Fermiones

Opción 1

Consideremos un gas de N electrones moviéndose en una lámina bidimensional cuadrada de lado L, que vamos a describir con coordenadas cartesianas $x, y \in [0, L]$. El gas está sometido a un campo eléctrico constante E en la dirección y, de manera que las energías monoparticulares son

$$\epsilon = \frac{p^2}{2m} + qEy,$$

donde m y q son respectivamente la masa y la carga del electrón. Asumimos que $qE > 0$.

(a) Calcule $\ln Z_{\mathrm{GC}}$ en función de T y z. Compruebe su resultado estudiando el límite $E \to 0$.
Sugerencia: defina una fugacidad efectiva $z_y \equiv ze^{-\beta qEy}$, exprese $\ln Z_{\mathrm{GC}}$ como una integral en y de una cierta $f_\nu(z_y)$ e integre haciendo el cambio de variables $y \mapsto z_y$.

(b) A partir de lo anterior, calcule la energía de Fermi ϵ_F asumiendo $\epsilon_F < qEL$. ¿Para qué valores de la densidad N/L^2 es correcto el resultado obtenido?
Ayuda: antes de derivar $\ln Z_{\mathrm{GC}}$ y de aplicar Sommerfeld, pregúntese si hay algún término que se anula a temperatura 0.

(c) En las mismas condiciones del ítem anterior, calcule la altura media $\langle y \rangle$ de los electrones en la lámina a temperatura 0, usando la relación

$$\langle y \rangle = -\frac{1}{N\beta q}\frac{\partial}{\partial E}\ln Z_{\mathrm{GC}}. \tag{1}$$

Muestre que $\langle y \rangle < L/3$ y discuta este último resultado. ¿Se le ocurre cómo probar la ecuación (1)?

Solución

Inciso a

Tenemos $\epsilon(\vec{x},\vec{p}) = \dfrac{\|\vec{p}\|^2}{2m} + qEy$, luego planteamos (considerando que $0 \leq x, y \leq L$):

$$\begin{aligned}
\ln Z_{GC} &= \sum_{i\,\in\,\text{estados}} \ln(1+ze^{-\beta\epsilon_i}) = \sum_{s_z=\pm1/2} \int \frac{d^2q d^2p}{h^2}\; \ln(1+ze^{-\beta(\|\vec{p}\|,y)}) \\
&= \frac{g_s}{h^2}\int_0^L dx \int_0^L dy \int d^2p\; \ln(1+ze^{-\beta\epsilon(\|\vec{p}\|,y)}) = \frac{g_s}{h^2}\int_0^L dx \int_0^L dy \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^\infty dp\; p\; \ln(1+ze^{-\beta\epsilon(p,y)}) \\
&= \frac{g_s}{h^2}2\pi L \int_0^L dy \int_0^\infty dp\; p\; \ln(1+ze^{-\beta qEy}e^{-\beta\frac{p^2}{2m}}) = \frac{g_s}{h^2}2\pi L \int_0^L dy \int_0^\infty dp\; p\; \ln(1+z'(y)e^{-\beta\frac{p^2}{2m}}) \\
&= \frac{g_s}{h^2}2\pi L \int_0^L dy \int_0^\infty dx\; \frac{m}{\beta}\; \ln(1+z'(y)e^{-x}) = \frac{g_s}{h^2}2\pi L\; \frac{m}{\beta} \int_0^L dy \left(0 - \int_0^\infty dx\; x\; \frac{(-z'(y)e^{-x})}{1+z'(y)e^{-x}}\right) \\
&= \frac{g_s}{h^2}2\pi L\; \frac{m}{\beta} \int_0^L dy \int_0^\infty dx\; \frac{x}{(z'(y))^{-1}e^x+1} = \frac{g_s}{h^2}2\pi L\; \frac{m}{\beta} \int_0^L dy\; \Gamma(2) f_2(z'(y)) \\
&= \frac{g_s}{h^2}2\pi L\; \frac{m}{\beta} \int_z^{ze^{-\beta qEL}} dz'\; \frac{1}{\beta qE}\frac{(-1)}{z'}\; f_2(z') = \frac{g_s}{h^2}2\pi L\; \frac{m}{\beta}\; \frac{1}{\beta qE} \int_{ze^{-\beta qEL}}^z dz'\; \frac{1}{z'}\; f_2(z') \\
&= \frac{g_s}{h^2}2\pi L\; \frac{m}{\beta}\; \frac{1}{\beta qE} \int_{ze^{-\beta qEL}}^z dz'\; (f_3)'(z') = \frac{g_s}{h^2}2\pi L\; \frac{m}{qE}\; \frac{1}{\beta^2}\; (f_3(z) - f_3(ze^{-\beta qEL}))
\end{aligned} \tag{2}$$

