

§ Férmions degenerados

Um bom exemplo é um metal a baixas temperaturas. Consideramos o spin dos elétrons ($s = 1/2$). Os núcleos atômicos estão fixos e seu papel principal é neutralizar a carga total do sólido. O modelo mais simplificado é considerar os elétrons como um gás de partículas não interagentes de spin $1/2$. Se o sistema for invariante por translação, os estados eletrônicos podem ser caracterizados pelo seu momentum, com valores

$$\vec{p} = \frac{2\pi\hbar}{L} (\nu_1, \nu_2, \nu_3),$$

onde o volume do sistema é $V = L^3$ e os ν_i ($i=1,2,3$) são inteiros. Se o spin for quantizado ao longo da direção $\hat{z}$, temos os autovalores:

$$\sigma_z = \pm 1 \quad (S_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z).$$

O Hamiltoniano não relativístico de uma partícula é

$$H = \frac{(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})^2}{2m} + e\phi - \vec{\mu} \cdot \vec{B}, \quad (*)$$

onde $(\phi, \vec{A})$ são as potenciais eletromagnéticas, $\vec{B}$ o campo magnético ($\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$) e $\vec{\mu}$ é o momento magnético:

$$\vec{\mu} = \frac{e}{mc} \vec{S} = -\frac{|e|\hbar}{2mc} \vec{\sigma} = -\mu_B \vec{\sigma},$$

onde

$$\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2mc} \quad \text{é o magneton de Bohr}$$

O Hamiltoniano (*) determina o espectro de uma partícula,

que em geral, é dependente do spin $E_{\vec{p}\sigma}$. Se considerarmos agora o formalismo dos 'números de ocupação', onde os $n_{\vec{p}\sigma}$ são operadores dinâmicos, o Hamiltoniano completo do sistema de elétrons se escreve como

$$\mathcal{H} = \sum_{\sigma=\pm} \sum_{\vec{p}} E_{\vec{p}\sigma} n_{\vec{p}\sigma},$$

e os estados de muitas partículas são rotulados com os autovalores dos $n_{\vec{p}\sigma}$:

$$|\nu\rangle = |n_{p_1+}, n_{p_1-}, n_{p_2+}, n_{p_2-}, \dots, n_{p_j\sigma_j}, \dots\rangle,$$

com $n_{p_j\sigma_j} = 0, 1$ (Princípio de Exclusão de Pauli).

Em equilíbrio, a média de $n_{\vec{p}\sigma}$ segue a distribuição de Fermi-Dirac:

$$\bar{n}_{\vec{p}\sigma} = \frac{1}{\exp[\beta(E_{\vec{p}\sigma} - \mu_\sigma)] + 1},$$

onde supomos que o número de elétrons de cada spin é conservado (e que o potencial químico depende do spin). Para c/spin obtemos:

$$\bar{N}_\sigma = \sum_{\vec{p}} \bar{n}_{\vec{p}\sigma} \longrightarrow \left(\frac{L}{h}\right)^3 \int d\vec{p} \bar{n}_\sigma(\vec{p}).$$

Na última passagem, temos tomado o limite contínuo e multiplicado pela correspondente densidade de estados:

$$\sum_{\vec{p}} \longrightarrow \left(\frac{L}{h}\right)^3 \int d\vec{p}.$$

Adensidade de partículas com spin σ é :

$$\bar{n}_\sigma = \frac{\bar{N}_\sigma}{L^3} = \int \frac{d\vec{p}}{h^3} \bar{n}_\sigma(\vec{p})$$

$\bar{n}_\sigma(\vec{p})$: pode ser interpretado como a probabilidade (por unidade de volume) de encontrar uma partícula com momentum $\vec{p}$ e spin σ

$\bar{n}_\sigma(\vec{p})$ pode ser considerada como uma função distribuição que inclui a variável de spin :

$$\bar{N} \longrightarrow \frac{L^3}{h^3} \int d\vec{p} \bar{n}_\sigma(\vec{p}) = \int \frac{d\vec{r} d\vec{p}}{h^3} \bar{n}_\sigma(\vec{p})$$

$$= \int \frac{d\vec{r} d\vec{p}}{h^3} f_\sigma(\vec{p}, \vec{x}, t),$$

e identificamos:

$$f_\sigma(\vec{p}, \vec{x}, t) = \bar{n}_\sigma(\vec{p}) = \bar{n}_{\vec{p}\sigma}.$$

Analogamente, para as densidades de momentum e energia temos :

$$\bar{g}(\vec{x}, t) = \sum_\sigma \int \frac{d\vec{p}}{h^3} \vec{p} f_\sigma(\vec{p}, \vec{x}, t)$$

$$\bar{E}(\vec{x}, t) = \sum_\sigma \int \frac{d\vec{p}}{h^3} \epsilon_{\vec{p}\sigma} f_\sigma(\vec{p}, \vec{x}, t)$$

Para o potencial Ω também temos:

$$\Omega = -k_B T \sum_{\vec{p}\sigma} \ln [1 + e^{\beta(\mu_0 - \epsilon_{\vec{p}\sigma})}] = -PV,$$

de onde obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{p}{k_B T} &= \sum_{\sigma} \int \frac{d\vec{p}}{h^3} \ln [1 + \exp \beta(\mu_0 - \epsilon_{\vec{p}\sigma})] \\ &= - \sum_{\sigma} \int \frac{d\vec{p}}{h^3} \ln (1 - \bar{n}_{\vec{p}\sigma}) \\ &= - \sum_{\sigma} \int \frac{d\vec{p}}{h^3} \ln [1 - f_{\sigma}(\vec{p}, \vec{x}, t)] \end{aligned}$$

O interesse em escrever as expressões em termos da função de distribuição $f_{\sigma}(\vec{p}, \vec{x}, t)$ está na generalização da teoria para sistemas fracamente interagentes, em situações de não equilíbrio, mas não muito longe de equilíbrio (por exemplo, estudar transporte no limite da resposta linear). Essa generalização foi formulada por Landau e é conhecida como a teoria do líquido de Fermi (líquido, porque inclui as interações). Ela será estudada com mais detalhe nos futuros capítulos.

