

Aplicaciones del Gas de Fermi

Lectura: R. K. Pathria & P. D. Beale, Cap. 8., Landau Cap. 5.

» Gas de Fermi

$$Z_{GC} = \prod_i (1 + ze^{-\beta\epsilon_i})$$

Gran Potencial $-\beta\Omega = \ln Z_{GC}$

$\beta pV = \ln Z_{GC}$

$$\Omega = -pV$$

$$= \sum_{1P} \ln (1 + ze^{-\beta\epsilon_{1P}})$$

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

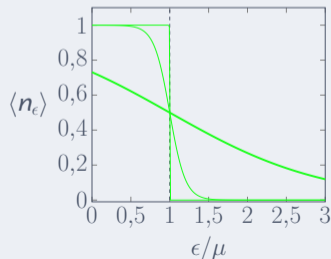
Gas libre en 3D

$$H = \sum p^2 / (2m)$$

$$N = \frac{V}{\lambda^3} g_s f_{3/2}(z) \quad p = \frac{k_B T}{\lambda^3} g_s f_{5/2}(z) \quad U = \frac{3}{2} pV$$

$$\mu(T) = \epsilon_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right], \quad k_B T_F = \epsilon_F(\mu(T=0))$$

$$c_V(T) = N k_B \frac{\pi^2}{2} \frac{T}{T_F}$$



» Gas de electrones

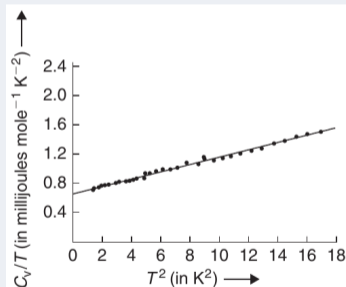
Los electrones de conducción en los metales pueden tratarse de manera efectiva como libres. Por ejemplo en el sodio, con $1e^-$ por átomo, tenemos

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3} \simeq 3,1 \text{ eV}, \text{ o sea una } T_F \simeq 3,5 \times 10^4 \text{ K}$$

$$c_V = \gamma T + [\delta T^3]$$

Otros sistemas

- Gases de protones, neutrones, electrones en estrellas ($T_F \sim 10^9 \text{ K}$).
- Sistemas en laboratorio: ^3He líquido, gases de átomos neutros atrapados ($T_F \simeq 5 \text{ K}$ ó nK .)



» Magnetismo en fermiones

Suponemos la aplicación de un campo magnético externo \mathbf{B} , con esto la energía interna

$$dU = TdS - pdV - \mathbf{M} \cdot d\mathbf{B} \Rightarrow \boxed{M_i = \frac{\partial \ln Z}{\partial (\beta B_i)}} \quad \text{donde } \mathbf{M} \text{ es la magnetización.}$$

Por un lado poseen un momento dipolar magnético $\boldsymbol{\mu} = \mu_B \boldsymbol{\sigma}$ con $\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$ que se acopla con un campo externo, $H_{\text{para}} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$

Además, si están cargados, el movimiento orbital da lugar a otro acoplamiento, proporcional a $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}$

En general,

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$$

Paramagnetismo de Pauli y diamagnetismo de Landau. Sus efectos son aditivos (porque/si no hay efecto spin-órbita). Nos vamos a enfocar concretamente en electrones, ie. spin 1/2, con estados \uparrow, \downarrow .

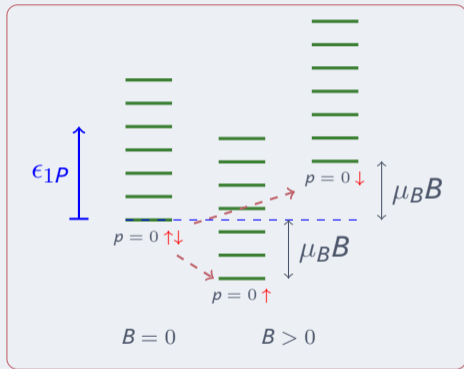
» Paramagnetismo de Pauli

Los espectros de \uparrow y \downarrow difieren, $H = \frac{p^2}{2m} - \mu \cdot B$

$$\epsilon_{p,s} = \overbrace{\frac{p^2}{2m}}^{\epsilon_p} \pm \mu_B B \quad (\Delta\epsilon = 2\mu_B B)$$

$$\langle N \rangle = \langle N_{\uparrow} \rangle + \langle N_{\downarrow} \rangle$$

$$\langle M \rangle = \mu_B (\langle N_{\uparrow} \rangle - \langle N_{\downarrow} \rangle)$$



