

## GÁS IDEAL DE FERMI

Como vimos no capítulo anterior, dados o volume, a temperatura e o potencial químico, a grande função de partição para férmions livres pode ser escrita na forma

$$\ln \Xi(T, V, \mu) = \sum_j \ln \left\{ 1 + \exp \left[ -\beta(\epsilon_j - \mu) \right] \right\}, \quad (1)$$

onde a soma é sobre os estados quânticos de partícula única. O valor esperado do número de ocupação de um orbital é dado pela expressão

$$\langle n_j \rangle = \frac{1}{\exp[\beta(\epsilon_j - \mu)] + 1}, \quad (2)$$

que muitas vezes é conhecida como *distribuição de Fermi-Dirac*. A conexão com a termodinâmica, no limite  $V \rightarrow \infty$ , é feita por meio do grande potencial termodinâmico,

$$\Phi(T, V, \mu) = -\frac{1}{\beta} \ln \Xi(T, V, \mu). \quad (3)$$

Como  $\Phi = -pV$ , temos

$$p(T, \mu) = k_B T \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \ln \Xi(T, V, \mu). \quad (4)$$

A partir de  $\Xi$ , escrita em termos de  $\beta$ ,  $z = \exp(\beta\mu)$  e  $V$ , é fácil obter expressões para o valor esperado da energia (que será identificado, no limite termodinâmico, com a energia interna do sistema) e para o valor esperado do número total de partículas (identificado com o número termodinâmico de partículas). Temos, então, a energia interna,

$$U = \sum_j \varepsilon_j \langle n_j \rangle = \sum_j \frac{\varepsilon_j}{\exp[\beta(\varepsilon_j - \mu)] + 1}, \quad (5)$$

e o número de partículas,

$$N = \sum_j \langle n_j \rangle = \sum_j \frac{1}{\exp[\beta(\varepsilon_j - \mu)] + 1}. \quad (6)$$

Muitas vezes não é conveniente trabalhar com o potencial químico fixo. Podemos, por exemplo, utilizar a equação (6) para obter  $\mu = \mu(T, V, N)$  e substituir nas expressões da energia interna, da pressão ou do valor esperado de ocupação dos orbitais. Mais adiante vamos examinar o problema do gás de elétrons livres como função das variáveis mais convenientes  $T$ ,  $V$  e  $N$ .

Para férmions livres, na ausência de campos eletromagnéticos, o espectro de energia é dado por

$$\varepsilon_j = \varepsilon_{\vec{k}, \sigma} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (7)$$

No limite termodinâmico podemos escrever

$$\ln \Xi = \gamma \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 \vec{k} \ln \left\{ 1 + \exp \left[ -\beta \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu \right) \right] \right\}, \quad (8)$$

onde  $\gamma = 2S + 1$  é a multiplicidade do spin. Portanto, temos

$$\langle n_{\vec{k}} \rangle = \left[ \exp \left( \frac{\beta \hbar^2 k^2}{2m} - \beta \mu \right) + 1 \right]^{-1}, \quad (9)$$

$$N = \gamma \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 \vec{k} \left[ \exp \left( \frac{\beta \hbar^2 k^2}{2m} - \beta \mu \right) + 1 \right]^{-1}. \quad (10)$$

e

$$U = \gamma \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3\vec{k} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left[ \exp\left(\frac{\beta \hbar^2 k^2}{2m} - \beta\mu\right) + 1 \right]^{-1}. \quad (11)$$

Devido à simetria esférica do espectro de energia dos férmions livres, podemos reescrever essas fórmulas utilizando a energia  $\varepsilon$  como variável de integração. Assim, temos

$$\ln \Xi = \gamma V \int_0^{\infty} D(\varepsilon) \ln \left\{ 1 + \exp[-\beta(\varepsilon - \mu)] \right\} d\varepsilon, \quad (12)$$

$$N = \gamma V \int_0^{\infty} D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon \quad (13)$$

$$U = \gamma V \int_0^{\infty} \varepsilon D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (14)$$

onde

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{\exp[\beta(\varepsilon - \mu)] + 1} \quad (15)$$

é a função de distribuição de Fermi-Dirac, e

$$D(\varepsilon) = \frac{1}{4\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \varepsilon^{1/2} = C \varepsilon^{1/2}, \quad (16)$$

onde a constante  $C$  depende da massa dos férmions. Logo adiante vai ficar claro que a função  $D(\varepsilon)$  tem uma interpretação física muito simples:  $\gamma D(\varepsilon)$  é uma densidade (por energia e por volume) de estados de partícula única disponíveis para as partículas do sistema.

Na realidade, as expressões (12)-(16) também poderiam ter sido escritas para bósons livres, com pequenas modificações, tomando cuidado para tratar separadamente o termo singular da soma (para  $\vec{k} = 0$ ). Vamos agora obter um

resultado simples que vale tanto para bósons quanto para férmions livres. Fazendo por partes a integral da equação (12), temos

$$\ln \Xi = \gamma V C \int_0^{\infty} \varepsilon^{1/2} \ln \left\{ 1 + e^{-\beta(\varepsilon - \mu)} \right\} d\varepsilon = \frac{2}{3} \beta \gamma V C \int_0^{\infty} \varepsilon^{3/2} f(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (17)$$

Então,

$$\ln \Xi = \frac{2}{3} \frac{\gamma V}{k_B T} \int_0^{\infty} \varepsilon D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{2}{3} \frac{U}{k_B T}. \quad (18)$$

Como  $\Phi = -kT \ln \Xi = -pV$ , temos, finalmente,

$$U = \frac{3}{2} pV, \quad (19)$$

que é um resultado válido até para o gás ideal monoatômico clássico.

## 9.1 GÁS IDEAL DE FERMI COMPLETAMENTE DEGENERADO

Costuma-se dizer que um gás quântico no estado fundamental, com a temperatura nula, está completamente degenerado. No caso de férmions a temperatura nula ( $\beta \rightarrow \infty$ ), o número de ocupação mais provável dos orbitais é dado por uma função degrau da energia (ver figura 9.1). O potencial químico a temperatura nula, designado por  $\varepsilon_F$ , é denominado *energia de Fermi*. No gráfico da figura 9.1 fica muito claro que todos os orbitais estão ocupados até a energia de Fermi  $\varepsilon_F$ , mas permanecem vazios para  $\varepsilon > \varepsilon_F$ .

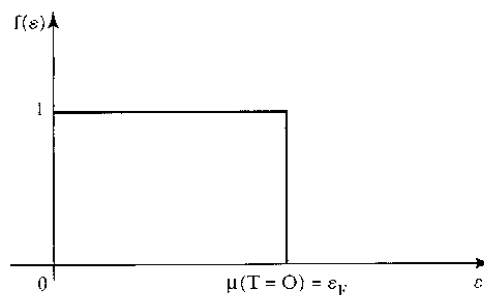


Figura 9.1 Função de distribuição de Fermi-Dirac  $f(\varepsilon)$  no zero absoluto.