Agora queremos analisar o caso degenerado em equilíbrio, no caso simples de

$$\epsilon_0(\vec{p}) = \frac{p^2}{2m} = \epsilon(\vec{p}),$$

onde a energia é toda cinética e não depende do spin.

A condição de forte degeneração é

$$e^{\beta(\mu - \epsilon_j)} \gg 1,$$

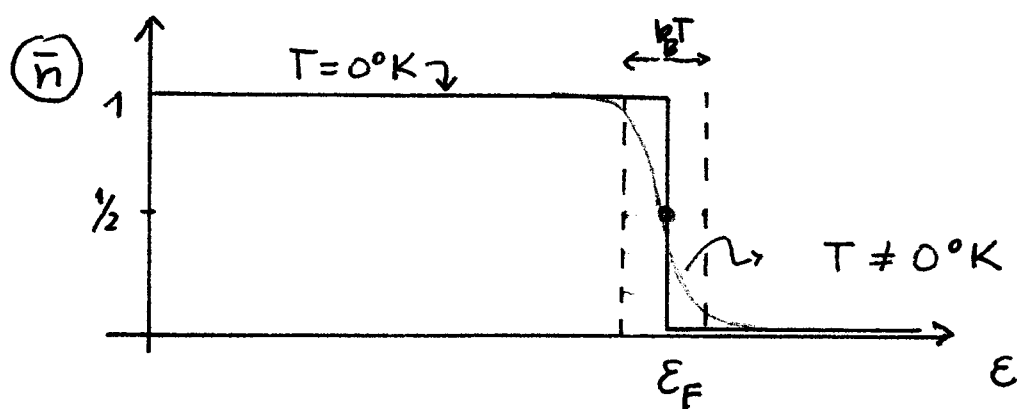
ou equivalentemente $\frac{\mu}{k_B T} = \beta \mu \gg 1$ (μ não depende do spin)

► Def. Energia de Fermi, E_F

É o potencial químico no limite altamente degenerado

$$\mu \rightarrow E_F = \lim_{T \rightarrow 0} \mu(T) = \mu_0$$

Neste limite, a distribuição de Fermi-Dirac tem a forma de um degrau, com todos os estados ocupados abaixo de E_F e todos desocupados acima de E_F :



► Def. Esfera de Fermi
Região do espaço de momentum com
 $\frac{p^2}{2m} < E_F$

► Def. Superfície de Fermi
Superfície no espaço de momentum com
 $\frac{p^2}{2m} = E_F$

Ela separa os estados ocupados dos estados desocupados a temperatura nula (ou para $k_B T \ll E_F$)

• Def. Momentum de Fermi

ϵ' o momentum correspondente à superfície de Fermi

$$p_F \equiv \sqrt{2m\epsilon_F}$$

Os estados ativos, que podem trocar os números de ocupação facilmente, se encontram perto da superfície de Fermi

$$|\epsilon_F - \epsilon| \sim k_B T$$

Calculamos as grandezas físicas no limite $T \rightarrow 0^\circ K$ (alta degeneração):

$$\bar{n} = \sum_{\sigma=\pm} \bar{n}_\sigma = 2 \int_{p < p_F} \frac{d^3 p}{h^3} = 2 \frac{4\pi}{3} \frac{p_F^3}{h^3}$$

$$\bar{n} = \frac{8}{3} \frac{\pi}{h^3} (2m\mu_0)^{3/2} \Rightarrow \mu_0 \sim \bar{n}^{2/3}$$

$$\bar{g} = \sum_{\sigma=\pm} \int_{p < p_F} \frac{d^3 p}{h^3} \vec{p} = 0$$

$$\bar{\epsilon} = 2 \int_{p < p_F} \frac{d^3 p}{h^3} \frac{p^2}{2m} = \frac{4\pi}{mh^3} \int_0^{p_F} p^4 dp$$

$$= \frac{4}{5} \frac{\pi}{mh^3} p_F^5 = \frac{4\pi}{5mh^3} (2m\mu_0)^{5/2}$$

$$\bar{\epsilon} = \frac{\bar{E}}{V} = \frac{8\pi}{5h^3} (2m)^{3/2} \mu_0^{5/2} = \frac{3}{5} \bar{n} \mu_0$$

Quando $T \rightarrow 0^\circ\text{K}$, a densidade de partículas e a densidade de energia vão para valores fixos.

Comparar com o caso clássico: a energia por unidade de volume é proporcional a $\bar{n} k_B T \rightarrow 0$, para $T \rightarrow 0^\circ\text{K}$.
Para férmions temos:

$$\frac{\bar{E}}{V} = \frac{3}{5} \bar{n} \mu_0 \left\{ 1 + \text{cte.} \left(\frac{k_B T}{\mu_0} \right)^2 + \dots \right\} \quad (1)$$

$$\bar{E} = \frac{\bar{E}}{V} \rightarrow \frac{3}{5} \bar{n} \mu_0, \text{ para } T \rightarrow 0^\circ\text{K}.$$

Calculamos agora a pressão:

$$P = \sum_{\sigma=\pm} \int \frac{d^3p}{h^3} k_B T \ln [1 + \exp \beta(\mu - \epsilon_{\vec{p}})]$$

$$\text{Seja } \epsilon_{\vec{p}} > \mu \Rightarrow e^{\beta(\mu - \epsilon_{\vec{p}})} \xrightarrow{T \rightarrow 0^\circ\text{K}} 0$$

$$\text{Seja agora } \epsilon_{\vec{p}} < \mu \text{ e } T \approx 0^\circ\text{K} \Rightarrow e^{\beta(\mu - \epsilon_{\vec{p}})} \gg 1$$

$$\begin{aligned} k_B T \ln [1 + e^{\beta(\mu - \epsilon_{\vec{p}})}] &\approx k_B T \ln e^{\beta(\mu - \epsilon_{\vec{p}})} \\ &= \mu - \epsilon_{\vec{p}} \end{aligned}$$

