\beta\epsilon(\mathbf{p})}]. \quad (1)$$

El número de partículas y la energía se calculan a partir de las derivadas del logaritmo de  $Z$ ,

$$N = z \frac{\partial \log Z}{\partial z} = \frac{V}{h^3} \sum_{s=1}^g \int d^3p \frac{1}{1 + \exp \{\beta [\epsilon_s(\mathbf{p}) - \mu]\}},$$

$$U = -\frac{\partial \log Z}{\partial \beta} = \frac{V}{h^3} \sum_{s=1}^g \int d^3p \frac{\epsilon_s(\mathbf{p})}{1 + \exp \{\beta [\epsilon_s(\mathbf{p}) - \mu]\}}.$$

Por otro lado, si en la Ec. (1) se integra por partes, usando la relación

$$\int d^3p f(\mathbf{p}) = \frac{1}{3} \int d^3p [\nabla \cdot (f\mathbf{p}) - \mathbf{p} \cdot \nabla f],$$

y descartando el término de superficie, resulta

$$\log Z = \frac{\beta V}{3h^3} \sum_{s=1}^g \int d^3p \frac{\mathbf{p} \cdot \nabla \epsilon_s(\mathbf{p})}{1 + \exp \{\beta [\epsilon_s(\mathbf{p}) - \mu]\}}.$$

Un conjunto de resultados interesantes se obtienen si  $\epsilon_s(\mathbf{p}) = \alpha_s p^w$ . Por ejemplo,

$$\log Z = \frac{\beta V}{3h^3} \sum_{s=1}^g \int d^3p \frac{w\epsilon_s(\mathbf{p})}{1 + \exp \{\beta [\epsilon_s(\mathbf{p}) - \mu]\}} = \frac{w\beta U}{3}.$$

Pero puesto que  $\log Z = \beta PV$ , se obtiene

$$PV = \frac{wU}{3}.$$

Así, por ejemplo, para un gas de partículas no relativistas  $\epsilon_s(\mathbf{p}) = p^2/(2m)$  y

$$PV = \frac{2U}{3}.$$

En cambio, para partículas ultrarrelativistas  $\epsilon_s(\mathbf{p}) = cp$  y

$$PV = \frac{U}{3}.$$

Éstas son las mismas relaciones que valen para un gas de partículas clásicas. Es inmediato generalizar a  $d$  dimensiones. Para  $\epsilon_s(\mathbf{p}) = \alpha_s p^w$  queda

$$PV = \frac{wU}{d}, \quad (2)$$

donde

$$U = \frac{V}{h^d} \sum_{s=1}^g \int d^d p \frac{\epsilon_s(\mathbf{p})}{1 + \exp \{ \beta [\epsilon_s(\mathbf{p}) - \mu] \}}.$$

Volviendo al problema de la guía. Para hacerlo más interesante dejemos sin especificar la dimensión  $d$  del espacio. La energía de Fermi es el potencial químico a  $T = 0$ . En general, el potencial químico se calcula en términos de  $N/V$  y  $T$  a partir de la ecuación que da el número medio de partículas,

$$N = \frac{gV}{h^d} \int d^d p \frac{1}{1 + \exp \{ \beta [\epsilon(\mathbf{p}) - \mu] \}}.$$

Aquí hemos supuesto que la energía no depende de los grados de libertad internos, por eso aparece el factor  $g$ . A temperatura igual a cero, el integrando toma la forma de un escalón,

$$\frac{1}{1 + \exp \{ \beta [\epsilon(\mathbf{p}) - \mu] \}} \rightarrow \Theta [\epsilon_F - \epsilon(\mathbf{p})].$$

Si la energía depende sólo del módulo del impulso la integración puede hacerse en esféricas, integrando explícitamente sobre las variables angulares. La integral sobre el módulo de  $\mathbf{p}$  está acotada por la condición

$$\epsilon(p) < \epsilon_F.$$

Se define  $p_F$  como el impulso tal que  $\epsilon(p_F) = \epsilon_F$ . Con esto resulta

$$\frac{N}{V} = \frac{g\Omega_d}{h^d} \int_0^{p_F} dp p^{d-1} = \frac{g\Omega_d}{h^d d} p_F^d. \quad (3)$$

Supongamos en particular que  $\epsilon(p) = \alpha p^w$ , lo que incluye los casos clásico y ultrarrelativista. La relación entre  $p_F$  y  $\epsilon_F$  es simplemente

$$p_F = \left( \frac{\epsilon_F}{\alpha} \right)^{1/w}.$$

Así podemos despejar  $\epsilon_F$  a partir de la Ec. (3):

$$\epsilon_F = \alpha h^w \left( \frac{dN}{g\Omega_d V} \right)^{w/d}.$$

En el caso clásico  $\alpha = (2m)^{-1}$  y  $w = 2$ ; entonces

$$\epsilon_F = \frac{h^2}{2m} \left( \frac{dN}{g\Omega_d V} \right)^{2/d}.$$

En particular, en 2 y 3 dimensiones para partículas de espín 1/2 ( $g = 2$ ) resulta

$$\epsilon_F^{(3D)} = \frac{h^2}{2m} \left( \frac{3N}{8\pi V} \right)^{2/3}, \quad \epsilon_F^{(2D)} = \frac{h^2}{2m} \frac{N}{2\pi V}.$$