Vamos calcular a energia de Fermi em termos do número total de partículas  $N$  e do volume total  $V$ . No limite  $\beta \rightarrow \infty$ , a equação (13) pode ser escrita como

$$N = \gamma V \int_0^{\varepsilon_F} D(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (20)$$

Agora vai ficar claro o significado da densidade  $D(\varepsilon)$ : basta observar os gráficos de  $D(\varepsilon)$  e de  $D(\varepsilon) f(\varepsilon)$  contra a energia  $\varepsilon$ , a temperatura nula (ver figura 9.2). A função degrau  $f(\varepsilon)$  corta  $D(\varepsilon)$  na energia  $\varepsilon_F$ . Abaixo da energia de Fermi todos os estados disponíveis estão ocupados; acima da energia de Fermi os estados disponíveis estão desocupados. A partir da equação (20) temos

$$N = \frac{2}{3} \gamma V \varepsilon_F D(\varepsilon_F), \quad (21)$$

de onde vem que

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{6\pi^2}{\gamma} \right)^{2/3} \left( \frac{N}{V} \right)^{2/3}, \quad (22)$$

ou seja, a energia de Fermi é inversamente proporcional à massa das partículas e cresce com a densidade elevada à potência  $2/3$ .

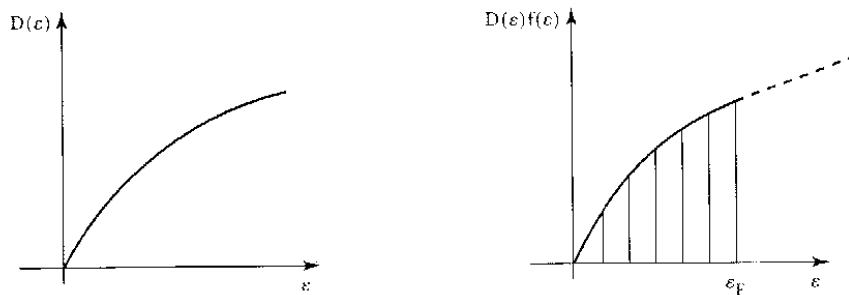


Figura 9.2 Gráficos da densidade de estados  $D(\varepsilon)$  e da função  $D(\varepsilon) f(\varepsilon)$  contra a energia  $\varepsilon$  no estado fundamental. A região hachurada indica os orbitais ocupados (até a energia de Fermi  $\varepsilon_F$ ).

Utilizando a equação (14), a energia interna do estado fundamental será dada por

$$U = \frac{2}{5} \gamma V D(\varepsilon_F) \varepsilon_F^2. \quad (23)$$

A partir da equação (19) podemos, então, obter a pressão

$$p = \frac{2}{5} \frac{N}{V} \varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{5m} \left( \frac{6\pi^2}{\gamma} \right)^{2/3} \left( \frac{N}{V} \right)^{5/3}. \quad (24)$$

Esse resultado é particularmente interessante. Mesmo à temperatura nula o gás de Fermi possui uma certa pressão e precisa ser contido dentro de um recipiente (mais adiante vamos ver que a pressão é nula no estado fundamental dos bósons). Esta é uma consequência direta do princípio de exclusão de Pauli, relacionada com a própria estabilidade da matéria (o mundo certamente não poderia ser estável se fosse constituído apenas por bósons!).

A partir da energia de Fermi, pode-se definir a temperatura de Fermi,

$$T_F = \frac{1}{k_B} \varepsilon_F, \quad (25)$$

que é um valor característico importante nos diversos tipos de gás de Fermi. Utilizando a equação (22), temos

$$T_F = \frac{\hbar^2}{2mk_B} \left( \frac{6\pi^2}{\gamma} \right)^{2/3} \left( \frac{N}{V} \right)^{2/3}. \quad (26)$$

Percebe-se, então, que a condição  $T \gg T_F$  corresponde ao limite clássico estudado no capítulo anterior (dimensão interatômica típica muito maior do que o comprimento de onda térmico). Em vários casos de interesse, no entanto, a temperatura de Fermi é muito grande, bem maior do que a temperatura ambiente (ou seja, o sistema está próximo do estado completamente degenerado, onde os efeitos quânticos são de fundamental importância). Na próxima seção vamos ver que nessas circunstâncias é possível escrever as grandezas termodinâmicas na forma de uma série assintótica em termos de potências da razão  $T/T_F$ .

A teoria do gás ideal de Fermi tem uma série de aplicações físicas, embora o exemplo mais importante seja a explicação das propriedades térmicas e de transporte das substâncias metálicas. Segundo o modelo clássico de Drude e Lorentz, as propriedades dos metais podem ser explicadas por meio de um gás de elétrons livres. Nos átomos de um metal, os elétrons da última camada têm a capacidade de se liberar dos núcleos, formando em primeira aproximação um gás ideal dentro do volume da amostra metálica. Embora certas propriedades de condução sejam qualitativamente explicadas pelo tratamento clássico de Drude

e Lorentz, o calor específico dos metais varia com a temperatura (violando o resultado clássico do teorema da equi-partição da energia) e o número de portadores é muito menor do que previsto classicamente. Os primeiros cálculos quânticos para um gás ideal de férmions de spin  $1/2$  foram realizados por Sommerfeld na década de 30. Dessa forma, foram explicadas quase todas as propriedades básicas dos metais, incluindo a variação linear do calor específico a volume constante com a temperatura e a participação dos elétrons nas vizinhanças da energia de Fermi nos processos de condução. Mais tarde foram feitos cálculos para um gás de elétrons na presença de um potencial cristalino, dando origem às bandas de energia, que possibilitam a distinção entre metais, isolantes e semicondutores. Na presença do potencial cristalino, os elétrons não são totalmente livres: a estrutura de bandas ainda reflete uma determinada relação com os núcleos de origem. Além dos sistemas metálicos, há outros sistemas físicos que também podem ser explicados por meio de um gás ideal de Fermi, como a matéria nuclear ou um gás de partículas ionizadas dentro de determinados tipos de estrelas. A temperatura de Fermi de um metal alcalino, como o lítio ou o sódio, com um elétron de condução por átomo, é tipicamente da ordem de  $10^4 K$  (ou seja, muito maior do que a temperatura ambiente). Para ter uma idéia das ordens de grandeza envolvidas, é interessante lembrar que  $1 eV$  de energia corresponde a uma temperatura de aproximadamente  $10^4 K$ ; portanto, a energia de Fermi de um metal pode ser da ordem de grandeza da energia de ionização do átomo de hidrogênio. Para o gás de elétrons numa estrela anã branca típica,  $T_F \sim 10^9 K$  (muito maior do que a temperatura da superfície do Sol, da ordem de  $10^5 K$ ). Para a matéria nuclear, a temperatura de Fermi é da ordem de  $10^{11} K$ .

## 9.2 GÁS IDEAL DE FERMI DEGENERADO ( $T \ll T_F$ )

Já vimos que em casos de interesse a temperatura ambiente é muito menor do que a temperatura de Fermi. Por exemplo, no caso dos elétrons de condução do cobre, que em primeira aproximação formam um gás de elétrons livres, a temperatura de Fermi é da ordem de  $8 \times 10^4 K$ . Torna-se, então, muito importante estabelecer resultados analíticos para  $T \ll T_F$ .

