

5. Gases ideales cuánticos: Gas de Fermi-Dirac



Contenido: Tema 05

5. Gases ideales cuánticos: Gas de Fermi-Dirac

5.1 Gas de Fermi-Dirac

5.2 Funciones de Fermi-Dirac



Contenido: Tema 05

5. Gases ideales cuánticos: Gas de Fermi-Dirac

5.1 Gas de Fermi-Dirac

5.2 Funciones de Fermi-Dirac



Gas de Fermi-Dirac

Fundamentos

En el caso de la estadística de **Fermi-Dirac**, es decir funciones de onda **antisimétricas**, se había obtenido para la función de partición,

$$\Theta(T, V, \mu) = \prod_{k=1}^{\infty} \left[1 + \zeta e^{-\beta \epsilon_k} \right] \quad \forall \quad \zeta = e^{\beta \mu},$$

en donde el gran potencial se expresa como,

$$\Phi(T, V, \mu) = -k_B T \ln \Theta(T, V, \mu) = -k_B T \sum_k \ln (1 + \zeta e^{-\beta \epsilon_k}),$$

donde: $-pV = \Phi(T, V, \mu)$.

Para obtener la información termodinámica es necesario despejar la **fugacidad** de la expresión del **número promedio de partículas**,

$$\begin{aligned} N &= \frac{1}{\beta} \left. \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \Theta \right|_{T,V} = \frac{\partial}{\partial (\beta \mu)} \sum_k \ln (1 + \zeta e^{-\beta \epsilon_k}), \\ &= \sum_k \frac{\zeta e^{-\beta \epsilon_k}}{1 + \zeta e^{-\beta \epsilon_k}} = \sum_k \frac{1}{\zeta^{-1} e^{\beta \epsilon_k} + 1} = \sum_k \langle n_k \rangle. \end{aligned}$$

Gas de Fermi-Dirac

Fundamentos

Del resultado anterior para N , se observa que **no** existe una restricción alguna en el valor del **potencial químico**:

$$-\infty \leq \mu \leq \infty \Rightarrow 0 \leq \zeta \leq \infty \quad \forall \quad \zeta = e^{\beta\mu},$$

lo cual esta relacionado con el hecho de que μ es la energía media necesaria para añadir otra partícula al sistema, por lo que μ **crece** con el número de partículas.

Para el caso de las expresiones anteriores, se pueden describir de manera **continua**, ya que los eigenestados se encuentran muy cerca entre ellos, para un volumen grande:

$$\sum_k \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \rightarrow \int g(\epsilon) d\epsilon,$$

$$\therefore \sum_k \rightarrow \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \int \epsilon^{1/2} d\epsilon \quad \forall \quad g(\epsilon) = g_s \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \epsilon^{1/2},$$

resultados que se han obtenido considerando al **gas ideal**: $\epsilon_k = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m$, y siendo $g_s = 2s + 1$ la **degeneración** debida al espín.

Contenido: Tema 05

5. Gases ideales cuánticos: Gas de Fermi-Dirac

5.1 Gas de Fermi-Dirac

5.2 Funciones de Fermi-Dirac



Funciones de Fermi-Dirac

Función de partición

Haciendo el cambio del discreto al continuo en las expresiones de interés,

$$\begin{aligned}\ln \Theta(T, V, \mu) &= \sum_k \ln (1 + \zeta e^{-\beta \epsilon_k}) = \int d\epsilon g(\epsilon) \ln (1 + \zeta e^{-\beta \epsilon}), \\ \Rightarrow \ln \Theta(T, V, \mu) &= 2\pi V g_s \left(\frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{1/2} \ln (1 + \zeta e^{-\beta \epsilon}), \\ &= \frac{4g_s V}{3\sqrt{\pi}} \left(\frac{2m\pi k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{3/2} \zeta e^{-\beta \epsilon}}{1 + \zeta e^{-\beta \epsilon}}, \\ &= \frac{4g_s V}{3\sqrt{\pi} \lambda^3} \int_0^\infty dx \frac{x^{3/2}}{\zeta^{-1} e^x + 1} \quad \forall \quad x = \beta \epsilon, \\ \therefore \ln \Theta(T, V, \mu) &= g_s \frac{V}{\lambda^3} f_{5/2}(\zeta),\end{aligned}$$

en donde se han definido las **funciones de Fermi-Dirac** $f_r(\zeta)$:

$$f_r(\zeta) = \frac{1}{\Gamma(r)} \int_0^\infty dx \frac{x^{r-1}}{\zeta^{-1} e^x + 1} \quad \forall \quad 0 \leq \zeta \leq \infty.$$