Si los fermiones son ultrarrelativistas es  $\epsilon(\mathbf{p}) = cp$ , y resulta

$$\epsilon_F^{(3D)} = ch \left( \frac{3N}{8\pi V} \right)^{1/3}, \quad \epsilon_F^{(2D)} = ch \left( \frac{N}{2\pi V} \right)^{1/2}.$$

De manera similar se calcula la energía a  $T = 0$ ,

$$\frac{U}{V} = \frac{g\Omega_d V}{h^d} \int_0^{p_F} dp p^{d-1} \epsilon(\mathbf{p}) = \frac{g\Omega_d}{h^d} \frac{\alpha p_F^{d+w}}{(d+w)}.$$

Dividiendo esta ecuación por la Ec. (3) se obtiene un resultado sencillo para la energía por partícula en términos de la energía de Fermi,

$$\frac{U}{N} = \frac{d\alpha p_F^w}{d+w} = \frac{d}{d+w} \epsilon_F.$$

En particular, en 3 dimensiones para el gas no relativista resulta

$$\frac{U}{N} = \frac{3}{5} \epsilon_F.$$

En tanto que para el gas de fermiones ultrarrelativistas queda

$$\frac{U}{N} = \frac{3}{4} \epsilon_F.$$

Mediante la Ec. (2) se puede calcular la presión a  $T = 0$  a partir de la energía,

$$PV = \frac{w}{d+w} N \epsilon_F.$$

Cuando la energía es función únicamente del módulo del impulso (y acaso de los grados de libertad internos) es usual escribir las integrales anteriores cambiando la variable de integración  $p$  por  $\epsilon$ . En particular, cuando uno calcula las cosas en  $T = 0$ , esta sustitución deja todos los resultados ya expresados en términos de la energía de Fermi. Sin embargo no siempre resulta ventajoso hacer el cambio de variables, a veces es menos trabajo seguir haciendo todo en términos del impulso. Uno está interesado en calcular integrales de la forma

$$I = \frac{gV}{h^d} \int d^d p F[\epsilon(p)], \quad (4)$$

donde  $F$  depende de  $p$  a través de la energía. En esta integral  $gV d^d p / h^d$  es igual al número de estados de una sola partícula en el elemento de volumen  $d^d p$ . Aquí estamos suponiendo que la energía no depende de los grados de libertad internos, de ahí que aparezca el factor  $g$ . Puesto que  $F$  depende sólo de la energía, el objetivo es transformar la integral anterior a algo de la forma

$$I = \int d\epsilon D(\epsilon) F(\epsilon),$$

donde ahora  $D(\epsilon)d\epsilon$  representa el número de estados de una sola partícula contenidos en el intervalo de energías  $d\epsilon$ .

La integración angular en (4) se puede hacer de manera inmediata,

$$I = \frac{g\Omega_d V}{h^d} \int_0^\infty dp p^{d-1} F[\epsilon(p)].$$

Supongamos, como antes, que  $\epsilon(p) = \alpha p^w$ , entonces

$$p^{d-1} dp = \frac{1}{d} dp^d = \frac{1}{w\alpha^{\frac{d}{w}}} \epsilon^{\frac{d}{w}-1} d\epsilon.$$

Luego,

$$I = \frac{g\Omega_d V}{w\alpha^{\frac{d}{w}} h^d} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{\frac{d}{w}-1} F(\epsilon) = \int_0^\infty d\epsilon D(\epsilon) F(\epsilon),$$

donde

$$D(\epsilon) = \frac{g\Omega_d V}{w\alpha^{\frac{d}{w}} h^d} \epsilon^{\frac{d}{w}-1}.$$

Por ejemplo, en  $d = 3$  y con  $\epsilon = p^2/2m$ , es

$$D(\epsilon) = \frac{2gV\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \epsilon^{1/2}.$$

Así, por ejemplo, uno puede calcular el número medio de partículas y la energía a  $T = 0$  como

$$\frac{N}{V} = \frac{2g\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \epsilon^{1/2} = \frac{8}{3}\pi(2m)^{3/2} \epsilon_F^{3/2},$$

$$\frac{U}{V} = \frac{2g\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \epsilon^{3/2} = \frac{8}{5}\pi(2m)^{3/2} \epsilon_F^{5/2}.$$