Temos então: ($T \rightarrow 0^\circ\text{K}$)

$$P = 2 \int_{p < p_F} \frac{d^3p}{h^3} (\mu_0 - \epsilon_{\vec{p}}) = \mu_0 \bar{n} - \frac{3}{5} \mu_0 \bar{n} = \frac{2}{5} \mu_0 \bar{n} \quad (2)$$

Essa última relação pode ser também obtida com a ajuda do grande potencial termodinâmico:

$$\Omega = U - ST - \mu \bar{N} = -PV$$

$$\begin{aligned} d\Omega &= -d(PV) = -SdT - PdV - \bar{N}d\mu \\ &= -VdP - PdV \end{aligned}$$

$$\Rightarrow VdP = SdT + \bar{N}d\mu$$

$$dP = \frac{S}{V} dT + \bar{n} d\mu$$

Tomando derivada para temperatura constante:

$$\left(\frac{dP}{d\mu} \right)_T = \bar{n}$$

Essa última pode ser integrada para $T = 0^\circ \text{K}$

$$\begin{aligned} P &= \int_0^{\mu_0} d\mu \bar{n} = \frac{8\pi}{3h^3} (2m)^{3/2} \int_0^{\mu_0} d\mu \mu^{3/2} \\ &= \frac{2}{5} \mu_0 \bar{n}, \end{aligned}$$

Supondo que $P = 0$ para $\mu = 0$.

Discussão dos resultados (1) e (2):

No caso clássico, tanto a energia como o produto PV são da ordem de $\bar{N} k_B T$ e se anulam no limite $T \rightarrow 0^\circ \text{K}$. Quando o sistema vai para temperatura

nula, a energia cinética é reduzida e a pressão e a energia vão para zero. Num sistema de férmions degenerado isso não é possível por causa do Princípio de Exclusão, e mesmo a temperatura nula teremos estados de energia cinética alta (da ordem de μ_0). Assim

$$\bar{E} \sim \bar{N} \mu_0, \quad PV \sim \bar{N} \mu_0$$

Essa energia (ou pressão) é muito grande e faz o metal muito resistente a efeitos de compressão, dando muita estabilidade ao sistema.

§ Densidade de Estados de um gás de elétrons (dívida anterior).

Frequentemente, no limite termodinâmico, queremos substituir uma soma sobre os números quânticos por uma integral sobre a energia:

$$\sum_{\sigma, \vec{p}} g_{\sigma}(\vec{p}) \longrightarrow \int dE \mathcal{D}(E) g(E).$$

Isso pode ser feito se tivermos a densidade de estados $\mathcal{D}(E)$.

$$\mathcal{D}(E) dE = dN : \# \text{ de estados no intervalo } (E, E+dE)$$

A relação de dispersão:

$$E = E(\vec{p}) = \text{cte.},$$

define uma superfície no espaço $\vec{p}$.

Exemplo: $\frac{p^2}{2m} = E = \text{cte.}$

define a superfície de uma esfera de raio $\sqrt{2mE}$

Portanto, todos os estados no intervalo $(E, E + dE)$ estão no espaço $\vec{p}$ entre duas superfícies $E = \text{cte.}$ e $E + dE = \text{cte.}$

Seja $\partial\Lambda(E)$ o volume dessa região. Temos então:

$$d\mathcal{N} = \mathcal{Q}(E)dE = \sum_{\vec{r}=\pm} \int_{\partial\Lambda(E)} \frac{L^3}{h^3} d^3p$$

$\partial\Lambda(E)$ é uma camada 'fina' de largura infinitesimal.

Tomando coordenadas na superfície $E(\vec{p}) = E$ escreveremos

$$d^3p = dS_E \cdot dp_{\perp}, \text{ com } dS_E \text{ um elemento de superfície e } dp_{\perp} \text{ é a 'distância' perpendicular entre as superfícies } E = \text{cte} \text{ e } E + dE = \text{cte.}$$

Também temos: $dE = \nabla_{\vec{p}} E \cdot d\vec{p} = |\nabla_{\vec{p}} E| dp_{\perp}$

$$\Rightarrow d^3p = dS_E \cdot dp_{\perp} = \frac{dS_E \cdot dE}{|\nabla_{\vec{p}} E|},$$

ou

$$\begin{aligned} d\mathcal{N} = \mathcal{Q}(E)dE &= \sum_{\vec{r}=\pm} \int_{\partial\Lambda(E)} \frac{L^3}{h^3} d^3p = \\ &= 2 \int_{E=\text{cte}} \frac{L^3}{h^3} \frac{dS_E}{|\nabla_{\vec{p}} E|} dE \end{aligned}$$