No limite  $T \ll T_F$ , a função de distribuição de Fermi-Dirac  $f(\epsilon)$ , esboçada na figura 9.3, tem a forma de um degrau ligeiramente desbastado. Como função de  $T$ ,  $V$  e  $N$ , o potencial químico  $\mu$  deve ser ligeiramente menor do que seu valor,  $\epsilon_F$ , à temperatura nula. A função  $D(\epsilon) f(\epsilon)$  contra a energia  $\epsilon$  está esboçada na figura 9.4. *Grosso modo*, podemos dizer que alguns elétrons que estavam abaixo da energia de Fermi são excitados para estados com energias superiores a  $\epsilon_F$ . Essa alteração se verifica numa pequena faixa de energias, da ordem de  $k_B T$ , em torno

de  $\varepsilon_F$ . Portanto, o número total de elétrons excitados será dado aproximadamente pela expressão

$$\Delta N \approx \gamma D(\varepsilon_F) V k_B T. \quad (27)$$

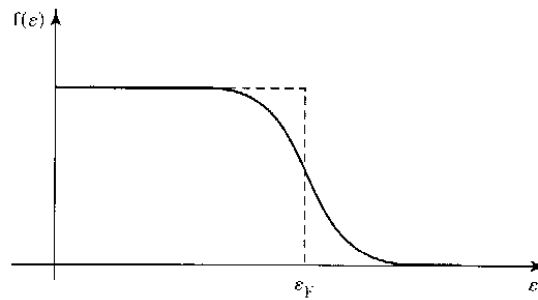


Figura 9.3 Função de distribuição de Fermi-Dirac no limite  $T \ll T_F$ .

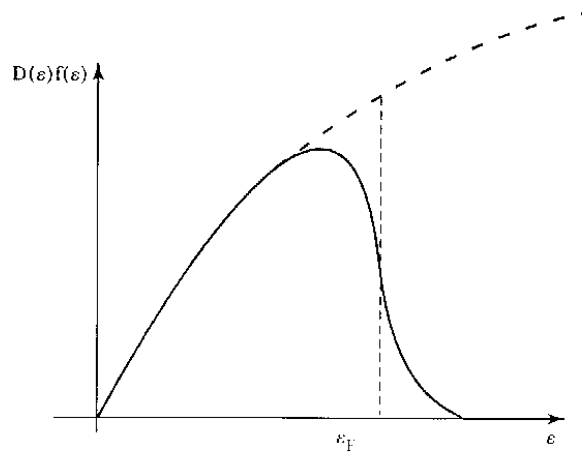


Figura 9.4 Função  $D(\varepsilon)f(\varepsilon)$  contra a energia  $\varepsilon$  no limite  $T \ll T_F$ .

A variação total de energia destes elétrons é dada por

$$\Delta U \approx k_B T \Delta N \approx V \gamma D(\varepsilon_F) (k_B T)^2. \quad (28)$$

Portanto, temos o calor específico a volume constante,

$$c_V = \frac{1}{N} \left( \frac{\partial \Delta U}{\partial T} \right)_{V,N} \approx 2\gamma \frac{V}{N} D(\varepsilon_F) k_B^2 T. \quad (29)$$



Utilizando a equação (21), podemos escrever

$$c_V = 3k_B \frac{T}{T_F}, \quad (30)$$

que difere radicalmente do valor constante,  $c_V = 3k_B/2$ , previsto para um gás clássico.

Essa dependência linear do calor específico com a temperatura, deduzida aqui de maneira puramente qualitativa, é, de fato, observada experimentalmente. À temperatura ambiente, a contribuição eletrônica para o calor específico de um cristal metálico é muito pequena (pois acaba sendo mascarada pela contribuição dos graus elásticos de liberdade). A baixas temperaturas, no entanto, o calor específico de um metal pode ser bem ajustado com uma lei do tipo

$$c_V = \gamma T + \delta T^3, \quad (31)$$

onde  $\gamma$  e  $\delta$  são constantes e o segundo termo está associado aos graus elásticos de liberdade da rede cristalina (fônons). Para encontrar a constante  $\gamma$ , costuma-se fazer um gráfico de  $c_V/T$  contra  $T^2$ ,

$$\frac{1}{T} c_V = \gamma + \delta T^2. \quad (32)$$

A extrapolação linear dos dados experimentais desse gráfico, no limite  $T^2 = 0$ , fornece diretamente o valor de  $\gamma$ . Na tabela abaixo damos valores teóricos (obtidos por meio do modelo do gás de elétrons livres) e experimentais para a constante  $\gamma$  de alguns cristais metálicos, em unidades de  $10^{-4} \text{ cal} \times \text{mol}^{-1} \times \text{K}^{-2}$ .

<i>Metal</i>	$\gamma_{\text{teor}}$	$\gamma_{\text{exp}}$	$\gamma_{\text{exp}}/\gamma_{\text{teor}}$
<i>Li</i>	1,8	4,2	2,3
<i>Na</i>	2,6	3,5	1,3
<i>K</i>	4,0	4,7	1,2
<i>Cu</i>	1,2	1,6	1,3
<i>Fe</i>	1,5	12	8,0
<i>Mn</i>	1,5	40	27

No caso dos metais alcalinos e do cobre, a concordância com os resultados do modelo de elétrons livres é muito razoável. Como a constante  $\gamma$  é proporcional à

massa dos elétrons, em física dos sólidos costuma-se introduzir o conceito de massa efetiva, associada à presença do potencial cristalino, para corrigir essas discrepâncias. Certos metais de caráter magnético, como o ferro ou o manganês, com a constante  $\gamma$  excessivamente grande, estão mais distantes do comportamento ideal, sendo conhecidos como férmions pesados.

Vamos agora fazer a expansão de Sommerfeld para obter a forma assintótica do calor específico do gás de férmions livres. Temos de calcular integrais do tipo

$$I = \int_0^{\infty} f(\varepsilon)\phi(\varepsilon)d\varepsilon, \quad (33)$$

onde  $\phi(\varepsilon) = A\varepsilon^n$ ,  $A$  é uma constante e  $n \geq 1/2$ . Como a função  $f(\varepsilon)$  tem a forma aproximada de um degrau, a derivada  $f'(\varepsilon)$  tem um pico muito pronunciado para  $\varepsilon = \mu$ . Fazendo uma integração por partes, temos

$$I = f(\varepsilon)\psi(\varepsilon)\Big|_0^{\infty} - \int_0^{\infty} \psi(\varepsilon)f'(\varepsilon)d\varepsilon, \quad (34)$$

com

$$\psi(\varepsilon) = \int_0^{\varepsilon} \phi(\varepsilon')d\varepsilon'. \quad (35)$$