» Paramagnetismo de Pauli (cont.)

$$M = \mu_B \sum_p [n(\epsilon_{p\uparrow}) - n(\epsilon_{p\downarrow})] \quad \text{con } n(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1} \quad \text{el número de ocupación de Fermi}$$

Cerca de $B = 0$ podemos aproximar $n(\epsilon_p \pm \mu_B B) \simeq n(\epsilon_p) \pm \mu_B B \frac{\partial n(\epsilon_p)}{\partial \epsilon_p}$ y convertir la suma en integral con la densidad de estados para cada spin (a $B = 0$) $g_0(\epsilon)$. Con lo cual,

$$M \simeq -2\mu_B^2 B \int_0^\infty d\epsilon g_0(\epsilon) \frac{\partial n(\epsilon)}{\partial \epsilon} \stackrel{\text{partes}}{=} 2\mu_B^2 B \int_0^\infty d\epsilon n(\epsilon) \frac{\partial g_0(\epsilon)}{\partial \epsilon}$$

» Paramagnetismo de Pauli (cont.)

Recordando que $g_0(\epsilon) \propto \epsilon^{1/2}$ y que a $B = 0$, $N_{\uparrow} = N/2$ podemos reescribir la densidad de estados directamente en función de la energía de Fermi a $B = 0$

$$g_0(\epsilon) = \frac{3N}{4\epsilon_F^{3/2}} \epsilon^{1/2}$$

Con lo cual, teniendo en cuenta la definición de las funciones de Fermi $f_{\sigma}(z)$ podemos escribir a toda T ,

$$M = \mu_B^2 \frac{3N}{4\epsilon_F^{3/2}} \sqrt{\pi k_B T} f_{1/2}(z)$$

» Paramagnetismo de Pauli (cont.)

Finalmente, desarrollando Sommerfeld, obtenemos a baja T

$$M = \frac{3}{2} \mu_B^2 B \frac{N}{\epsilon_F} \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right] = \chi(T) B$$

Mientras que en un gas clásico, con $f_\sigma(z) \simeq z$ y $z \simeq N\lambda^3/V$, recuperamos la ley de Curie

$$\chi_{\text{Curie}} = \frac{C}{T}$$

» Diamagnetismo de Landau

Clásicamente, para un gas,

$$Z = \frac{Z_1^N}{N!} \quad Z_1 = \int \frac{d^3p d^3q}{h^3} e^{-\frac{\beta}{2m}(\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A})^2} = \int \frac{d^3Q d^3P}{h^3} e^{-\frac{\beta}{2m}P^2} \quad \text{Bohr - van Leween}$$

Como el cambio de variables a P, Q elimina por completo la dependencia en $\mathbf{A}(B)$, esta función de partición no predice magnetización.

Cuánticamente, los niveles son discretos. Supongamos $\mathbf{B} = B\hat{z}$ y elijamos el gauge de Landau con $\mathbf{A} = -By\hat{x}$ (esto nos permite conmutar directamente \mathbf{A} y p)

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} + \frac{q}{c}By\hat{x} \right)^2 = \frac{1}{2m} \left(p_z^2 + p_y^2 + \left(\frac{qB}{c} \right)^2 y^2 + p_x^2 + \frac{2qB}{c} p_x y \right)$$

Lo que se ve en este Hamiltoniano es que podemos elegir, H, p_z y p_x como conjunto completo para los autoestados de H , y así factorizarlos como $\psi(\mathbf{r}) = e^{ik_z z} e^{ik_x x} f(y)$.

» Diamagnetismo de Landau (cont.)

Escribiendo la ecuación de Schrödinger $H\psi = E\psi$ se reduce a

$$\left[\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \hbar k_x y \frac{qB}{mc} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{m}{2} \left(\frac{qB}{mc} \right)^2 y^2 \right] f(y) = E f(y)$$

Notar que p_y y y siguen siendo operadores. Completando cuadrados, y considerando electrones con $q = -e^-$, obtenemos

$$\left[\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{m\omega_c^2}{2} (y - y_0)^2 \right] f(y) = E f(y) \quad \text{con } \omega_c = e^- B / (mc) \quad \text{y } y_0 = \hbar k_x / (m\omega_c)$$

Como vemos esta ecuación es la de un oscilador armónico de frecuencia ω_c en 1D (y) centrado en y_0 y con un corrimiento en energía $\hbar^2 k_z^2 / 2m$, con lo cual las autoenergías son

$$E_{k_z, n} = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \hbar\omega_c (n + 1/2) \quad n = 0, 1, \dots, \infty.$$

» Diamagnetismo de Landau (cont.)