Obtemos a fórmula para de densidade de estados:

$$D(E) = \underbrace{2}_{\text{spin}} \left(\frac{L^3}{h^3} \right) \int_{E(\vec{p})=E} \frac{dS_E}{|\nabla_{\vec{p}} E|},$$

isto é, ela é expressa por uma integral de superfície

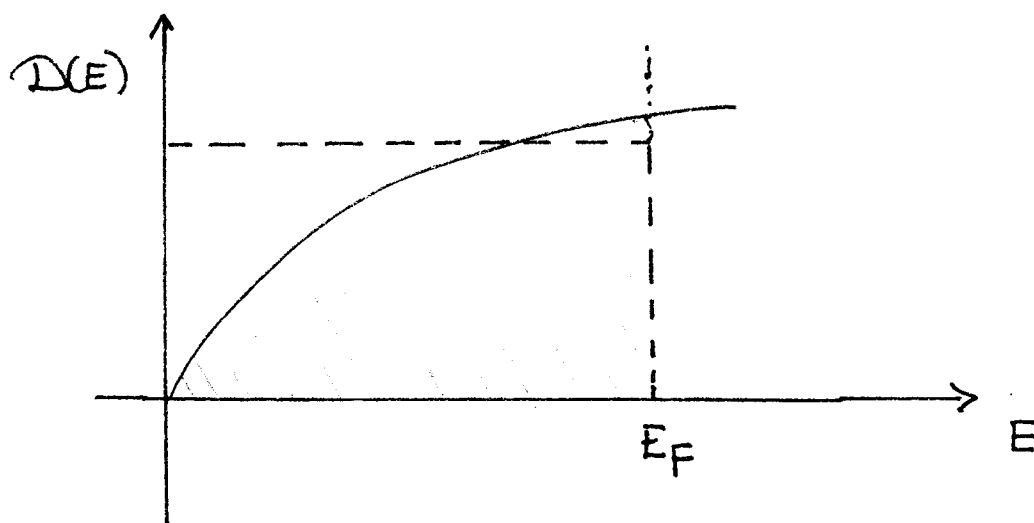
Ex: caso de elétrons livres

$$E(\vec{p}) = \frac{p^2}{2m}, \quad |\nabla_{\vec{p}} E| = \frac{p}{m} = \frac{\sqrt{2mE}}{m}$$

Temos que integrar (uma constante) sobre a superfície de uma esfera de raio $\sqrt{2mE}$. Assim:

$$D(E) = 2 \frac{V}{h^3} \frac{m}{\sqrt{2mE}} \times 4\pi (\sqrt{2mE})^2$$

$$D(E) = \frac{4\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \sqrt{E}$$



Calcular agora a densidade de partículas a $T=0^\circ\text{K}$

$$\bar{N} = \sum_{\sigma, \vec{p}} \bar{n}_{\sigma}(\vec{p}) = \int_0^{\infty} dE D(E) \bar{n}(E)$$

para $T=0^\circ\text{K}$

$$\begin{aligned}\bar{N} &= \int_0^{E_F} dE \mathcal{Q}(E) \cdot 1 = \frac{4\pi V (2m)^{3/2}}{h^3} \frac{2}{3} E_F^{3/2} \\ &= \frac{8\pi V}{3 h^3} (2m)^{3/2} \frac{p_F^3}{(2m)^{3/2}} = \frac{8\pi V}{3} \left(\frac{p_F^3}{h^3} \right)\end{aligned}$$

e obtendo:

$$\bar{n} = \frac{\bar{N}}{V} = \frac{8\pi}{3} \frac{p_F^3}{h^3},$$

como antes.

Queremos calcular agora a capacidade calórica de um gás de Fermi-Dirac altamente degenerado, isto é queremos mostrar como obter a relação (1) da pag. 151

Para $x = e^{\beta\mu} \gg 1$, escrevemos:

$$\bar{N} = \int_0^{\infty} d\varepsilon \mathcal{D}(\varepsilon) \frac{e^{-\beta\varepsilon}}{x^{-1} + e^{-\beta\varepsilon}} = \int_0^{\infty} d\varepsilon \frac{\mathcal{D}(\varepsilon)}{x^{-1} e^{\beta\varepsilon} + 1},$$

e para a energia interna:

$$E = \int_0^{\infty} d\varepsilon \mathcal{D}(\varepsilon) \frac{\varepsilon e^{-\beta\varepsilon}}{x^{-1} + e^{-\beta\varepsilon}} = \int_0^{\infty} d\varepsilon \frac{\varepsilon \mathcal{D}(\varepsilon)}{x^{-1} e^{\beta\varepsilon} + 1}.$$

Para o 'ponto zero' do gás de Fermi ($T = 0^\circ\text{K}$), temos as relações:

$$\mu_0 = \varepsilon_F = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{3\bar{N}}{\pi V} \right)^{2/3}$$

$$E_0 = \frac{3}{5} \bar{N} \varepsilon_F$$

► Def. Temperatura de Fermi

$$T_F \equiv \frac{\varepsilon_F}{k_B}$$

A distribuição é degenerada a temperaturas bastante abaixo da temperatura de Fermi. Tipicamente $T_F \sim 10^4^\circ\text{K}$, portanto um gás de férmions é altamente degenerado mesmo a temperatura ambiente. A distribuição de Fermi varia de maneira apreciável só numa região de largura $\Delta \sim 2k_B T$ em torno do nível de Fermi ε_F . É aí que se localizam as excitações do sistema. A energia dessas excitações é da ordem de

$k_B T$, de modo que a energia total a temperatura T pode ser escrita como:

$$E = E_0 + \frac{\gamma}{2} T^2 \quad (\text{como em (1)}), \quad T \ll T_F.$$

Portanto a capacidade calórica eletrônica será proporcional a T :

$$C_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_v = \gamma T$$

► Def. Constante de Sommerfeld
 γ

Veremos que γ é proporcional à densidade de estados na energia de Fermi.