El cociente entre ambas densidades da, igual que antes,

$$\frac{U}{N} = \frac{3}{5} \epsilon_F.$$

Para temperaturas distintas de cero quedan las siguientes integrales

$$\frac{N}{V} = \frac{2g\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{1/2}}{1 + z^{-1}e^{\beta\epsilon}},$$

$$\frac{U}{V} = \frac{2g\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{3/2}}{1 + z^{-1}e^{\beta\epsilon}}.$$

Integrales similares aparecen con frecuencia, así que se definen de un modo convencional como

$$f_\nu(z) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty \frac{x^{\nu-1}}{1 + z^{-1}e^x}. \quad (5)$$

Entonces, por ejemplo,

$$\frac{N}{V} = \frac{2g\pi\Gamma(\frac{3}{2})(2mkT)^{3/2}}{h^3} f_{3/2}(z),$$

$$\frac{U}{V} = \frac{2g\pi\Gamma(\frac{3}{2})(2mkT)^{3/2}}{h^3} kT f_{5/2}(z).$$

En términos de la longitud de onda térmica

$$\lambda = \left( \frac{h^2}{2\pi mkT} \right)^{1/2},$$

y usando que  $\Gamma(\frac{1}{2}) = \pi^{1/2}$ , resulta

$$\frac{N}{V} = \frac{g}{\lambda^3} f_{3/2}(z),$$

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

A partir de la relación  $U = \frac{3}{2}PV$ , combinando las dos ecuaciones anteriores se obtiene

$$PV = NkT \frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}(z)}.$$

## Problema 7

Sea un gas de electrones en dos dimensiones sobre un área  $A$ .

- Halle una expresión para  $PV/kT$  en función de la temperatura y el potencial químico.
- Halle la energía de Fermi en términos del número medio de partículas a temperatura cero.
- Muestre que el potencial químico viene dado, como función de la temperatura, por:

$$\mu(T) = \epsilon_F \left\{ 1 + \frac{1}{\beta\epsilon_F} \ln(1 - e^{-\beta\epsilon_F}) \right\}.$$

- Calcule el calor específico si el gas está altamente degenerado y muestre que es proporcional a  $T$ .

■ **Solución.** (a) Para el primer punto basta con calcular la función de partición,

$$\beta PV = \log Z = \frac{gA}{h^2} \int d^2p \log [1 + ze^{-\beta\epsilon(p)}].$$

La energía es  $\epsilon(p) = p^2/(2m)$ . Esto ya lo hemos calculado de manera general en el problema anterior. Repetimos aquí los pasos fundamentales: primero se escribe la integral en polares y luego se integra por partes respecto del módulo del impulso,

$$\log Z = \frac{gA}{h^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty dp p \log [1 + ze^{-\beta\epsilon(p)}] = \frac{2\pi gA\beta}{h^2} \int_0^\infty dp \frac{p^3}{2m} \frac{ze^{-\beta\epsilon(p)}}{1 + ze^{-\beta\epsilon(p)}}.$$

Es posible formar el diferencial de  $\epsilon$  y cambiar a esa variable. Reordenando un poco los términos queda

$$\log Z = \frac{2\pi g A m \beta}{h^2} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon}{1 + z^{-1} e^{\beta\epsilon}}.$$

Por último, definiendo  $x = \beta\epsilon$ , la dependencia en la temperatura puede hacerse más explícita

$$\log Z = \frac{2\pi g A m k T}{h^2} \int_0^\infty dx \frac{x}{1 + z^{-1} e^x}. \quad (6)$$

Con esto ya puede escribirse la respuesta al primer punto del problema:

$$\beta PV = \frac{2\pi g A m k T}{h^2} \int_0^\infty dx \frac{x}{1 + z^{-1} e^x} = \frac{2\pi g A m k T}{h^2} f_2(z).$$

Las funciones  $f_\nu$  quedaron definidas en la Ec. (5).

(b) A temperatura cero

$$\frac{N}{A} = \frac{2\pi g}{h^2} \int_0^{p_F} dp p = \frac{2\pi g p_F^2}{2h^2} = \frac{2\pi g m \epsilon_F}{h^2} \quad \Rightarrow \quad \epsilon_F = \frac{h^2}{2\pi g m} \frac{N}{A}.$$

(c) Para calcular el potencial químico se parte de la ecuación que da el número de partículas

$$\frac{N}{A} = \frac{g}{h^2} \int d^2 p \frac{1}{1 + z^{-1} e^{-\beta\epsilon(p)}}.$$