Notando que  $f(\varepsilon)$  vai exponencialmente a zero para  $\varepsilon \rightarrow \infty$ , temos

$$I = - \int_0^{\infty} \psi(\varepsilon)f'(\varepsilon)d\varepsilon. \quad (36)$$

Como  $f'(\varepsilon)$  tem um pico simétrico em  $\varepsilon = \mu$ , vamos expandir  $\psi(\varepsilon)$  em torno desse pico,

$$\psi(\varepsilon) = \psi(\mu) + \left(\frac{d\psi}{d\varepsilon}\right)_{\varepsilon=\mu} (\varepsilon - \mu) + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\frac{d^k \psi}{d\varepsilon^k}\right)_{\varepsilon=\mu} (\varepsilon - \mu)^k. \quad (37)$$

Temos, então, de calcular as integrais

$$I_k = - \int_0^{\infty} (\varepsilon - \mu)^k f'(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{1}{\beta^k} \int_{-\beta\mu}^{\infty} \frac{e^x x^k}{(e^x + 1)^2} dx, \quad (38)$$

para  $k = 0, 1, 2, \dots$ . Para temperaturas pequenas ( $T \ll T_F$ ),  $\mu$  está próximo de  $\varepsilon_F$  e o limite inferior dessas integrais pode ser tomado como  $-\infty$ . Na realidade, devido à forma do integrando, o erro que se comete nessa operação é da ordem de  $\exp(-\beta\varepsilon_F)$ . Então, temos

$$I_k = \frac{1}{\beta^k} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^x x^k}{(e^x + 1)^2} dx + O[\exp(-\beta\varepsilon_F)]. \quad (39)$$

Para  $k$  ímpar, a integral se anula. Para  $k$  par, a menos das correções exponenciais, é fácil mostrar que

$$I_0 = 1 \quad \text{e} \quad I_2 = \frac{\pi^2}{3\beta^2}. \quad (40)$$

Então, para  $T \ll T_F$ , temos o resultado assintótico

$$I = \int_0^{\mu} \phi(\varepsilon) d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left( \frac{d\phi}{d\varepsilon} \right)_{\varepsilon=\mu} + \dots \quad (41)$$

Agora podemos utilizar a expansão (41) a fim de obter expressões assintóticas para a energia interna e o número termodinâmico de partículas,

$$U = \gamma V \int_0^{\infty} f(\varepsilon) C \varepsilon^{3/2} d\varepsilon = \gamma V C \left\{ \frac{2}{5} \mu^{5/2} + \frac{\pi^2}{4} (k_B T)^2 \mu^{1/2} + \dots \right\} \quad (42)$$

e

$$N = \gamma V \int_0^{\infty} f(\varepsilon) C \varepsilon^{1/2} d\varepsilon = \gamma V C \left\{ \frac{2}{3} \mu^{3/2} + \frac{\pi^2}{12} (k_B T)^2 \mu^{-1/2} + \dots \right\}. \quad (43)$$

Essa última expressão pode ser reescrita na forma

$$\varepsilon_F^{3/2} = \mu^{3/2} \left\{ 1 + \frac{\pi^2}{8} \left( \frac{k_B T}{\mu} \right)^2 + \dots \right\}. \quad (44)$$

Não é difícil inverter essa equação a fim de obter uma expansão assintótica para o potencial químico como função da temperatura  $T$  e da densidade  $N/V$  (que comparece por meio da expressão da temperatura de Fermi),

$$\mu = \varepsilon_F \left\{ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{T}{T_F} \right)^2 + \dots \right\}. \quad (45)$$

Portanto, o potencial químico  $\mu = \mu(T, V, N)$  é realmente menor do que  $\varepsilon_F$  para temperaturas pequenas. Substituindo a equação (45) na expressão para a energia interna, dada pela equação (42), temos

$$U = \frac{3}{5} N \varepsilon_F \left\{ 1 + \frac{5\pi^2}{12} \left( \frac{T}{T_F} \right)^2 + \dots \right\}. \quad (46)$$

Então, o calor específico a volume constante será dado pela expressão assintótica

$$c_V = \frac{\pi^2}{2} k_B \frac{T}{T_F}, \quad (47)$$

que difere da forma heurística dada pela equação (30) apenas por um pequeno prefator numérico.

### 9.3 PARAMAGNETISMO DE PAULI

Num sistema de elétrons livres, o campo magnético se acopla com os spins e com o movimento orbital. Vamos, no entanto, separar essas duas contribuições, estudando inicialmente apenas o efeito Zeeman, que se refere às interações entre um campo externo e os momentos magnéticos permanentes, produzindo o fenômeno do paramagnetismo. Nessas circunstâncias, o hamiltoniano do gás de elétrons livres na presença de um campo magnético é dado pela expressão

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{1}{2m} \vec{p}_i^2 - g\mu_B \vec{H} \cdot \vec{S}_i \right], \quad (48)$$

onde  $\vec{S}_i$  é um operador de spin 1/2,  $g = 2$  é o fator giromagnético e  $\mu_B$  é o magneton de Bohr. Para um único elétron, com o eixo  $z$  ao longo do campo, temos o hamiltoniano

$$\mathcal{H}_1 = \frac{1}{2m} \vec{p}^2 - g\mu_B H S_z . \quad (49)$$

Portanto, o espectro de energia é dado por

$$\varepsilon_{k,\sigma} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu_B H \sigma , \quad (50)$$

com  $\sigma = \pm 1$ .

A grande função de partição é dada pela expressão

$$\begin{aligned} \ln \Xi &= \sum_{\vec{k}} \sum_{\sigma} \ln \left\{ 1 + z \exp \left( -\frac{\beta \hbar^2 k^2}{2m} + \beta \mu_B H \sigma \right) \right\} = \\ &= VC \int_0^{\infty} \varepsilon^{1/2} \left\{ \sum_{\sigma} \ln [1 + z \exp(-\beta \varepsilon + \beta \mu_B H \sigma)] \right\} d\varepsilon . \end{aligned} \quad (51)$$

Portanto, podemos escrever

$$\ln \Xi = \ln \Xi_+ + \ln \Xi_- , \quad (52)$$

onde

$$\ln \Xi_{\pm} = VC \int_0^{\infty} \varepsilon^{1/2} \left\{ \ln [1 + z \exp(-\beta \varepsilon \pm \beta \mu_B H)] \right\} d\varepsilon . \quad (53)$$

O número médio de elétrons será dado por

$$N = z \frac{\partial}{\partial z} \ln \Xi = \langle N_+ + N_- \rangle , \quad (54)$$

onde

$$\langle N_{\pm} \rangle = VC \int_0^{\infty} \varepsilon^{1/2} \left\{ z^{-1} \exp(+\beta \varepsilon \mp \beta \mu_B H) + 1 \right\}^{-1} d\varepsilon . \quad (55)$$