Em forma geral, queremos estudar integrais da forma:

$$I = \int_0^{\infty} d\epsilon \frac{F(\epsilon)}{x^{-1} e^{\beta \epsilon} + 1} = \int_0^{\infty} d\epsilon \frac{F(\epsilon)}{\exp[\beta(\epsilon - \mu)] + 1},$$

no regime $(\mu/k_B T) \gg 1$ e $x = \exp \beta \mu \gg 1$. Descreveremos uma técnica geral para avaliar essas integrais:

$$I = \int_0^{\mu} d\epsilon \frac{F(\epsilon)}{\exp[\beta(\epsilon - \mu)] + 1} + \int_{\mu}^{\infty} d\epsilon \frac{F(\epsilon)}{\exp[\beta(\epsilon - \mu)] + 1}.$$

Na primeira integral, usamos a identidade:

$$\frac{1}{e^z + 1} = 1 - \left\{ 1 - \frac{1}{e^z + 1} \right\} = 1 - \frac{e^z}{e^z + 1}$$

$$= 1 - \frac{1}{e^{-z} + 1}$$

dai

$$I_1 \equiv \int_0^\mu d\epsilon \frac{F(\epsilon)}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1} = \int_0^\mu d\epsilon F(\epsilon) - \int_0^\mu d\epsilon \frac{F(\epsilon)}{e^{-\beta(\epsilon-\mu)} + 1}$$

e na segunda integral usamos a mudança de variável

$$z \equiv \beta(\mu - \epsilon) \Rightarrow d\epsilon = -k_B T dz$$

$$I_1 = \int_0^\mu d\epsilon F(\epsilon) + k_B T \int_{\beta\mu}^0 dz \frac{F(\mu - k_B T z)}{e^z + 1}$$

$$= \int_0^\mu d\epsilon F(\epsilon) - k_B T \int_0^{\beta\mu} dz \frac{F(\mu - k_B T z)}{e^z + 1}$$

e no regime fortemente degenerado, podemos substituir

$$\beta\mu \rightarrow \infty$$

$$I_1 \approx \int_0^\mu d\epsilon F(\epsilon) - k_B T \int_0^\infty dz \frac{F(\mu - k_B T z)}{e^z + 1}$$

Seja agora:

$$I_2 \equiv \int_\mu^\infty d\epsilon \frac{F(\epsilon)}{\exp[\beta(\epsilon-\mu)] + 1}$$

Aqui usamos a mudança de variável:

$$z \equiv \beta(\epsilon - \mu), \quad k_B T dz = d\epsilon$$

$$\epsilon = \mu + k_B T z$$

$$I_2 = \int_0^{\infty} dz \frac{F(\mu + k_B T z)}{e^z + 1}.$$

Assim, a integração de I fica:

$$I = \int_0^{\mu} d\varepsilon F(\varepsilon) + k_B T \int_0^{\infty} dz \frac{F(\mu + k_B T z) - F(\mu - k_B T z)}{e^z + 1}.$$

O numerador da segunda integral é expandido em série de Taylor em z e integramos termo a termo a série:

$$\begin{aligned} F(\mu + k_B T z) - F(\mu - k_B T z) &\equiv \Delta F \\ &= \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{1}{\nu!} (k_B T)^{\nu} z^{\nu} F^{(\nu)}(\mu) - \\ &\quad - \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{1}{\nu!} (-1)^{\nu} (k_B T)^{\nu} z^{\nu} F^{(\nu)}(\mu). \end{aligned}$$

Os termos pares se cancelam. Ficamos com 2 vezes a soma dos termos ímpares

$$\Delta F = 2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k+1)!} (k_B T)^{2k+1} z^{2k+1} F^{(2k+1)}(\mu).$$

$F^{(\nu)}(\mu)$ é a derivada de ordem ν de $F(z)$ avaliada em $z = \mu$. Temos que resolver ainda as integrais

$$J_k \equiv \int_0^{\infty} dz \frac{z^{2k+1}}{e^z + 1} = \int_0^{\infty} dz \frac{e^{-z} z^{2k+1}}{e^{-z} + 1}$$

Expandindo em série (de Taylor):

$$\frac{1}{e^{-z} + 1} = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n e^{-nz},$$

$$J_k = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \int_0^{\infty} dz \underbrace{e^{-(n+1)z} z^{2k+1}}_{\frac{\Gamma'(2k+2)}{(n+1)^{2k+2}}}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(n+1)^{2k+2}} (2k+1)!$$

$$= (2k+1)! \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n^{2k+2}}$$

$$= (2k+1)! [1 - 2^{1-(2k+2)}] \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{2k+2}}$$

$$= (2k+1)! [1 - 2^{-(2k+1)}] \zeta(2k+2)$$

$$J_k = (2k+1)! \left[1 - \frac{1}{2^{(2k+1)}} \right] \zeta(2k+2)$$

Primeiros valores da função 'Zeta de Riemann':

$$\zeta(2) = \frac{\pi^2}{6}, \quad \zeta(4) = \frac{\pi^4}{90}, \quad \dots$$

Escreveremos o resultado final para I:

$$I = \int_0^{\mu} d\epsilon F(\epsilon) + 2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(k_B T)^{2k+2}}{(2k+1)!} F^{(2k+1)}(\mu) \cdot \cancel{(2k+1)!} \times \\ \times \left[1 - \frac{1}{2^{2k+1}} \right] \zeta(2k+2)$$

Para os primeiros termos obtemos:

$$I = \int_0^{\mu} d\epsilon F(\epsilon) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 F^{(1)}(\mu) + \frac{7\pi^4}{360} (k_B T)^4 F^{(2)}(\mu) + \dots$$

e em geral:

$$I = \int_0^{\mu} d\epsilon F(\epsilon) + \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{2^{2k+1} - 1}{2^{2k}} \right) \zeta(2k+2) F^{(2k+1)}(\mu) (k_B T)^{2k+2}$$

Aplicamos para as grandezas de interesse:

$$\bar{N} = \int_0^{\mu} d\epsilon \mathcal{D}(\epsilon) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \mathcal{D}'(\mu)$$

A temperatura nula temos $\bar{N} = \int_0^{\mu_0 = \epsilon_F} d\epsilon \mathcal{D}(\epsilon)$

$$\int_0^{\mu} d\epsilon \mathcal{D}(\epsilon) = \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \mathcal{D}(\epsilon) + \int_{\epsilon_F}^{\mu} d\epsilon \mathcal{D}(\epsilon)$$

$$\approx \bar{N} + (\mu - \epsilon_F) \mathcal{D}(\epsilon_F)$$

Assim temos:

$$\bar{N} \simeq \bar{N} + (\mu - \epsilon_F) \mathcal{D}(\epsilon_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \mathcal{D}'(\epsilon_F) + \dots$$

que fornece:

$$(\mu - \epsilon_F) \mathcal{D}(\epsilon_F) = - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \mathcal{D}'(\epsilon_F)$$

ou

$$\mu = \epsilon_F - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{\mathcal{D}'(\epsilon_F)}{\mathcal{D}(\epsilon_F)},$$

que dá a primeira correção com a temperatura do potencial químico.