Funciones de Fermi-Dirac

Número de partículas

Con la expresión anterior es posible calcular el **gran potencial** y la ecuación de estado pV ,

$$\Phi(T, V, \mu) = -k_B T \ln \Theta = -pV \Rightarrow \frac{pV}{k_B T} = \frac{g_s V}{\lambda^3} f_{5/2}(\zeta),$$

de donde μ se obtiene de despejar ζ de la expresión del **número de partículas**,

$$\begin{aligned} N(T, V, \mu) &= \sum_k \frac{1}{\zeta^{-1} e^{\beta \epsilon_k} + 1} = \int d\epsilon \frac{g(\epsilon)}{\zeta^{-1} e^{\beta \epsilon} + 1}, \\ \Rightarrow N(T, V, \mu) &= \frac{2g_s V}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2m\pi}{h^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{1/2}}{\zeta^{-1} e^{\beta \epsilon} + 1}, \\ &= \frac{2g_s V}{\sqrt{\pi} \lambda^3} \int_0^\infty dx \frac{x^{1/2}}{\zeta^{-1} e^x + 1} \quad \forall \quad x = \beta \epsilon, \\ \therefore N(T, V, \mu) &= g_s \frac{V}{\lambda^3} f_{3/2}(\zeta). \end{aligned}$$

Funciones de Fermi-Dirac

Comportamiento con ζ

Analizando las propiedades de las **funciones de Fermi-Dirac**,

$$f_r(\zeta) = \frac{1}{\Gamma(r)} \int_0^\infty dx \frac{x^{r-1}}{\zeta^{-1}e^x + 1},$$

considerando el caso $\zeta < 1$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\zeta^{-1}e^x + 1} &= \frac{\zeta e^{-x}}{1 + \zeta e^{-x}} \quad \forall \quad \zeta e^{-x} < 1, \\ &= \zeta e^{-x} \sum_{k=0}^{\infty} (-\zeta e^{-x})^k = \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k-1} \zeta^k e^{-xk}. \end{aligned}$$

Sustituyendo en las funciones $f_r(\zeta)$,

$$\begin{aligned} f_r(\zeta) &= \frac{1}{\Gamma(r)} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k-1} \zeta^k \int_0^\infty e^{-xk} x^{r-1} dx, \\ &= \frac{1}{\Gamma(r)} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k-1} \frac{\zeta^k}{k^r} \int_0^\infty e^{-y} y^{r-1} dy = \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k-1} \frac{\zeta^k}{k^r}. \end{aligned}$$

Funciones de Fermi-Dirac

Comportamiento con ζ

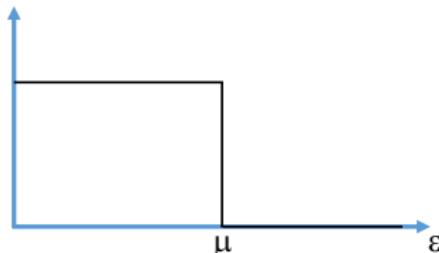
Considerando ahora el caso $\zeta > 1$:

$$\begin{aligned}f_r(\zeta) &= \frac{1}{\Gamma(r)} \int_0^\infty dx \frac{x^{r-1}}{\zeta^{-1}e^x + 1}, \\&= \frac{1}{\Gamma(r)} \int_0^\infty dx \frac{x^{r-1}}{e^{(x-y)} + 1} \quad \forall \quad \zeta = e^{\beta\mu} = e^y,\end{aligned}$$

analizando el denominador del integrando, en el caso de que $y \rightarrow \infty$,

$$\text{si } x < y \Rightarrow \frac{1}{e^{(x-y)} + 1} = \frac{1}{e^{-|x-y|} + 1} \rightarrow 1,$$

$$\text{si } x > y \Rightarrow \frac{1}{e^{(x-y)} + 1} = \frac{1}{e^{|x-y|} + 1} \rightarrow 0,$$



El comportamiento obtenido corresponde a la **función escalón**, centrada en μ , lo cual coincide con el de los **números de ocupación** $\langle n_k \rangle$ a $T = 0$.