Também podemos utilizar essa notação para escrever o valor esperado da magnetização do sistema,

$$M = \mu_B \langle N_+ - N_- \rangle. \quad (56)$$

#### (A) MAGNETIZAÇÃO NO ESTADO FUNDAMENTAL

Tomando o limite  $\beta \rightarrow \infty$  na equação (55), temos os seguintes resultados no estado fundamental:

$$\begin{aligned} \langle N_+ \rangle &= VC \int_0^{\varepsilon_F + \mu_B H} \varepsilon^{1/2} d\varepsilon = VC \int_{-\mu_B H}^{\varepsilon_F} (\varepsilon + \mu_B H)^{1/2} d\varepsilon = \\ &= \frac{2}{3} VC (\varepsilon_F + \mu_B H)^{3/2} \end{aligned} \quad (57)$$

e

$$\begin{aligned} \langle N_- \rangle &= VC \int_0^{\varepsilon_F - \mu_B H} \varepsilon^{1/2} d\varepsilon = VC \int_{\mu_B H}^{\varepsilon_F} (\varepsilon - \mu_B H)^{1/2} d\varepsilon = \\ &= \frac{2}{3} VC (\varepsilon_F - \mu_B H)^{3/2}, \end{aligned} \quad (58)$$

onde  $\varepsilon_F$  é o potencial químico para  $T = 0$  (ou seja, a energia de Fermi). Tudo se passa como se a densidade de estados para os elétrons com spin para cima ( $\sigma = +1$ ) estivesse deslocada no eixo da energia por um valor  $-\mu_B H$ , enquanto a densidade para os elétrons com spin para baixo sofre um deslocamento para  $+\mu_B H$ . Portanto, temos o número total de elétrons,

$$N = \langle N_+ + N_- \rangle = \frac{2}{3} VC \left[ (\varepsilon_F + \mu_B H)^{3/2} + (\varepsilon_F - \mu_B H)^{3/2} \right] \quad (59)$$

e a magnetização,

$$M = \mu_B \langle N_+ - N_- \rangle = \frac{2}{3} VC \mu_B \left[ (\varepsilon_F + \mu_B H)^{3/2} - (\varepsilon_F - \mu_B H)^{3/2} \right]. \quad (60)$$

Para campos fracos ( $\mu_B H \ll \varepsilon_F$ ), podemos escrever

$$N = \frac{4}{3} VC \varepsilon_F^{3/2} + O\left[\left(\frac{\mu_B H}{\varepsilon_F}\right)^2\right] \quad (61)$$

c

$$M = 2VC \mu_B \varepsilon_F^{3/2} \left(\frac{\mu_B H}{\varepsilon_F}\right) + O\left[\left(\frac{\mu_B H}{\varepsilon_F}\right)^3\right]. \quad (62)$$

Portanto, em ordem dominante, temos

$$M = \frac{3}{2} N \mu_B \frac{\mu_B H}{\varepsilon_F}. \quad (63)$$

Podemos, então, escrever a suscetibilidade a campo nulo no estado fundamental,

$$\chi_0 = \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_{T=0, V, N, H=0} = \frac{3N\mu_B^2}{2\varepsilon_F}, \quad (64)$$

que é um dos resultados característicos do *paramagnetismo de Pauli*.

## (B) MAGNETIZAÇÃO NO LIMITE DEGENERADO ( $T \ll T_F$ )

Para temperaturas finitas, a magnetização é dada por

$$\begin{aligned} M &= \mu_B \langle N_+ - N_- \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln \Xi}{\partial H} = \\ &= \mu_B VC \int_0^{\infty} \varepsilon^{1/2} [f(\varepsilon - \mu_B H) - f(\varepsilon + \mu_B H)] d\varepsilon. \end{aligned} \quad (65)$$

Vamos agora fazer uma expansão para campos fracos ( $\mu_B H \ll \varepsilon_F$ ). Em ordem dominante, temos

$$M = -2VC \mu_B^2 H \int_0^{\infty} \varepsilon^{1/2} f'(\varepsilon) d\varepsilon = VC \mu_B^2 H \int_0^{\infty} \varepsilon^{-1/2} f(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (66)$$

A partir da equação (54), em ordem dominante, também podemos escrever

$$N = 2VC \int_0^{\infty} \varepsilon^{1/2} f(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (67)$$

No formalismo grande canônico que está sendo utilizado tanto a magnetização  $M$  quanto o número de partículas  $N$  são funções de  $T$ ,  $V$ ,  $H$  e  $\mu$ . Para calcular a suscetibilidade, é necessário eliminar o potencial químico, por meio da equação (67), a fim de obter a magnetização em termos das variáveis apropriadas,  $T$ ,  $V$ ,  $H$  e  $N$ . No limite degenerado ( $T \ll T_F$ ), podemos obter resultados analíticos utilizando as mesmas expansões propostas por Sommerfeld para calcular a forma assintótica do calor específico do gás de férmions livres. Temos, então,

$$M = 2\mu_B^2 VCH\mu^{1/2} \left[ 1 - \frac{\pi^2}{24} \left( \frac{k_B T}{\mu} \right)^2 + \dots \right] \quad (68)$$

e

$$N = \frac{4}{3} VC \mu^{3/2} \left[ 1 + \frac{\pi^2}{8} \left( \frac{k_B T}{\mu} \right)^2 + \dots \right]. \quad (69)$$

A partir dessa última expansão, obtemos

$$\mu = \varepsilon_F \left[ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{k_B T}{\varepsilon_F} \right)^2 + \dots \right]. \quad (70)$$

Substituindo na equação (68), temos

$$M = \frac{3N\mu_B^2 H}{2\varepsilon_F} \left[ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{k_B T}{\varepsilon_F} \right)^2 + \dots \right], \quad (71)$$

de onde podemos obter a suscetibilidade a campo nulo,

$$\chi_0 = \frac{3N\mu_B^2}{2\varepsilon_F} \left[ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{T}{T_F} \right)^2 + \dots \right], \quad (72)$$



que incorpora a primeira correção devido às flutuações térmicas. Em seu trabalho pioneiro, Pauli obteve uma expressão desse tipo, explicando a suscetibilidade fracamente dependente da temperatura que ocorre no caso dos metais alcalinos (em que  $T_F$  é muito grande).

### (C) LIMITE CLÁSSICO

É interessante obter o limite clássico (ou de altas temperaturas) das expressões para a magnetização e o número de partículas. Nesse limite, com  $z \ll 1$ , temos

$$f(\varepsilon) = \left[ z^{-1} e^{\beta \varepsilon} + 1 \right]^{-1} \rightarrow z e^{-\beta \varepsilon} . \quad (73)$$

Portanto, os limites da magnetização e do número de partículas são dados por

$$M = \mu_B V C z 2 \sinh(\beta \mu_B H) \int_0^{\infty} \varepsilon^{1/2} \exp(-\beta \varepsilon) d\varepsilon \quad (74)$$

e

$$N = 2 V C z \cosh(\beta \mu_B H) \int_0^{\infty} \varepsilon^{1/2} \exp(-\beta \varepsilon) d\varepsilon . \quad (75)$$

Eliminando o potencial químico, temos

$$M = N \mu_B \tanh\left(\frac{\mu_B H}{k_B T}\right), \quad (76)$$

de onde vem a suscetibilidade a campo nulo,

$$\chi_0 = \left( \frac{\partial M}{\partial H} \right)_{H=0} = \frac{N \mu_B^2}{k_B T}, \quad (77)$$

que é a famosa lei de Curie, característica dos materiais paramagnéticos. No sentido mais estrito do limite clássico, essa suscetibilidade se anula (pois o magneton de Bohr depende linearmente da constante de Planck  $\hbar$ ). No entanto, a expressão

(77) pode ser tomada como um tipo de limite clássico em que os operadores de spin são substituídos por momentos magnéticos permanentes de módulo  $\mu = \mu_B$ .