La integral puede hacerse de manera explícita en un par de pasos,

$$\begin{aligned} \frac{N}{A} &= \frac{2\pi g m}{h^2} \int_0^\infty d\left(\frac{p^2}{2m}\right) \frac{1}{1 + z^{-1} e^{-\beta\epsilon(p)}} = \frac{2\pi g m}{h^2} \int_0^\infty \frac{d\epsilon}{1 + z^{-1} e^{\beta\epsilon}} \\ &= \frac{N k T z}{A \epsilon_F} \int_0^1 \frac{d(e^{-\beta\epsilon})}{1 + z e^{-\beta\epsilon}} = \frac{N k T}{A \epsilon_F} \log(1 + z). \end{aligned}$$

Entonces

$$\epsilon_F = k T \log(1 + e^{\beta\mu}).$$

Invirtiéndose,

$$\mu = k T \log(e^{\beta\epsilon_F} - 1). \quad (7)$$

Puesto que interesa ver qué tanto se aparta  $\mu$  de la energía de Fermi conviene reescribir la ecuación anterior como

$$\mu = \epsilon_F + k T \log(1 - e^{-\beta\epsilon_F}).$$

A temperaturas mucho menores que la energía de Fermi, la exponencial dentro del logaritmo es un número muy pequeño, por lo tanto resulta

$$\mu \approx \epsilon_F - kT e^{-\beta \epsilon_F}.$$

Es decir, a bajas temperaturas las correcciones al potencial químico respecto de la energía de Fermi son exponencialmente pequeñas. En contraste, en tres dimensiones las correcciones al potencial químico van como  $T^2$ .

(d) Calcularemos el calor específico a área constante,

$$C_A = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_{A,N}.$$

La energía puede obtenerse a partir de  $Z$ , tal como quedó escrita en la Ec. (6),

$$U = -\frac{\partial \log Z}{\partial \beta} = \frac{2\pi g A m (kT)^2}{h^2} \int_0^\infty dx \frac{x}{1 + z^{-1} e^x} = \frac{2\pi g A m (kT)^2}{h^2} f_2(z) = \frac{N (kT)^2}{\epsilon_F} f_2(z). \quad (8)$$

Luego

$$C_A = \frac{2U}{T} + \frac{U}{f_2(z)} f_2'(z) \left( \frac{\partial z}{\partial T} \right)_{A,N}.$$

De acuerdo a la Ec. (7)

$$z = e^{\beta \epsilon_F} - 1,$$

y por lo tanto

$$\left( \frac{\partial z}{\partial T} \right)_{A,N} = -\frac{\epsilon_F e^{\beta \epsilon_F}}{kT^2} = -\frac{1}{T} (1 + z) \log(1 + z).$$

La energía de Fermi es función de la densidad  $N/A$ , de modo que no es necesario derivarla. Por otro lado, no es difícil demostrar que  $f'_\nu = z^{-1} f_{\nu-1}$ , y además

$$f_1(z) = \int_0^\infty \frac{dx}{1 + z^{-1} e^x} = \log(1 + z).$$

Reuniendo todo resulta

$$\begin{aligned} \frac{C_A}{Nk} &= \frac{U}{NkT} \left\{ 2 - \frac{(1+z)}{kT} \frac{[\log(1+z)]^2}{z f_2(z)} \right\} = \frac{kT}{\epsilon_F} \left\{ 2 f_2(z) - \frac{(1+z)}{kT} \frac{[\log(1+z)]^2}{z} \right\} \\ &= \frac{2 f_2(z)}{\log(1+z)} - \frac{(1+z)}{z} \log(1+z). \end{aligned}$$



Se trata de analizar ahora el comportamiento de esta función cuando  $T \rightarrow 0$ , es decir, cuando  $z \rightarrow \infty$ . Las funciones  $f_\nu(e^\xi)$  admiten un desarrollo asintótico para  $\xi \rightarrow \infty$ , de la forma

$$f_\nu(e^\xi) = \frac{\xi^\nu}{\Gamma(\nu + 1)} + \frac{(\nu - 1)}{\Gamma(\nu)} \frac{\pi^2}{6} \xi^{\nu-2} + \mathcal{O}(\xi^{\nu-4}).$$

Aplicando este resultado en la expresión para el calor específico y desarrollando el resto de las funciones que ahí aparecen queda

$$\frac{C_A}{Nk} \approx \frac{\pi^2}{3} \frac{kT}{\mu}.$$

Al escribir esta ecuación se han despreciado varios términos de orden  $e^{-\beta\mu}$ . El propio potencial químico difiere de  $\epsilon_F$  en una cantidad exponencialmente pequeña. Por lo tanto

$$\frac{C_A}{Nk} \approx \frac{\pi^2}{3} \frac{kT}{\epsilon_F}.$$

A este mismo resultado puede llegarse de manera más rápida a partir de la Ec. (8), desarrollando la energía para  $T \rightarrow 0$  antes de hacer el cálculo del calor específico. Así, uno encuentra

$$\frac{U}{Nk} \approx \frac{kT^2}{\epsilon_F} \left[ \frac{(\beta\mu)^2}{2} + \frac{\pi^2}{6} \right] = \frac{\epsilon_F}{2k} + \frac{kT^2\pi^2}{6\epsilon_F}.$$