Funciones de Fermi-Dirac

Comportamiento con ζ

Analizando el comportamiento de la función de Fermi-Dirac de manera general, para valores $y = \beta\mu \gg 1$:

$$\begin{aligned}\phi(y) &= \int_0^\infty \frac{m(x)}{e^{x-y} + 1} dx, \\ &= \int_0^y m(x) \left[1 - \frac{1}{e^{x-y} + 1} \right] dx + \int_y^\infty \frac{m(x)}{e^{x-y} + 1} dx, \\ &= \int_0^y m(x) dx - \int_0^y \frac{m(x)}{e^{y-x} + 1} dx + \int_y^\infty \frac{m(x)}{e^{x-y} + 1} dx,\end{aligned}$$

definiendo en las integrales anteriores las siguientes variables,

$$\eta = y - x \rightarrow d\eta = -dx,$$

$$\therefore \text{ si } x = 0 \rightarrow \eta = y; \quad x = y \rightarrow \eta = 0;$$

$$\gamma = x - y \rightarrow d\gamma = dx,$$

$$\therefore \text{ si } x = y \rightarrow \gamma = 0; \quad x \rightarrow \infty \rightarrow \gamma \rightarrow \infty.$$

Funciones de Fermi-Dirac

Comportamiento con ζ

Sustituyendo lo anterior en la expresión integral,

$$\begin{aligned}\phi(y) &= \int_0^y m(x)dx - \int_0^y \frac{m(x)}{e^{y-x}+1}dx + \int_y^\infty \frac{m(x)}{e^{x-y}+1}dx, \\ &= \int_0^y m(x)dx - \int_0^y \frac{m(y-\eta)}{e^\eta+1}d\eta + \int_0^\infty \frac{m(y+\gamma)}{e^\gamma+1}d\gamma, \\ &= \int_0^y m(x)dx + \int_0^\infty \frac{m(y+\eta) - m(y-\eta)}{e^\eta+1}d\eta,\end{aligned}$$

expandiendo en series el numerador de la integral, alrededor de y :

$$m(y+\eta) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left. \frac{\partial^k m}{\partial x^k} \right|_y \eta^k \quad \& \quad m(y-\eta) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left. \frac{\partial^k m}{\partial x^k} \right|_y (-\eta)^k,$$

$$\therefore m(y+\eta) - m(y-\eta) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left. \frac{\partial^k m}{\partial x^k} \right|_y \left[\eta^k - (-\eta)^k \right],$$

$$\Rightarrow m(y+\eta) - m(y-\eta) = \sum_{k=\text{impar}}^{\infty} \frac{2}{k!} \left. \frac{\partial^k m}{\partial x^k} \right|_y \eta^k.$$

Funciones de Fermi-Dirac

Comportamiento con ζ

Sustituyendo en la expresión integral,

$$\begin{aligned}\phi(y) &= \int_0^y m(x)dx + \int_0^\infty \frac{m(y+\eta) - m(y-\eta)}{e^\eta + 1} d\eta, \\ &= \int_0^y m(x)dx + 2 \sum_{k=\text{impar}}^{\infty} \frac{1}{k!} \left. \frac{\partial^k m}{\partial x^k} \right|_y \int_0^\infty \frac{\eta^k}{e^\eta + 1} d\eta.\end{aligned}$$

Analizando el comportamiento de la integral para dif. valores de k ,

$$\text{Integral} = \frac{1}{k!} \int_0^\infty \frac{\eta^k}{e^\eta + 1} d\eta,$$

k	Integral
1	$\pi^2/12 \approx 0.8225$
3	$7\pi^4/720 \approx 0.9470$
5	$31\pi^6/30240 \approx 0.9856$

se observa que la integral **tiende a 1** conforme k **crece**.