Donde en el segundo renglón se pasó a coordenadas esféricas $p_x, p_y \to p, \theta$ en la integral de momento d^2p, y se integró en las variables x, θ (de las cuales la energía no depende). En el tercer renglón se utilizó la definición de la fugacidad efectiva $z'(y) \equiv ze^{-\beta qEy}$. En el cuarto renglón se utilizó el cambio de variable $p \to x \equiv \beta p^2/(2m)$ (con $dx = dp\ \beta p/m \implies dp\ p = dx\ m/\beta$), y se integró por partes en x, considerando que el término de borde $x\ln(1+z'(y)e^{-x})|_0^\infty$ se anula tanto en $x=0$ (pues es proporcional a $x=0$) como en $x\to\infty$ (pues como $e^{-x} \ll 1$, en dicho límite: $x\ln(1+z'(y)e^{-x}) \simeq x\ z'(y)e^{-x} \simeq 0$). En el quinto renglón se identificó la integral en x con $\Gamma(2)f_2(z'(y)) = f_2(z'(y))$ (pues $\Gamma(2) = (2-1)! = 1! = 1$); aquí se logró expresar $\ln Z_{GC}$ como la integral de una $f_\nu(z'(y))$. En el sexto renglón se realizó el cambio de variable $y \to z'(y) = ze^{-\beta qEy}$, luego $y = y(z') = \dfrac{1}{\beta qE}\ln(z/z') = \dfrac{1}{\beta qE}(\ln(z) - \ln(z'))$ y $dy = \dfrac{1}{\beta qE}\dfrac{(-1)}{z'}dz'$, y luego se absorbió el signo $-$ con un intercambio en los límites de integración. En el séptimo y último renglón se identificó $\dfrac{1}{z'}f_\nu(z') = (f_{\nu+1})'(z')$, y se integró usando la regla de Barrow.

Si aproximamos $E \to 0$, o más precisamente si aproximamos $\omega_L \equiv \beta qEL \ll 1$, obtenemos:

$$f_3(z) - f_3(ze^{-\beta qEL}) \simeq f_3(z) - f_3(z(1-\beta qEL + \mathcal{O}(\omega_L^2))) \simeq f_3(z) - f_3(z) + \beta qEL\ zf_3'(z) + \mathcal{O}(\omega_L^2)$$
$$\simeq \beta qEL\ f_2(z) \tag{3}$$

Luego, podemos aproximar $\ln Z_{GC}$ por:

$$\ln Z_{GC} \simeq \frac{g_s}{h^2}2\pi L\ \frac{m}{qE}\ \frac{1}{\beta^2}\ \beta qEL\ f_2(z) = \frac{g_s}{h^2}2\pi m\ L^2\ \frac{1}{\beta}\ f_2(z) = g_s\frac{L^2}{\lambda^2}\ f_2(z) \tag{4}$$

es precisamente la función de partición que corresponde al gas ideal de fermiones en 2D (pues $A = L^2$ es el área de la lámina cuadrada). Luego, todo lo que derivemos de allí va a ser lo mismo que en el gas ideal de fermiones en 2D: Tanto U, N como la energía y presión de Fermi, etcétera. Ésto era precisamente lo esperado pues el sistema es un gas ideal de fermiones en 2D si $E = 0$.