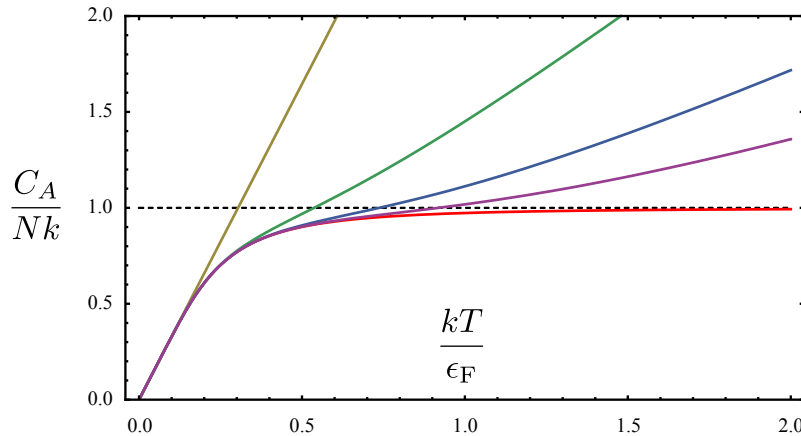
Entonces resulta

$$\frac{C_A}{Nk} \approx \frac{\pi^2 kT}{3\epsilon_F}.$$

No es tremendamente complicado calcular las correcciones exponenciales. Hasta orden  $e^{-2\beta\epsilon_F}$  es

$$\frac{C_A}{Nk} \approx \frac{\pi^2 kT}{3\epsilon_F} - e^{-\beta\epsilon_F} \left( \frac{\epsilon_F}{kT} + 2 + \frac{2kT}{\epsilon_F} \right) - e^{-2\beta\epsilon_F} \left( \frac{\epsilon_F}{kT} + 1 + \frac{kT}{2\epsilon_F} \right).$$

La figura muestra el resultado exacto (en rojo) y las aproximaciones anteriores, con un número creciente de términos. Notar que para altas temperaturas el calor específico tiende a  $Nk$ , de acuerdo al principio de equipartición.



## Problema 8

**Paramagnetismo de Pauli.** Un electrón en un campo magnético  $H$  tiene una energía  $\pm\mu_B H$ , dependiendo de que el espín sea paralelo o antiparalelo al campo. Considere un gas de electrones a temperatura cero. Su interacción mutua y el efecto del campo magnético sobre el movimiento orbital de los electrones puede despreciarse.

- Halle el valor máximo de la densidad  $N/V$  tal que todos los espines sean paralelos entre sí. ¿Cuánto vale la energía del gas en ese caso?
- Ahora suponga como dato una energía de Fermi mayor que  $\mu_B H$ . Halle la magnetización y a partir de ella la susceptibilidad.

■ **Solución.** (a) Supondremos que  $H \geq 0$ . Así, los electrones con espín paralelo al campo tienen una energía adicional  $\mu_B H$  mayor que cero. Los electrones con espín antiparalelo tienen una energía adicional  $-\mu_B H$ , menor que cero. Recordar que el espín del electrón es antiparalelo a su momento magnético, de modo que energéticamente se favorece una alineación antiparalela con el campo externo.

Debido a que ahora la energía depende del espín, conviene volver a la expresión para el logaritmo de la función de partición y escribir

$$\log Z = \sum_{\mathbf{p}} \sum_{s=\{1,-1\}} \log(1 + ze^{-\beta[\epsilon(\mathbf{p})+\epsilon(s)]}) = \sum_{\mathbf{p}} \log(1 + ze^{-\beta[\epsilon(\mathbf{p})+\mu_B H]}) + \sum_{\mathbf{p}} \log(1 + ze^{-\beta[\epsilon(\mathbf{p})-\mu_B H]}).$$

Formalmente es como si hubiera dos sistemas de partículas, unas con espín paralelo al campo y otras con espín antiparalelo. Como los sistemas pueden intercambiar partículas entre sí, tienen la misma fugacidad. Todas las cantidades extensivas que se deducen del logaritmo de la función de partición (incluido este mismo logaritmo) se escribirán como la suma de dos términos, cada uno asociado a una proyección del espín. Por ejemplo, el número de partículas es

$$N = N_+ + N_- = 2\pi V \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{1/2}}{z^{-1}e^{\beta(\epsilon+\mu_B H)} + 1} + 2\pi V \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{1/2}}{z^{-1}e^{\beta(\epsilon-\mu_B H)} + 1}. \quad (9)$$