Para a energia E , a função $F(\epsilon) = \epsilon \mathcal{D}(\epsilon)$, logo

$F'(\epsilon) = \mathcal{D}(\epsilon) + \epsilon \mathcal{D}'(\epsilon)$. Também:

$$\int_0^{\mu} d\epsilon \epsilon \mathcal{D}(\epsilon) = \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \epsilon \mathcal{D}(\epsilon) + \int_{\epsilon_F}^{\mu} d\epsilon \epsilon \mathcal{D}(\epsilon)$$

$$\simeq E_0 + (\mu - \epsilon_F) \epsilon_F \mathcal{D}(\epsilon_F).$$

Obtemos:

$$E = E_0 + (\mu - \epsilon_F) \epsilon_F \mathcal{D}(\epsilon_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 [\mathcal{D}(\epsilon_F) + \epsilon_F \mathcal{D}'(\epsilon_F)]$$

$$\simeq E_0 - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \epsilon_F \mathcal{D}'(\epsilon_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 [\mathcal{D}(\epsilon_F) + \epsilon_F \mathcal{D}'(\epsilon_F)]$$

$$E = E_0 + \frac{1}{2} \left[\frac{\pi^2}{3} \mathcal{D}(\epsilon_F) k_B^2 \right] T^2 = E_0 + \frac{1}{2} \gamma T^2$$

de onde obtemos a constante de Sommerfeld:

$$\gamma = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 \mathcal{D}(\epsilon_F)$$

Para a capacidade calorífica:

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V = \gamma T = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 D(E_F) T$$

$$= \frac{\pi^2}{3} k_B^2 \cdot \frac{4\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \sqrt{E_F} T,$$

com

$$\bar{N} = V \frac{8\pi}{3} \left(\frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} E_F \sqrt{E_F},$$

$$\frac{\bar{N}}{2E_F} = \frac{4\pi V}{3} \left(\frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} \sqrt{E_F},$$

obtemos:

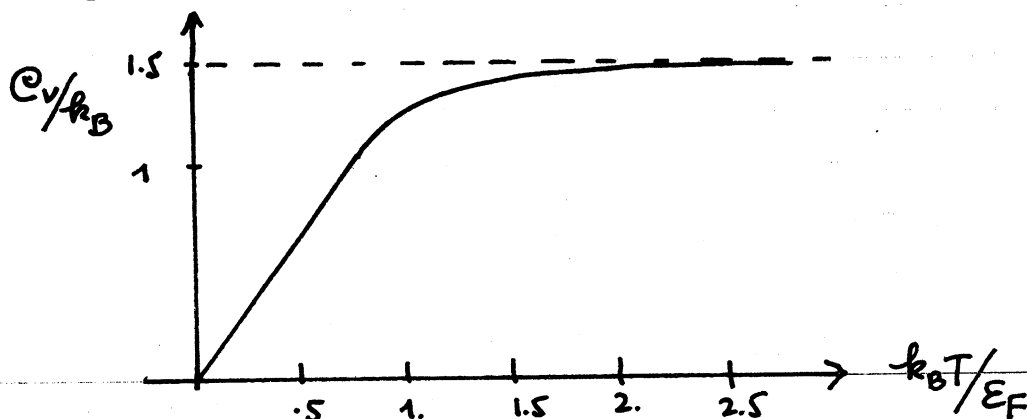
$$C_V = \pi^2 k_B^2 \frac{\bar{N}}{2E_F} T,$$

e para o calor específico

$$\frac{C_V}{k_B} = \frac{C_V}{\bar{N} k_B} = \frac{1}{2} \pi^2 \left(k_B T / E_F \right),$$

e como $(k_B T / E_F) \ll 1$, esse valor é muito pequeno comparado com o valor $\frac{3}{2}$ para o calor específico de um gás

clássico:



As funções de Fermi-Dirac são definidas pelas séries para $x = e^{\beta\mu} \ll 1$

$$F_n(x) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^{m+1}}{m^n} x^m.$$

Elas podem ser obtidas pela expansão das integrais seguintes

$$\frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^{\infty} dt \frac{t^{n-1} x e^{-t}}{1 + x e^{-t}}, \quad (*)$$

integradas termo a termo para $x \ll 1$. Percebemos que as integrais (*) podem ser pensadas como prolongamento analítico para x arbitrário. Escreveremos então:

Def. Prolongamento analítico de $F_n(x)$:

$$F_n(x) \equiv \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^{\infty} dt \frac{t^{n-1} x e^{-t}}{1 + x e^{-t}} \quad (1)$$

O método de Sommerfeld pode ser aplicado agora para obter expansões assintóticas de $F_n(x)$ para $x \gg 1$ (alta degeneração). Ilustramos o método, repetindo a dedução de Sommerfeld.