Inciso b

Notar que a $T = 0 \iff \beta = \infty$ se tiene que $ze^{-\beta qEL} = e^{\beta(\epsilon_F - qEL)} = e^{-\beta(qEL-\epsilon_F)} = e^{-\infty} = 0$ pues $z = z(T=0) = e^{\beta\mu(T=0)} = e^{\beta\epsilon_F}$ y además asumimos que $\epsilon_F < qEL$ (luego $\beta(\epsilon_F - qEL) = -\infty$). Entonces $f_\nu(ze^{-\beta qEL}) = f_\nu(z_L') = f_\nu(0) = 0$. Luego, podemos escribir el logaritmo de la función de partición en el caso $T = 0$ como:

$$\ln Z_{GC} = \frac{g_s}{h^2}2\pi L\ \frac{m}{qE}\ \frac{1}{\beta^2}\ f_3(z) \tag{5}$$

Si derivo a $\ln Z_{GC}$ respecto de z a β constante, se obtiene:

$$N = z\ \frac{\partial(\ln Z_{GC})}{\partial z}\bigg|_\beta = \frac{g_s}{h^2}2\pi L\ \frac{m}{qE}\ \frac{1}{\beta^2}\ f_2(z) \tag{6}$$

donde se utilizó $z\dfrac{\partial f_\nu(z)}{\partial z} = f_{\nu-1}(z)$.

Notar que si $\beta \to \infty$ (a N constante) entonces $f_2(z) \to \infty \iff z \to \infty$, y en consecuencia podemos usar la expansión de Sommerfeld a orden 0 en la anterior ecuación (pues las correcciones de mayor orden a dicha expansión se anulan en $T = 0$): $f_2(z) \simeq (\beta\mu(T=0))^2/\Gamma(3) \simeq \beta^2\epsilon_F^2/2$

$$N \simeq \frac{g_s}{h^2}2\pi L\ \frac{m}{qE}\ \frac{\epsilon_F^2}{2} \implies \epsilon_F = \left(\frac{N}{L^2}\ \frac{h^2}{g_s\pi m}\ qEL\right)^{1/2} \tag{7}$$

De esa forma obtuvimos la energía de Fermi del sistema, habiendo asumido que $\epsilon_F < qEL$. Luego, el resultado obtenido para ϵ_F es válido si éste verifica la condición asumida $\epsilon_F < qEL$. Luego, si planteamos la validez de dicha condición para el resultado obtenido:

$$\begin{aligned} \epsilon_F = \left(\frac{N}{L^2} \, \frac{h^2}{g_s \pi m} \, qEL \right)^{1/2} < qEL \iff \frac{N}{L^2} \, \frac{h^2}{g_s \pi m} \, qEL < (qEL)^2 \\ \iff \frac{N}{L^2} < \frac{g_s \pi m}{h^2} \, qEL \end{aligned} \tag{8}$$

La densidad de partículas por unidad de área N/L^2 debe verificar la anterior condición para que lo planteado en éste inciso sea válido.

Inciso c

Utilizando la relación enunciada en el inciso c aplicada al logaritmo de la función de partición del sistema, que a $T = 0$ lo podemos expresar con la ecuación 5:

$$\begin{aligned} \langle y \rangle &= -\frac{1}{N\beta q} \frac{\partial}{\partial E} \left(\ln Z_{GC} \right) = -\frac{1}{N\beta q} \frac{\partial}{\partial E} \left(\frac{g_s}{h^2} 2\pi L \, \frac{m}{qE} \, \frac{1}{\beta^2} \, f_3(z) \right) \\ &= \frac{1}{N\beta q} \frac{g_s}{h^2} 2\pi L \, \frac{m}{q} \, \frac{1}{\beta^2} \, f_3(z) \left(-\frac{\partial}{\partial E} \left(\frac{1}{E} \right) \right) = \frac{1}{N\beta q} \frac{g_s}{h^2} 2\pi L \, \frac{m}{qE^2} \, \frac{1}{\beta^2} \, f_3(z) \\ &= \frac{1}{N} \, \frac{g_s}{h^2} 2\pi L \, \frac{m}{q^2 E^2} \, \frac{1}{\beta^3} \, f_3(z) \end{aligned} \tag{9}$$