#### \*9.4 DIAMAGNETISMO DE LANDAU

Para explicar o fenômeno do diamagnetismo, vamos agora levar em conta a interação entre o campo magnético externo e o movimento orbital dos elétrons. Descartando o termo de spin, o hamiltoniano de uma partícula de massa  $m$  e carga  $q$ , na presença de um campo magnético  $\vec{H}$ , é dado pela expressão

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \left( \vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2, \quad (78)$$

onde  $\vec{A}$  é o potencial vetor associado ao campo e  $c$  a velocidade da luz. No contexto da mecânica estatística clássica, no entanto, não há possibilidade de ocorrência do diamagnetismo. De fato, basta escrever a função de partição no espaço de fase clássico,

$$Z_1 = \int d^3\vec{r} \int d^3\vec{p} \exp \left[ -\frac{\beta}{2m} \left( \vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 \right]. \quad (79)$$

É fácil perceber que uma simples mudança de variáveis,  $\vec{p}' \rightarrow \vec{p} - (q/c) \vec{A}$ , conduz à expressão trivial de  $Z_1$  para o gás ideal clássico, sem qualquer dependência com o campo magnético. Portanto, o diamagnetismo é um fenômeno puramente quântico. Utilizando a força de Lorentz, pode-se calcular a frequência de rotação,  $\omega = qH/mc$ , de uma partícula na presença de um campo magnético uniforme. A quantização dessas órbitas das partículas é que vai produzir o diamagnetismo de Landau.

Considerando um campo magnético uniforme na direção  $z$ ,

$$\vec{H} = H \vec{k}, \quad (80)$$

podemos escolher o potencial vetor no chamado *gauge* de Landau,

$$\vec{A} = xH \vec{j}. \quad (81)$$

Então, o hamiltoniano de partícula única pode ser escrito na forma

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \left[ p_x^2 + \left( p_y - \frac{qH}{c} x \right)^2 + p_z^2 \right]. \quad (82)$$

Escolhendo uma função de onda do tipo

$$\psi = \exp(ik_y y) \exp(ik_z z) f(x), \quad (83)$$

a equação de Schroedinger independente do tempo,  $\mathcal{H}\psi = \varepsilon\psi$ , pode ser escrita como

$$\frac{1}{2m} \left[ p_x^2 + \left( \hbar k_y - \frac{qH}{c} x \right)^2 \right] f(x) = \left( \varepsilon - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right) f(x). \quad (84)$$

Fazendo a mudança de variáveis

$$x' = x - \frac{c\hbar}{qH} k_y, \quad (85)$$

a equação (84) pode ser colocada na forma

$$\left[ \frac{1}{2m} (p_{x'})^2 + \frac{q^2 H^2}{2mc^2} (x')^2 \right] f(x') = \left( \varepsilon - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right) f(x'). \quad (86)$$

Dessa maneira, o problema fica reduzido à equação de Schroedinger de um oscilador harmônico unidimensional com frequência básica

$$\omega = \frac{qH}{mc}, \quad (87)$$

que é idêntica à frequência de Larmor clássica. Podemos, então, reescrever a equação (86) na forma

$$\left[ \frac{1}{2m} (p_{x'})^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 (x')^2 \right] f_n(x') = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) f_n(x'), \quad (88)$$

onde  $n = 0, 1, 2, \dots, \infty$

$$f_n(x') = H_n(x') \exp\left[-\frac{1}{2} \alpha (x')^2\right], \quad (89)$$

onde  $H_n$  é um polinômio de Hermite e

$$\alpha = \frac{qH}{\hbar c}. \quad (90)$$

A partir dessas considerações, podemos escrever o espectro de energia,

$$\varepsilon = \varepsilon(n, k_z) = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (91)$$

e as funções de Landau,

$$\psi = \psi_n^{k_y, k_z}(x, y, z) = \exp(ik_y y) \exp(ik_z z) f_n\left(x - \frac{1}{\alpha} k_y\right), \quad (92)$$

ficando muito clara uma enorme degenerescência em relação a  $k_y$ .

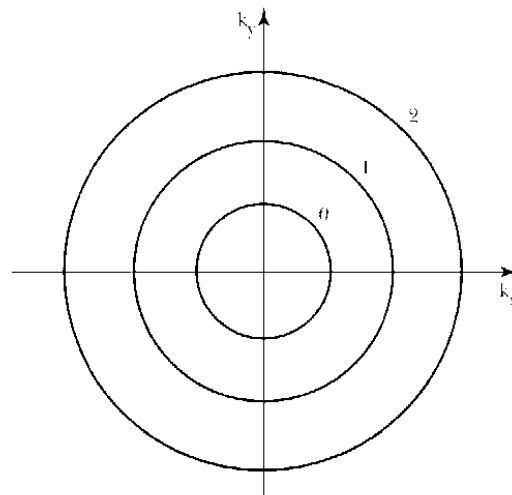


Figura 9.5 Órbitas permitidas para um sistema de elétrons livres na presença de um campo magnético na direção  $z$ .

Para calcular o fator de degenerescência, vamos fazer uma comparação com o espectro de elétrons livres, na ausência de um campo magnético,

$$\varepsilon_{\text{livres}} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2\right). \quad (93)$$

Na presença do campo magnético, os estados de elétrons livres no plano  $k_x - k_y$  entram em colapso em certas órbitas permitidas (ver figura 9.5), cujo raio ao quadrado é dado por

$$k_x^2 + k_y^2 = \frac{2m}{\hbar^2} \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) = \frac{2qH}{\hbar c} \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (94)$$

Considerando o sistema dentro de um cubo de lado  $L$ , até o nível  $n = 0$ , temos

$$2 \left( \frac{L}{2\pi} \right)^2 \pi \frac{qH}{\hbar c} = \frac{qHL^2}{\hbar c} \quad (95)$$

estados eletrônicos. Até o nível  $n = 1$ , temos

$$2 \left( \frac{L}{2\pi} \right)^2 \pi 3 \frac{qH}{\hbar c} = 3 \frac{qHL^2}{\hbar c} \quad (96)$$

estados eletrônicos. Até o nível  $n = 2$ , temos

$$2 \left( \frac{L}{2\pi} \right)^2 \pi 5 \frac{qH}{\hbar c} = 5 \frac{qHL^2}{\hbar c} \quad (97)$$

estados eletrônicos, e assim por diante. Portanto, a cada nível de Landau deve ser associado o fator de degenerescência

$$g = 2 \frac{qHL^2}{\hbar c}. \quad (98)$$

Levando em conta essa degenerescência, devemos reescrever o espectro de energia na forma

$$\varepsilon = \varepsilon(n, k_z, \delta) = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad (99)$$

onde  $k_z = -\infty, \dots, +\infty$ , com espaçamento  $L/2\pi$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$  e  $\delta = 1, 2, \dots, g$ .