Aquí se han hecho las sustituciones habituales para pasar de una suma sobre impulsos a una integral sobre las energía cinéticas,  $\epsilon = p^2/2m$ . Cada término tiene la misma forma que la integral para el número de partículas de un sistemas de fermiones sin grados de libertad internos ( $g = 1$ ), pero con una fugacidad efectiva,  $z_\pm = ze^{\mp\beta\mu_B H}$ ,

$$N = 2\pi V \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{1/2}}{z_+^{-1}e^{\beta\epsilon} + 1} + 2\pi V \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{1/2}}{z_-^{-1}e^{\beta\epsilon} + 1}.$$

Notar que para  $H > 0$  siempre es  $N_- > N_+$ . Para  $T \neq 0$  el cambio de variable  $\beta\epsilon = x$  permite introducir las funciones  $f_\nu$ ,

$$N = \frac{V}{\lambda^3} f_{3/2}(z_+) + \frac{V}{\lambda^3} f_{3/2}(z_-).$$

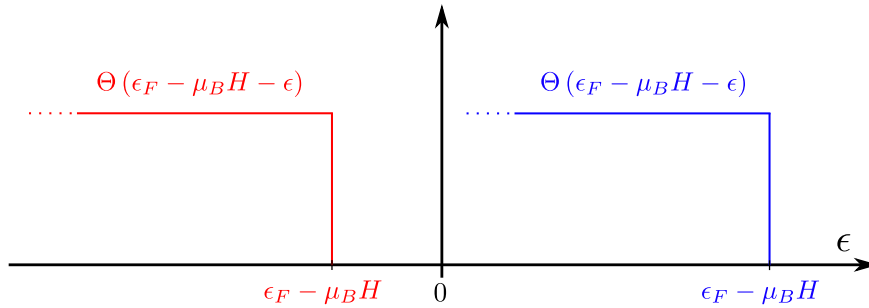
Si la temperatura es cero, conviene volver primero a la Ec. (9), escribir  $\mu = \epsilon_F$  en las integrarles

$$\int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{1/2}}{z^{-1} e^{\beta(\epsilon \pm \mu_B H)} + 1} = \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{1/2}}{e^{\beta(\epsilon \pm \mu_B H - \epsilon_F)} + 1},$$

y usar el hecho de que cuando  $T \rightarrow 0$  el número de ocupación tiende a una función escalón. Para las partículas con espín paralelo al campo queda, por ejemplo,

$$\int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{1/2}}{e^{\beta(\epsilon + \mu_B H - \epsilon_F)} + 1} \rightarrow \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{1/2} \Theta(\epsilon_F - \mu_B H - \epsilon).$$

Debido a que el límite inferior de las integrales es cero, si el argumento de la función escalón es menor que cero para  $\epsilon = 0$  (que sería el caso más favorable), el integrando es cero siempre y la integral se anula.



Así, siguiendo con el caso de las partículas con espín paralelo al campo,

$$\int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{1/2} \Theta(\epsilon_F - \mu_B H - \epsilon) = \frac{2}{3} (\epsilon_F - \mu_B H)^{3/2} \Theta(\epsilon_F - \mu_B H).$$

Luego,

$$N = \frac{4\pi V}{3} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \left[ (\epsilon_F - \mu_B H)^{3/2} \Theta(\epsilon_F - \mu_B H) + (\epsilon_F + \mu_B H)^{3/2} \Theta(\epsilon_F + \mu_B H) \right]. \quad (10)$$

El primer término corresponde a los electrones con espín paralelo al campo, es decir, los que tienen una energía mínima igual a  $\mu_B H$  (recordar que estamos suponiendo que  $H \geq 0$ ). La ecuación anterior está diciendo simplemente que si la energía de Fermi no es mayor que ese valor mínimo, entonces no habrá electrones con espín paralelo al campo. No podría ocurrir que  $\epsilon_F$  fuera menor que  $-\mu_B H$ , porque entonces tampoco habría electrones con el espín antiparalelo. La Ec. (10) es una ecuación para  $\epsilon_F$ ,