Luego, si reemplazamos N dado por la ecuación 6 en la anterior expresión:

$$\langle y \rangle = \frac{1}{qE} \, \frac{1}{\beta} \, \frac{f_3(z)}{f_2(z)} \tag{10}$$

Aplicando la expansión de Sommerfeld a orden 0 a ésto último (pues estamos evaluando en $T = 0$, luego las correcciones de mayor orden son irrelevantes), se obtiene:

$$\langle y \rangle = \frac{1}{qE} \, \frac{1}{\beta} \, \frac{\beta^3 \epsilon_F^3 / \Gamma(4)}{\beta^2 \epsilon_F^2 / \Gamma(3)} = \frac{\epsilon_F}{qE} \, \frac{\Gamma(3)}{\Gamma(4)} = \frac{\epsilon_F}{3qE} < \frac{qEL}{3qE} = \frac{L}{3} \tag{11}$$

donde se utilizó que $\Gamma(4) = 3\Gamma(3)$ y que $\epsilon_F < qEL$. Éste resultado tiene sentido considerando que a $T = 0$, los fermiones no están agitados térmicamente, y luego se ven más afectados por el campo eléctrico externo E que los empuja hacia abajo (pues sufren una fuerza $\vec{F} = q\vec{E} = -qE\hat{y}$ con $qE > 0$). Entonces su valor medio de altura $\langle y \rangle$ está por debajo de $L/3$ y en particular por debajo de la mitad de la lámina $L/2$.

Probemos la validez de la relación enunciada en el inciso c. Si calculamos:

$$
\begin{aligned}
&-\frac{1}{N\beta q}\frac{\partial}{\partial E}\left(\ln Z_{GC}\right) = -\frac{1}{N\beta q}\frac{\partial}{\partial E}\left(\sum_{i\ \in\ \text{estados}} \ln(1+ze^{-\beta\epsilon_i})\right) \\
&= -\frac{1}{N\beta q}\sum_{i\ \in\ \text{estados}} \frac{1}{1+ze^{-\beta\epsilon_i}}\frac{\partial}{\partial E}(1+ze^{-\beta\epsilon_i}) = -\frac{1}{N\beta q}\sum_{i\ \in\ \text{estados}} \frac{1}{1+ze^{-\beta\epsilon_i}}ze^{-\beta\epsilon_i}(-\beta)\frac{\partial\epsilon_i}{\partial E} \\
&= \frac{1}{N\beta q}\sum_{i\ \in\ \text{estados}} \frac{1}{1+ze^{-\beta\epsilon_i}}ze^{-\beta\epsilon_i}\beta q y_i = \frac{1}{N}\sum_{i\ \in\ \text{estados}} \frac{1}{z^{-1}e^{\beta\epsilon_i}+1}\ y_i = \sum_{i\ \in\ \text{estados}} \frac{n_i}{N}\ y_i = \langle y\rangle
\end{aligned}
\tag{12}
$$

Donde se derivó $\epsilon_i = p_i^2/(2m) + qEy_i$ respecto de E, que dio igual a qy_i. También se identificó al número de partículas en el estado i: $n_i = (z^{-1}e^{\beta\epsilon_i}+1)^{-1}$. Y se identificó al valor medio de y, dado por la sumatoria sobre todos los estados monoparticulares i de y_i (correspondiente al estado i) por la probabilidad $p_i = n_i/N$ de que una partícula cualquiera del sistema se encuentre en el estado i.