Los distintos valores de k_x dan lugar a distintos y_0 pero todos ellos tienen el mismo espectro de oscilador (en un volumen infinito). Por lo tanto este espectro está muy degenerado. Si pensamos el problema en un volumen cúbico de lado L . Tanto los valores de k_z como k_x deben satisfacer (son autoestados de p_z , y p_x respectivamente), $k_z = \frac{2\pi}{L}k$ y $k_x = \frac{2\pi}{L}i$ con k e i números enteros.

Ahora, los valores de i están determinados por los valores de y que puede tomar y_0 . Como el espaciado de k_x es $2\pi/L$ eso implica que el espaciado de los valores posibles de $y_0 = k_x \frac{\hbar}{m\omega_c}$ es

$$\Delta y_0 = \frac{2\pi}{L} \frac{\hbar}{m\omega_c} \quad \text{y entonces el número de valores de } y \text{ en } L \text{ es } \frac{L}{\Delta y_0} = L^2 \frac{m\omega_c}{\hbar} = \frac{BL^2}{2\pi\hbar c/e^-} = \Phi/\Phi_0.$$

Donde Φ es el flujo del campo magnético en la cara del volumen, $\Phi = BL^2$ y $\Phi_0 = 2\pi\hbar c/e^-$ un flujo elemental. El factor Φ/Φ_0 entonces constituye la degeneración del espectro para cada valor de k_z y n .

El espectro de niveles del electrón en un campo magnético se conoce como niveles de Landau, y es lo que necesitamos para calcular la función de partición y de ahí la magnetización y susceptibilidad.

» La función de partición

Ahora que conocemos los estados con su degeneración, podemos calcular todo

$$\begin{aligned}\ln Z_{GC} &= \sum_{1P} \ln \left(1 + z e^{-\beta E_{1P}} \right) = \frac{L}{2\pi} \int dk_z \sum_{n=0}^{\infty} 2 \frac{L^2 B}{\Phi_0} \ln \left[1 + z e^{-\beta \hbar^2 k_z^2 / (2m)} e^{-\beta \hbar \omega_c (n+1/2)} \right] \\ &= \frac{VB}{\pi \Phi_0} \sum_{n=0}^{\infty} h[\mu - \hbar \omega_c (n+1/2)]\end{aligned}$$

con $h(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \ln \left[1 + e^{-\beta \hbar^2 k_z^2 / (2m)} e^{\beta x} \right]$

Para realizar la suma sobre n vamos a usar la aproximación de Euler - MacLaurin,

$$\sum_{n=0}^{\infty} f(n+1/2) \simeq \int_0^{\infty} f(x) dx + \frac{1}{24} f'(0)$$

» La funcion de partición (cont.)

Reemplazando, con $f(n) = h(\mu - \hbar\omega_c n)$,

$$\begin{aligned}\ln Z_{gc} &= \frac{VB}{\pi\Phi_0} \int_0^\infty h(\mu - \hbar\omega_c x) dx - \frac{VB}{\pi\Phi_0} \frac{\hbar\omega_c}{24} h'(\mu) = \frac{VB}{\pi\Phi_0} \left[\frac{1}{\hbar\omega_c} \int_{-\infty}^\mu h(y) dy - \frac{\hbar\omega_c}{24} h'(\mu) \right] \\ &= \frac{Vm}{2\pi^2\hbar^2} \int_{-\infty}^\mu h(y) dy - \frac{Ve^{-2}}{2\pi^2 mc^2} \frac{B^2}{24} \hbar(2\pi m\beta)^{1/2} f_{1/2}(z)\end{aligned}$$

donde exprese ω_c en términos de B y usé que

$$h(x) = \frac{2}{\hbar} \left(\frac{m\pi}{2\beta} \right)^{1/2} f_{3/2}(e^{\beta x}) \quad \text{de la definición de } f_{3/2} \text{ y } h(x) \text{ e integrando por partes, y ademas } f'_{3/2}(z) = f_{1/2}(z)/z$$

Como vemos de la expresión de $\ln Z_{gc}$, el primer término no depende de B (a T , μ fijos) y, por lo tanto, no entra ni en la magnetización ni en la susceptibilidad. Con lo cual,

$$M = \frac{\partial \ln Z_{gc}}{\partial(\beta B)} = -\frac{Ve^{-2}}{2\pi^2 mc^2} \frac{2B}{24\beta} \hbar(2\pi m\beta)^{1/2} f_{1/2}(z) = \chi B$$

Mostrando que la susceptibilidad es negativa, ie., es diamagnético.