Podemos, finalmente, escrever a função de partição no ensemble grande canônico,

$$\ln \Xi = 2 \frac{qHL^2}{hc} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk_z \ln \left\{ 1 + z \exp \left[ -\frac{\beta \hbar^2 k_z^2}{2m} - \frac{\beta \hbar qH}{mc} \left( n + \frac{1}{2} \right) \right] \right\} . \quad (100)$$

(A) LIMITE DE ALTAS TEMPERATURAS

No limite de altas temperaturas ( $z \ll 1$ ), o termo dominante da função de partição grande canônica pode ser escrito na forma

$$\ln \Xi = 2 \frac{qHL^2}{hc} \frac{L}{2\pi} z \left( \frac{2\pi m}{\beta \hbar^2} \right)^{1/2} \sum_{n=0}^{\infty} \exp \left[ -\frac{\beta \hbar qH}{mc} \left( n + \frac{1}{2} \right) \right] . \quad (101)$$

Portanto,

$$\ln \Xi = \frac{qHL^3}{\lambda hc} z \left[ \sinh(\beta \mu_B H) \right]^{-1} , \quad (102)$$

onde

$$\mu_B = \frac{q\hbar}{2mc} \quad (103)$$

é o magneton de Bohr e

$$\lambda = \frac{h}{(2\pi mk_B T)^{1/2}} \quad (104)$$

é o comprimento de onda térmico. As expressões clássicas (isto é, de altas temperaturas) para o número de partículas e a magnetização são dadas por

$$N = z \frac{\partial}{\partial z} \ln \Xi = \frac{qHL^3}{hc\lambda} z \left[ \sinh(\beta \mu_B H) \right]^{-1} \quad (105)$$

e

$$M = -\frac{\partial \Phi}{\partial H} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial H} \ln \Xi = \frac{qL^3 z}{\beta h c \lambda} \left\{ \frac{1}{\sinh(\beta \mu_B H)} - \frac{\beta \mu_B H \cosh(\beta \mu_B H)}{\sinh^2(\beta \mu_B H)} \right\}. \quad (106)$$

Eliminando o potencial químico por meio da equação (105), a magnetização pode ser escrita na forma

$$M = -N\mu_B \mathcal{L}(\beta \mu_B H), \quad (107)$$

onde

$$\mathcal{L}(x) = \coth(x) - \frac{1}{x} \quad (108)$$

é a *função de Langevin*. Esse resultado é curioso: a magnetização no limite de altas temperaturas é dada pela mesma expressão obtida no modelo clássico de Langevin para o paramagnetismo, mas com o sinal trocado. Esse sinal da magnetização não depende da carga, pois a função  $\mathcal{L}(x)$  é ímpar e a carga  $q$  comparece linearmente na expressão do magneton de Bohr. No limite de campos fracos,  $\beta \hbar q H \ll mc$ , temos o termo dominante

$$M = -\frac{N\mu_B^2 H}{3k_B T}. \quad (109)$$

Então, a suscetibilidade a campo nulo é dada por

$$\chi_0 = -\frac{1}{3} \frac{N\mu_B^2}{k_B T}. \quad (110)$$

Note que essa expressão não tem nenhum análogo na mecânica estatística clássica (de fato,  $\chi_0$  se anula para  $h = 0$ ). Note também que  $\chi_0$  corresponde justamente a um terço, com o sinal trocado, da suscetibilidade de Pauli no regime de altas temperaturas.

## (B) O EFEITO DE HAAS-VAN ALPHEN

Vamos agora ignorar a direção  $k_z$ , considerando os níveis de Landau no plano  $k_x - k_y$ . O espectro de energia vai ser dado por

$$\varepsilon_n = 2\mu_B H \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (111)$$

com a degenerescência

$$g = \frac{NH}{H_0}, \quad (112)$$

onde

$$H_0 = \frac{hc}{2q} \frac{N}{L^2}. \quad (113)$$

No estado fundamental, com  $H > H_0$ , todas as partículas podem ser acomodadas no nível de Landau mais baixo. Nesse caso, a energia total é dada por  $E_0 = N\mu_B H$ .

Quando  $H < H_0$ , algumas partículas têm de ocupar níveis mais altos de energia. Vamos supor que para um dado valor do campo os  $j$  níveis mais baixos estejam ocupados enquanto o nível  $j + 1$  esteja apenas parcialmente ocupado. Nessas circunstâncias, temos

$$(j+1)g < N < (j+2)g, \quad (114)$$

ou seja,

$$\frac{1}{j+2} < \frac{H}{H_0} < \frac{1}{j+1}. \quad (115)$$

Para o campo nesse intervalo, temos a energia do estado fundamental

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} E_0 &= g \sum_{i=0}^j \varepsilon_i + [N - (j+1)g] \varepsilon_{j+1} = \\ &= \mu_B \left( \frac{H}{H_0} \right) \left[ 2j+3 - (j+1)(j+2) \frac{H}{H_0} \right]. \end{aligned} \quad (116)$$



Introduzindo o parâmetro  $x = H/H_0$ , podemos, então, escrever

$$\frac{1}{N} E_0 = \mu_B H_0 x,$$

para  $x > 1$ , ou

$$\frac{1}{N} E_0 = \mu_B H_0 x [2j + 3 - (j + 1)(j + 2)x],$$

para

$$\frac{1}{j + 2} < x < \frac{1}{j + 1},$$

com  $j = 0, 1, 2, \dots$ . Tomando as derivadas dessa expressão em relação ao campo obtemos a magnetização e a suscetibilidade magnética. Em particular, a suscetibilidade em unidades adimensionais (isto é, dividida por  $2N\mu_B/H_0$ ) contra  $x = H/H_0$  tem a forma esquematizada no gráfico da figura 9.6. Em termos de  $x^{-1} = H_0/H$ , esse gráfico da suscetibilidade exibe um comportamento oscilatório, com um período bem definido. Um estudo mais detalhado destas oscilações com o inverso do campo, que constituem o efeito de Haas-van Alphen, está além dos nossos objetivos. Levando em conta o potencial cristalino, pode-se mostrar que os diversos períodos de oscilação são proporcionais às áreas das seções extremas da superfície de Fermi numa direção normal ao campo. O efeito de Haas-van Alphen fornece, portanto, um esquema muito poderoso de reconstrução “tomográfica” da superfície de Fermi dos cristais metálicos.