Para $x \gg 1$, escrevemos $\xi \equiv \ln x \Leftrightarrow x = e^{\xi}$

X

Escrever também $g(t) \equiv t^{n-1}$, para maior generalidade. Assim:

$$\begin{aligned}\Gamma(n) F_n(e^\xi) &= \int_0^\infty dt \frac{g(t) e^\xi e^{-t}}{1 + e^\xi e^{-t}} \\&= \int_0^\infty dt g(t) \frac{1}{e^{t-\xi} + 1} \\&= \underbrace{\int_0^\xi dt g(t) \frac{1}{\exp(t-\xi) + 1}}_{I_1} + \underbrace{\int_\xi^\infty dt \frac{g(t)}{\exp(t-\xi) + 1}}_{I_2}\end{aligned}$$

Para a integral I_1 , usamos a identidade:

$$\begin{aligned}\frac{1}{\exp(t-\xi) + 1} &= \frac{e^{\xi-t}}{e^{\xi-t} + 1} + \frac{1}{e^{\xi-t} + 1} - \frac{1}{\exp(\xi-t) + 1} \\&= 1 - \frac{1}{1 + \exp(\xi-t)}\end{aligned}$$

implicando em:

$$I_1 = \int_0^\xi dt g(t) - \int_0^\xi dt \frac{g(t)}{1 + \exp(\xi-t)}$$

XI

Na 2ª integral mudamos a variável de integração:

$$z \equiv \xi - t \Rightarrow dt = -dz$$

$$t = \xi - z$$

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_0^{\xi} dt g(t) + \int_{\xi}^0 dz \frac{g(\xi - z)}{1 + e^z} \\ &= \int_0^{\xi} dt g(t) - \int_0^{\xi} dz \frac{g(\xi - z) e^{-z}}{1 + e^{-z}} \end{aligned}$$

No regime altamente degenerado, $\xi \gg 1$ e por causa da cauda da distribuição de Fermi para $z \rightarrow \infty$, podemos, com muita exatidão, trocar o limite superior $\xi \rightarrow \infty$:

$$I_1 \approx \int_0^{\xi} dt g(t) - \int_0^{\infty} dz \frac{g(\xi - z) e^{-z}}{1 + e^{-z}}$$

Passamos agora para I_2 , com a mudança de variável $t - \xi = z \Rightarrow dt = dz$, $t_1 = \xi + z$

$$I_2 = \int_0^{\infty} dz \frac{g(\xi + z) e^{-z}}{1 + e^{-z}}$$

Resultado:

XII

$$\Gamma(m) F_m(e^\xi) = \int_0^\xi dz g(z) + \int_0^\infty dz \frac{[g(\xi+z) - g(\xi-z)]}{1+e^{-z}} \cdot e^{-z}$$

Expandindo em série a diferença:

$$\begin{aligned} \Delta g &\equiv g(\xi+z) - g(\xi-z) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{[1-(-1)^\nu]}{\nu!} g^{(\nu)}(\xi) z^\nu \\ &= 2 \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{(2m+1)!} g^{(2m+1)}(\xi) z^{2m+1}, \end{aligned}$$

pois os termos pares se cancelam. Dada a 'boa' convergência da série, pode ser integrada termo a termo:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dz \Delta g \frac{e^{-z}}{1+e^{-z}} &= 2 \sum_{m=0}^{\infty} \frac{g^{(2m+1)}(\xi)}{(2m+1)!} \int_0^\infty dz \frac{z^{2m+1} e^{-z}}{1+e^{-z}} \\ &= 2 \sum_{m=0}^{\infty} \frac{g^{(2m+1)}(\xi)}{(2m+1)!} J_m \end{aligned}$$

Como antes temos:

$$J_m = (2m+1)! \left(1 - \frac{1}{2^{2m+1}}\right) \zeta(2m+2),$$

onde $\zeta(z)$ é a função 'Zeta' de Riemann.

Resultado:

$$\int_0^{\infty} dz \frac{\Lambda g e^{-z}}{1+e^{-z}} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{g^{(2m+1)}(\xi)}{(2m+1)!} (2m+1)! \left(2 - \frac{1}{2^{2m}}\right) \zeta(2m+2)$$

e finalmente:

$$F_m(e^{\xi}) \Gamma(n) = \int_0^{\xi} dz g(z) + \sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{2^{2m+1}-1}{2^{2m}} \right) \zeta(2m+2) \cdot g^{(2m+1)}(\xi)$$

ou

$$F_m(e^{\xi}) = \frac{1}{\Gamma(n)} \left\{ \int_0^{\xi} dz g(z) + \sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{2^{2m+1}-1}{2^{2m}} \right) \zeta(2m+2) g^{(2m+1)}(\xi) \right\}$$

Usamos agora a forma explícita $g(z) = z^{n-1}$

$$g^{(1)}(\xi) = (n-1) \xi^{n-2}, \quad g^{(3)}(\xi) = (n-1)(n-2)(n-3) \xi^{n-4},$$

.... e derivadas de ordem superior:

$$F_m(e^{\xi}) = \frac{1}{\Gamma(n)} \left\{ \frac{\xi^n}{n} + \sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{2^{2m+1}-1}{2^{2m}} \right) \zeta(2m+2) g^{(2m+1)}(\xi) \right\},$$

com os valores $\zeta(2) = \frac{\pi^2}{6}$, $\zeta(4) = \frac{\pi^4}{90}$, ...

O resultado é uma série assintótica em $\ln x = \xi$:

$$F_m(x) = \frac{1}{\Gamma(m)} \left\{ \frac{\ln x}{m} + \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{2^{2n+1}-1}{2^{2n}} \right) \zeta(2n+2) g^{(2n+1)}(\ln x) \right\}$$

► Exemplos. Na equação de estado temos a participação de $F_{3/2}(x)$ e $F_{5/2}(x)$

$$\begin{aligned} F_{3/2}(x) &= \frac{1}{\Gamma(3/2)} \left\{ \frac{2}{3} \ln x^{3/2} + \zeta(2) \cdot \frac{1}{2} \ln x^{-1/2} + \right. \\ &\quad \left. + \zeta(4) \frac{7}{4} \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{2}\right) \left(-\frac{3}{2}\right) \ln x^{-5/2} \dots \right\} \\ &= \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \ln x^{3/2} \left\{ 1 + \frac{\pi^2}{8} \frac{1}{\ln x^2} + \frac{3\pi^4}{290} \times \frac{21}{32} \left(\frac{1}{\ln x}\right)^4 \dots \right\} \end{aligned}$$

$$F_{3/2}(x) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \ln x^{3/2} \left\{ 1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{1}{\ln x}\right)^2 + \frac{7\pi^4}{640} \left(\frac{1}{\ln x}\right)^4 \dots \right\}$$