$$\alpha = f(\epsilon_F),$$

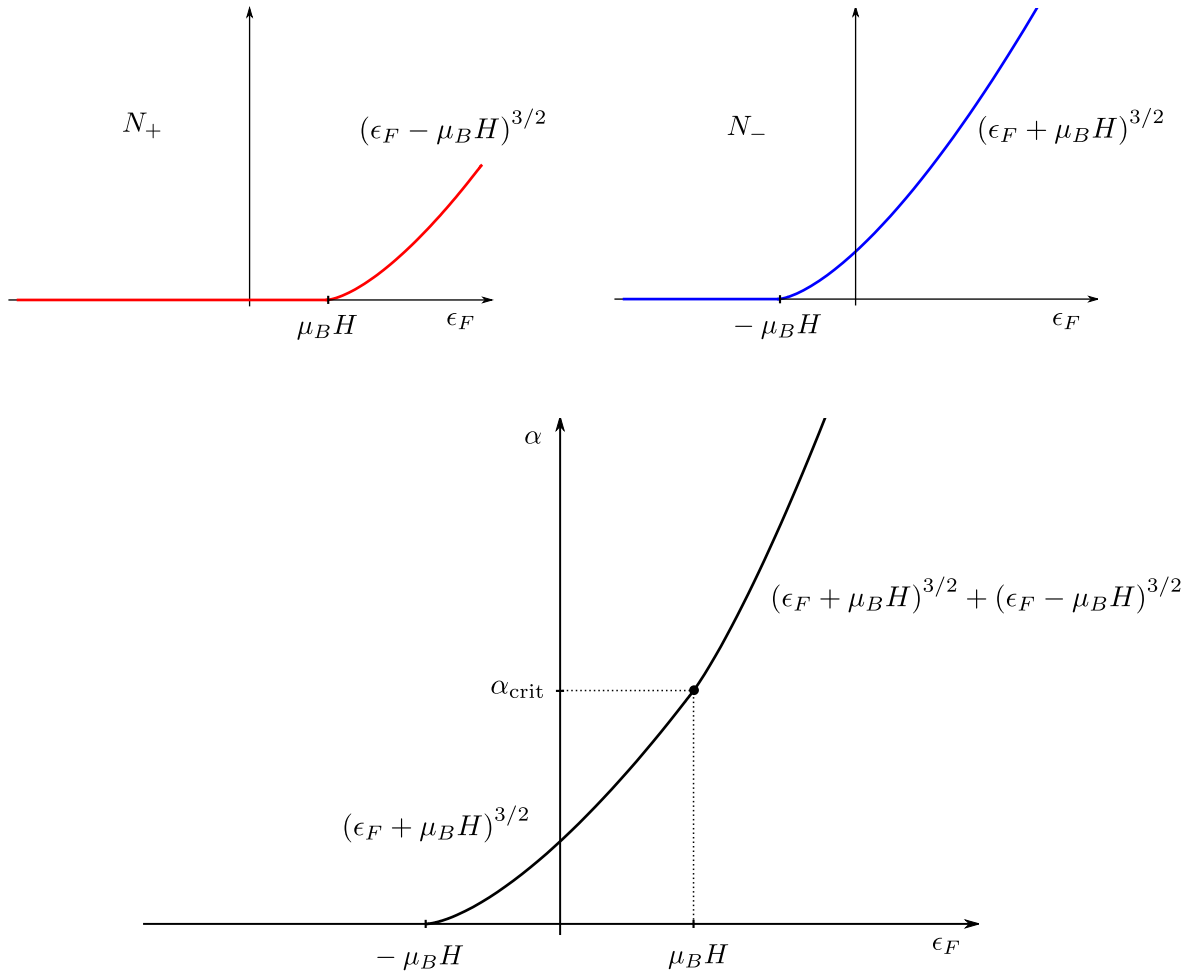
donde

$$\alpha = \frac{3N}{4\pi V} \left( \frac{\hbar^2}{2m} \right)^{3/2}$$

y donde

$$f(\epsilon_F) = (\epsilon_F - \mu_B H)^{3/2} \Theta(\epsilon_F - \mu_B H) + (\epsilon_F + \mu_B H)^{3/2} \Theta(\epsilon_F + \mu_B H).$$

Conviene pensar la ecuación gráficamente. Para cada elección del parámetro  $\alpha$  debe buscarse la intersección de la curva de la función  $f(\epsilon_F)$  con la cota de nivel  $\alpha$ . Las figuras siguientes muestran por separado cada término de la función  $f$ , y luego su suma, indicando la definición de la función en los tramos en que es distinta de cero.



Si  $0 \leq \alpha \leq (2\mu_B H)^{3/2}$ , la intersección ocurre en el primer tramo de la función  $f$ , allí donde  $f(\epsilon_F) = (\epsilon_F + \mu_B H)^{3/2}$ . Pero si  $(2\mu_B H)^{3/2} < \alpha$  la intersección debe buscarse en el segundo tramo de la función  $f$ , allí donde  $f(\epsilon_F) = (\epsilon_F + \mu_B H)^{3/2} + (\epsilon_F - \mu_B H)^{3/2}$ . En el primer caso sólo estarán poblados los niveles con espín antiparalelo al campo; todos los electrones tendrán sus espines alineados. A mayor densidad de partículas, mayor es el valor del parámetro  $\alpha$ . Cuando se sobrepasa la cota crítica dada por  $\alpha_{\text{crit}} = (2\mu_B H)^{3/2}$ , empiezan a poblarse los niveles con espín paralelo al campo y deja de ser cierto que todos los electrones tengan sus espines alineados. La densidad máxima para la que eso ocurre es

$$\left(\frac{N}{V}\right)_{\text{max}} = \frac{4\pi}{3} \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} (2\mu_B H)^{3/2} = \frac{4\pi}{3} \left(\frac{4\mu_B H m}{h^2}\right)^{3/2}.$$