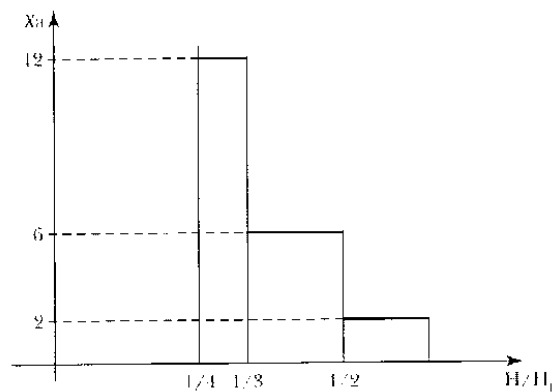


Figura 9.6 Suscetibilidade magnética (em unidades apropriadas) contra o campo magnético aplicado no estado fundamental do modelo diamagnético de Landau.

## EXERCÍCIOS

1. Qual é a compressibilidade de um gás de férmions livres a temperatura nula? Obtenha um valor numérico para elétrons com a densidade dos elétrons de condução do sódio metálico e compare com os valores experimentais para o sódio à temperatura ambiente.
2. Um gás ideal de férmions, com massa  $m$  e energia de Fermi  $\epsilon_F$ , está em repouso no zero absoluto. Encontre expressões para os valores esperados  $\langle v_x \rangle$  e  $\langle v_x^2 \rangle$ , onde  $\vec{v}$  é a velocidade de uma partícula.
3. Considere um gás de elétrons livres, num espaço  $d$ -dimensional, dentro de uma caixa hipercúbica de lado  $L$ . Esboce gráficos da densidade de estados  $D(\epsilon)$  contra a energia  $\epsilon$  para dimensões  $d = 1$  e  $d = 2$ . Qual a expressão da energia de Fermi em função da densidade para  $d = 1$  e  $d = 2$ ?
4. Mostre que o potencial químico de um gás clássico ideal de  $N$  partículas monoatômicas no volume  $V$ , a temperatura  $T$ , pode ser escrito na forma

$$\mu = k_B T \ln \left( \frac{\lambda^3}{v} \right),$$

onde

$$v = \frac{V}{N} \quad \text{e} \quad \lambda = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}}$$

é o comprimento de onda térmico. Esboce um gráfico de  $\mu/k_B T$  contra  $T$ . Obtenha agora a primeira correção quântica desse resultado. Isto é, mostre que

$$\frac{\mu}{k_B T} - \ln \left( \frac{\lambda^3}{v} \right) = A \left( \frac{\lambda^3}{v} \right) + B \left( \frac{\lambda^3}{v} \right)^2 + \dots$$

e obtenha explicitamente o prefator  $A$  nos casos de férmions e de bósons. Esboce um gráfico de  $\mu/k_B T$  contra  $\lambda^{-2}$  (isto é, contra a temperatura em unidades convenientes) para férmions, bósons e partículas clássicas.

5. Obtenha uma forma assintótica, quando  $T \ll T_F$ , para o calor específico de um gás de  $N$  férmions livres adsorvidos sobre uma superfície de área  $A$  em uma dada temperatura  $T$ .
6. Considere um gás de  $N$  elétrons livres, dentro de uma região de volume  $V$ , num regime ultra-relativístico. O espectro de energia é dado por

$$\varepsilon = \left[ p^2 c^2 + m^2 c^4 \right]^{1/2} \approx pc,$$

onde  $\vec{p}$  é o momento linear.

- (a) Calcule a energia de Fermi desse sistema;
- (b) Qual a energia do sistema no estado fundamental?
- (c) Obtenha uma forma assintótica para o calor específico a volume constante no limite  $T \ll T_F$ .
7. A baixas temperaturas, a energia interna de um sistema de elétrons livres pode ser escrita na forma

$$U = \frac{3}{5} N \varepsilon_F \left\{ 1 + \frac{5\pi^2}{12} \left( \frac{T}{T_F} \right)^2 - A \left( \frac{T}{T_F} \right)^4 + \dots \right\}.$$

Obtenha o valor da constante  $A$  e indique a ordem de grandeza dos termos que estão sendo desprezados.

8. Considere um sistema de férmions num espaço  $d$ -dimensional, com o espectro de energia

$$\varepsilon_{\vec{k}, \sigma} = c |\vec{k}|^a,$$

onde  $c > 0$  e  $a > 1$ .

- (a) Calcule o prefator  $A$  da relação  $pV = AU$ ;
- (b) Calcule a energia de Fermi em função do volume  $V$  e do número de partículas  $N$ ;
- (c) Calcule uma forma assintótica, quando  $T \ll T_F$ , para o calor específico a volume constante.

9. Considere novamente o gás de  $N$  elétrons livres ultra-relativísticos, dentro de uma região de volume  $V$ , a uma temperatura  $T$ , na presença de um campo magnético  $\vec{H}$ . Desprezando os efeitos magnéticos orbitais, o espectro de energia é dado por

$$\varepsilon_{\vec{p},\sigma} = c\hbar p - \mu_B H \sigma,$$

onde  $\mu_B$  é o magneton de Bohr e  $\sigma = \pm 1$ .

- (a) Mostre que a energia de Fermi desse sistema pode ser escrita na forma

$$\varepsilon_F = A + BH^2 + O(H^4).$$

Calcule expressões para os prefatores  $A$  e  $B$ ;

- (b) Mostre que a magnetização no estado fundamental pode ser escrita na forma

$$M = CH + O(H^3).$$

Obtenha uma expressão para a constante  $C$ ;

- (c) Calcule a suscetibilidade a campo nulo no estado fundamental.

10. A teoria clássica de Langevin para o paramagnetismo, proposta antes do estabelecimento das estatísticas quânticas, parte de um hamiltoniano clássico dado pela expressão

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=1}^N \vec{\mu}_i \cdot \vec{H} = - \sum_{i=1}^N \mu H \cos \theta_i,$$

onde  $\vec{\mu}_i$  é o momento magnético de um íon.

- (a) Mostre que a função canônica de partição é dada por

$$Z = Z_1^N = \left\{ \int d\Omega \exp(\beta \mu H \cos \theta) \right\}^N,$$

onde  $d\Omega$  é o elemento de integração de ângulo sólido;

- (b) Mostre que a magnetização (na direção do campo) é dada por

$$M = N \langle \mu \cos \theta \rangle = N \mu \mathcal{L}(\beta \mu H) ,$$

onde

$$\mathcal{L}(x) = \coth(x) - \frac{1}{x}$$

é a função de Langevin e

(c) Mostre que a suscetibilidade a campo nulo é dada pela lei de Curie,

$$\chi_0 = \frac{N \mu^2}{3 k_B T} .$$

11. Obtenha uma expressão para a suscetibilidade magnética associada ao movimento orbital dos elétrons livres, na presença de um campo magnético uniforme  $H$ , em condições de forte degenerescência,  $T \ll T_F$ , e campos muito fracos,  $\mu_B H \ll k_B T$ . Como sugestão, utilize a regra de soma de Euler,

$$\sum_{n=0}^{\infty} f\left(n + \frac{1}{2}\right) \approx \int_0^{\infty} f(x) dx + \frac{1}{24} f'(0) ,$$

a fim de simplificar a expressão de  $\ln \Xi$ .