Non-interacting gas

$$H\psi = E\psi$$

$$H = \frac{-\hbar^2\nabla^2\psi}{2m} = E\psi$$

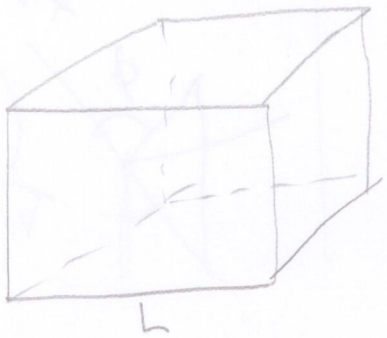
$$\vec{\nabla}^2\psi + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0$$

$$\psi = Ae^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

$$E = \frac{\hbar^2k^2}{2m}$$

$$\vec{p}\psi = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\psi = \hbar\vec{k}\psi$$

Condições de contorno



caixa cubica de lado L

$$\psi(x+L) = \psi(x)$$
$$\psi(y+L) = \psi(z)$$
$$\psi(z+L) = \psi(z)$$

$\psi(x+L) = \psi(x) \Rightarrow Ae^{ik_x(x+L)+ik_yy+ik_zz} = Ae^{ik_xx+ik_yy+ik_zz}$

$$e^{ik_xL} = 1$$

$k_xL = 2n_x\pi \qquad n_x = 0, 1, 2 \ldots -$

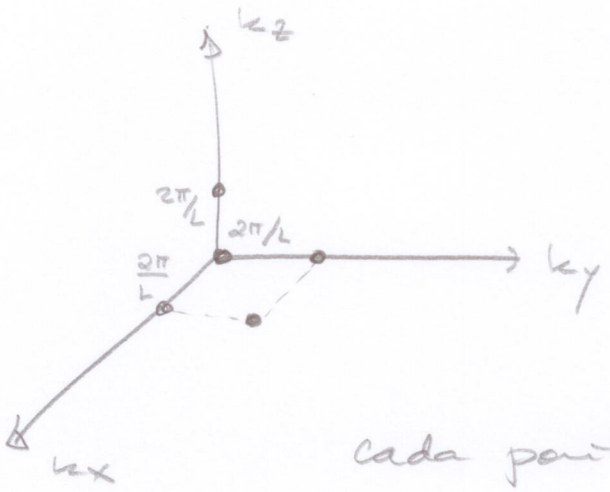
$$k_x = \frac{2n_x\pi}{L}$$

para as outras direcões no espaço k obtemos

$$k_y = \frac{2n_y\pi}{L}$$

$$k_z = \frac{2n_z\pi}{L}$$

Então no espaço $\vec{k}$ os valores permitidos são



cada ponto ocupa um volume

$$\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$$

e o número de pontos ou estados no espaço k em um volume unitário é

$$1\Big/\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 = \frac{V}{(2\pi)^3}.$$

Estatística de Fermi

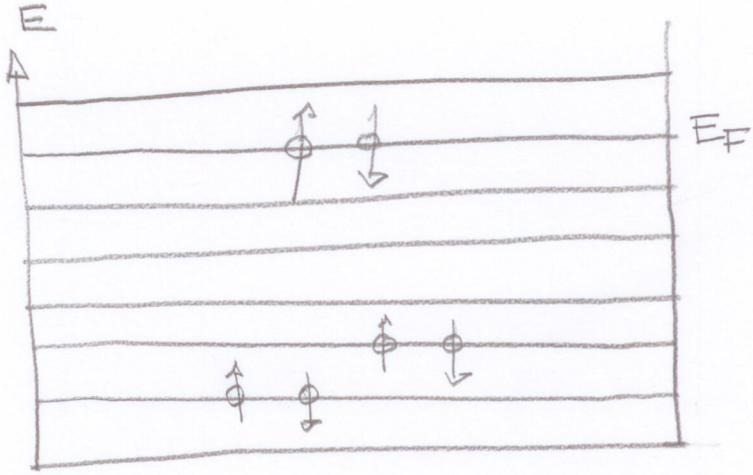
Férmions possuem funções de onda anti-simétricas a troca entre duas partículas

$$\psi(\ldots r_i, \ldots r_j \ldots) = -\psi(\ldots r_j, \ldots r_i, \ldots)$$

Uma consequência desta simetria é o Princípio de Exclusão de Pauli:

"Dois férmions com os mesmos números quânticos não podem ocupar o mesmo estado"

N férmions não interagentes.