Funciones de Fermi-Dirac

Comportamiento con ζ

Considerando el caso particular de $m(x) = x^{r-1}$ para la integral de **Fermi-Dirac**,

$$f_r(\zeta) = \frac{1}{\Gamma(r)} \int_0^\infty \frac{x^{r-1}}{\zeta^{-1}e^x + 1} dx,$$

$$\therefore \Gamma(r)f_r(\zeta) = \int_0^\infty \frac{x^{r-1}}{e^{x-y} + 1} dx \quad \forall \quad e^y = \zeta,$$

$$\Rightarrow \Gamma(r)f_r(\zeta) = \int_0^y x^{r-1} dx + 2 \sum_{k=\text{impar}}^{\infty} \frac{1}{k!} \left. \frac{\partial^k (x^{r-1})}{\partial x^k} \right|_y \int_0^\infty \frac{\eta^k}{e^\eta + 1} d\eta,$$

$$= \frac{y^r}{r} + \frac{\pi^2}{6}(r-1)y^{r-2} + \dots,$$

$$\Rightarrow f_r(\zeta) = \frac{y^r}{\Gamma(r+1)} \left[1 + \frac{\pi^2}{6} \frac{r(r-1)}{y^2} + \dots \right].$$

Funciones de Fermi-Dirac

Comportamiento con ζ

Resumiendo el comportamiento de $f_r(\zeta)$,

$$\zeta < 1 \Rightarrow f_r(\zeta) = \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k-1} \frac{\zeta^k}{k^r},$$

$$\zeta > 1 \Rightarrow f_r(\zeta) = \frac{y^r}{\Gamma(r+1)} \left[1 + \frac{\pi^2}{6} \frac{r(r-1)}{y^2} + \dots \right] \quad \forall \quad \zeta = e^y.$$

Para conocer $f_r(\zeta = 1)$, se puede utilizar la primera relación:

$$\begin{aligned} f_r(1) &= \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k-1} \frac{1}{k^r} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^r} - 2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{(2k)^r}, \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^r} \left[1 - \frac{2}{2^r} \right] = \mathcal{Z}(r) \left[1 - \frac{1}{2^{r-1}} \right], \end{aligned}$$

siendo $\mathcal{Z}(r)$ la **función Zeta de Riemann**, donde algunos valores típicos de $f_r(1)$ son los siguientes:

$$f_{3/2}(1) = 0.765, \quad f_{5/2}(1) = 0.866, \quad f_{7/2}(1) = 0.9277.$$

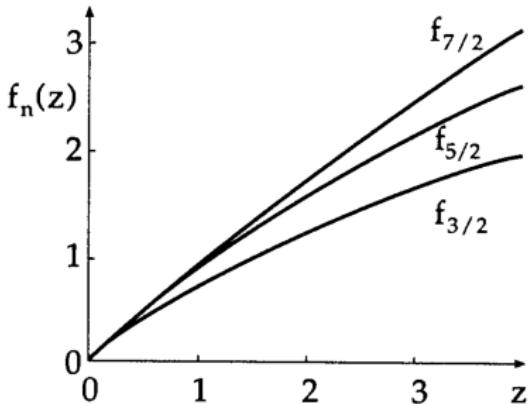
Funciones de Fermi-Dirac

Comportamiento con ζ

De los resultados anteriores, se tiene que $f_r(\zeta) > 0$, entonces junto con el comp. de la derivada,

$$\frac{\partial}{\partial \zeta} f_r(\zeta) = \frac{1}{\zeta} f_{r-1}(\zeta),$$

se concluye que $f_r(\zeta)$ crece de manera **monótona**.



Analizando el comportamiento de $f_r(\zeta)$ para valores **extremos** de ζ ,

$$\zeta \ll 1 : f_r(\zeta) = \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k-1} \frac{\zeta^k}{k^r} \Rightarrow f_r(\zeta) \approx \zeta,$$

$$\zeta \gg 1 : f_r(\zeta) = \frac{y^r}{\Gamma(r+1)} \left[1 + \frac{\pi^2 r(r-1)}{6} \frac{1}{y^2} + \dots \right] \quad \forall \quad \zeta = e^y,$$

$$\Rightarrow f_r(\zeta) \approx \frac{y^r}{\Gamma(r+1)} = \frac{(\ln \zeta)^r}{r!}.$$