Para $F_{5/2}(x)$ temos:

$$F_{5/2}(x) = \frac{1}{\Gamma(5/2)} \left\{ \frac{2}{5} \ln x^{5/2} + \frac{\pi^2}{6} \cdot \frac{3}{2} \ln x^{1/2} \dots \right\}$$

$$= \frac{2}{5} \cdot \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \ln x^{5/2} \left\{ 1 + \frac{\pi^2}{62} \times \frac{5}{2} \times \frac{3}{2} \ln x^{-2} + \dots \right\}$$

$$F_{5/2}(x) = \frac{8}{15\sqrt{\pi}} \ln x^{5/2} \left\{ 1 + \frac{5\pi^2}{8} \left(\frac{1}{\ln x} \right)^2 + \dots \right\} \quad \overline{xv}$$

Temos as equações:

$$\begin{cases} \bar{n} = \frac{2}{\Lambda^3} F_{3/2}(x), \\ \frac{P}{k_B T} = \frac{2}{\Lambda^3} F_{5/2}(x), \end{cases} \quad \text{com } \ln x = \frac{\mu}{k_B T}$$

Da 1ª, obtemos:

$$\frac{1}{2} \bar{n} \Lambda^3 = F_{3/2}(x) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \ln x^{3/2} \left\{ 1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{k_B T}{\mu} \right)^2 \dots \right\}$$

$$\ln x^{3/2} = \frac{3\sqrt{\pi}}{8} (\bar{n} \Lambda^3) / \left(1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{k_B T}{\mu} \right)^2 \dots \right)$$

$$\approx \frac{3\sqrt{\pi}}{8} (\bar{n} \Lambda^3) \left\{ 1 - \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{k_B T}{\mu} \right)^2 \dots \right\}$$

$$\left(\frac{\mu}{k_B T} \right)^{3/2} \approx \frac{3\sqrt{\pi}}{8} \bar{n} \left(\frac{h^2}{2\pi m k_B T} \right)^{3/2} \left\{ 1 - \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{k_B T}{\mu} \right)^2 \dots \right\}$$

$$\mu^{3/2} \approx \frac{3\sqrt{\pi}}{8} \bar{n} \left(\frac{h^2}{2\pi m} \right)^{3/2} \left\{ 1 - \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{k_B T}{\mu} \right)^2 \dots \right\}$$

XVI

$$\mu^{3/2} \approx \frac{3\sqrt{\pi}}{8} \frac{8\pi}{3h^3} (2m\epsilon_F)^{3/2} \frac{1}{(2\pi m)^{3/2}} \left\{ 1 - \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{k_B T}{\epsilon_F} \right)^2 \right\}$$

$$\approx \epsilon_F^{3/2} \left\{ 1 - \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{k_B T}{\epsilon_F} \right)^2 \dots \right\},$$

portanto :

$$\mu \approx \epsilon_F \left\{ 1 - \frac{2}{3} \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{k_B T}{\epsilon_F} \right)^2 \dots \right\}$$

$$\boxed{\mu \approx \epsilon_F \left\{ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{\epsilon_F} \right)^2 \dots \right\}}$$

Para a equação de estado :

$$\frac{P}{\bar{n} k_B T} = \frac{F_{5/2}(x)}{F_{3/2}(x)}$$

$$= \frac{\frac{2}{5} \times \frac{1}{3\sqrt{\pi}}}{\frac{15\sqrt{\pi}}{5}} \ln x \frac{\left[1 + \frac{5\pi^2}{8} \left(\frac{1}{\ln x} \right)^2 \dots \right]}{\left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{1}{\ln x} \right)^2 \dots \right]}$$

$$= \frac{2}{5} \frac{\mu}{k_B T} \left\{ 1 + \frac{\pi^2}{2} \left(\frac{1}{\ln x} \right)^2 \dots \right\}$$

$$\Rightarrow P = \frac{2}{5} \bar{n} \mu \left\{ 1 + \frac{\pi^2}{2} \left(\frac{1}{\ln x} \right)^2 \dots \right\},$$

e em ordem mais baixa:

$$P = \frac{2}{5} \bar{n} \epsilon_F \left\{ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{\epsilon_F} \right)^2 \dots \right\} \left\{ 1 + \frac{\pi^2}{2} \left(\frac{k_B T}{\epsilon_F} \right)^2 \dots \right\}$$

$$P = \frac{2}{5} \bar{n} \epsilon_F \left\{ 1 + \frac{5}{12} \pi^2 \left(\frac{k_B T}{\epsilon_F} \right)^2 \dots \right\}$$

Como é satisfeita a relação:

$$\bar{E} = \mathcal{U} = \frac{3}{2} P V$$

Temos:

$$\bar{E} = \mathcal{U} = \frac{3}{5} \bar{N} \epsilon_F \left\{ 1 + \frac{5}{12} \pi^2 \left(\frac{k_B T}{\epsilon_F} \right)^2 \dots \right\}$$

e para a capacidade calorífica C_V :

$$C_V = \left(\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial T} \right)_V = \frac{1}{5} \bar{N} \epsilon_F \cdot \frac{5}{2} \pi^2 \frac{k_B^2}{\epsilon_F^2} T = \gamma T,$$

obtendo para a constante de Sommerfeld:

$$\gamma = \frac{1}{2} \pi^2 \bar{N} \frac{k_B^2}{\epsilon_F} = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 D(\epsilon_F).$$