O último estado ocupado tem energia E_F (energia de Fermi) e vetor de onda k_F.

$$N = \frac{2 \cdot V}{(2\pi)^3} \frac{4}{3} \pi k_F^3$$

$$k_F^3 = 3\pi^2 (N/V)$$

$$k_F = \left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{1/3}$$

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

$$E_F \equiv k_B T_F \quad (T_F \text{ temperatura de Fermi})$$

$$T_F = \frac{E_F}{k_B}$$

Para o cobre, usando $N_a/V = 8.4 \times 10^{22}$ electrons/cm^3, $m = 10^{-27}$ gr obtemos

$$T_F = 80.000\,K \;//$$

Calor específico

$$C_V = \left(\frac{\partial \bar{E}}{\partial T}\right)_V$$

Resultado clássico

$$\bar{E} = \frac{3}{2} N k_B T \rightarrow C_V = \frac{3}{2} N k_B$$

muito grande !!

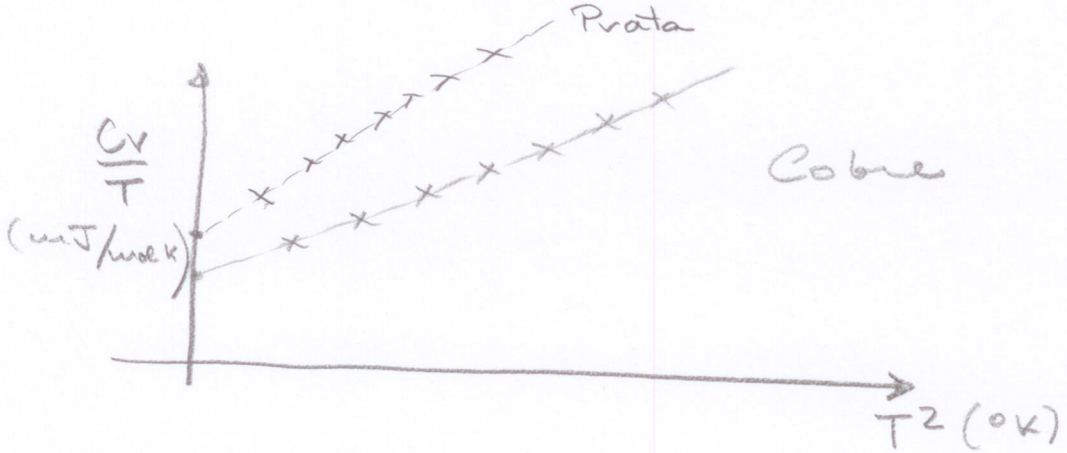
Vamos considerar que apenas uma fração de elétrons numa faixa (T/T_F) contribue para o calor específico

$$N_{eff} = N\left(T/T_F\right)$$

$$\bar{E} = \frac{3}{2} N_{eff} k_B T = \frac{3}{2} N \left(\frac{T}{T_F}\right) k_B T$$

$$C_V = \left.\frac{\partial \bar{E}}{\partial T}\right)_V = \frac{3}{2} N k_B \left(\frac{T}{T_F}\right)$$

$$C_V = \gamma T \quad ; \quad \gamma = \frac{3}{2} \frac{N k_B}{T_F}$$



$$C_V = \gamma T + A T^3$$

$$\gamma_{Ag} \cong 0.6 \text{ mJ/mol K}$$