(b) En general la magnetización es

$$M = \mu_B(N_- - N_+),$$

y la susceptibilidad

$$\chi = \left. \frac{\partial M}{\partial H} \right|_{H=0}.$$

Cuando la energía de Fermi es mayor que  $\mu_B H$

$$N_{\pm} = \frac{4\pi V}{3} \left( \frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} (\epsilon_F \mp \mu_B H)^{3/2}.$$

La magnetización es entonces

$$M = \frac{4\pi V}{3} \left( \frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} [(\epsilon_F + \mu_B H)^{3/2} - (\epsilon_F - \mu_B H)^{3/2}] \mu_B.$$

Para calcular la susceptibilidad hay que tener en cuenta que la dependencia de los números  $N_{\pm}$  respecto de  $H$  aparece explícita e implícitamente, ya que  $\epsilon_F$  es a su vez una función de  $H$ . Por ejemplo,

$$\frac{\partial N_+}{\partial H} = 2\pi V \left( \frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} (\epsilon_F - \mu_B H)^{1/2} \left( \frac{\partial \epsilon_F}{\partial H} - \mu_B \right).$$

Si  $H = 0$ ,

$$\left. \frac{\partial N_+}{\partial H} \right|_{H=0} = 2\pi V \left( \frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} \epsilon_F^{1/2} \left( \frac{\partial \epsilon_F}{\partial H} - \mu_B \right),$$

con un resultado análogo para  $N_-$ ,

$$\left. \frac{\partial N_-}{\partial H} \right|_{H=0} = 2\pi V \left( \frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} \epsilon_F^{1/2} \left( \frac{\partial \epsilon_F}{\partial H} + \mu_B \right).$$

Al hacer la diferencia de los dos términos, la derivada  $\partial \epsilon_F / \partial H$  se cancela, y queda

$$\chi = \mu_B \left( \left. \frac{\partial N_-}{\partial H} \right|_{H=0} - \left. \frac{\partial N_+}{\partial H} \right|_{H=0} \right) = 4\pi V \left( \frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} \epsilon_F^{1/2} \mu_B^2. \quad (11)$$

Por otro lado cuando  $H = 0$ , la energía de Fermi está dada por

$$N = \frac{2}{3} 4\pi V \left( \frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} \epsilon_F^{3/2}.$$

Reemplazando en la Ec. (11)  $\epsilon_F$  en términos de la densidad, queda

$$\chi = (4\pi V)^{2/3} \left( \frac{2m}{h^2} \right) \left( \frac{3N}{2} \right)^{1/3} \mu_B^2.$$

Más que la susceptibilidad, interesa la cantidad intensiva  $\chi/N$ , que resulta ser

$$\frac{\chi}{N} = 4 \left[ \frac{\sqrt{3} \pi V}{N} \right]^{2/3} \frac{m \mu_B^2}{h^2}.$$

De haber sido necesario calcular  $\partial \epsilon_F / \partial H$ , podríamos haber usado la ecuación (10), que da la relación entre  $\epsilon_F$  y  $H$ . Cuando  $\epsilon_F > \mu_B H$ ,

$$N = \frac{4\pi V}{3} \left( \frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} \left[ (\epsilon_F - \mu_B H)^{3/2} + (\epsilon_F + \mu_B H)^{3/2} \right].$$

Como todo lo que queremos es la derivada de  $\epsilon_F$  respecto de  $H$ , podemos derivar implícitamente. Puesto que  $N$  y  $V$  están fijos, diferenciando la última ecuación resulta

$$0 = (\epsilon_F - \mu_B H)^{1/2} (d\epsilon_F - \mu_B dH) + (\epsilon_F + \mu_B H)^{1/2} (d\epsilon_F + \mu_B dH).$$

Entonces

$$\frac{\partial \epsilon_F}{\partial H} = \frac{(\epsilon_F - \mu_B H)^{1/2} - (\epsilon_F + \mu_B H)^{1/2}}{(\epsilon_F - \mu_B H)^{1/2} + (\epsilon_F + \mu_B H)^{1/2}} \mu_B.$$

Si  $H = 0$ ,

$$\frac{\partial \epsilon_F}{\partial H} = \frac{\epsilon_F^{1/2} - \epsilon_F^{1/2}}{\epsilon_F^{1/2} + \epsilon_F^{1/2}} \mu_B = 0.$$