# O “gás” de férmions livres.

- Eq. de Schrödinger independente do tempo para uma partícula de massa *m**:

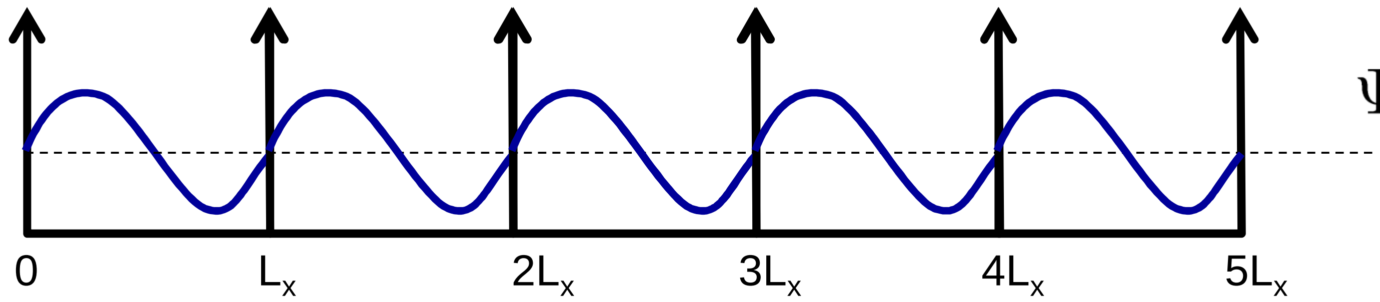
$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2\Psi(\mathbf{r}) = \varepsilon\Psi(\mathbf{r}) \Rightarrow \nabla^2\Psi(\mathbf{r}) = -k^2\Psi(\mathbf{r})}$$

Solução (onda esférica):

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = Ae^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad |\mathbf{k}|^2 = \frac{2m^*\varepsilon}{\hbar^2}$$

- Vamos considerar condições de contorno *<u>periódicas no espaço</u>*:

$$\Psi_{\mathbf{k}}(x+L_x, y, z) = \Psi_{\mathbf{k}}(x, y+L_y, z) = \Psi_{\mathbf{k}}(x, y, z+L_z) = \Psi_{\mathbf{k}}(x, y, z)$$




$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{L}) = Ae^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{L}}$$

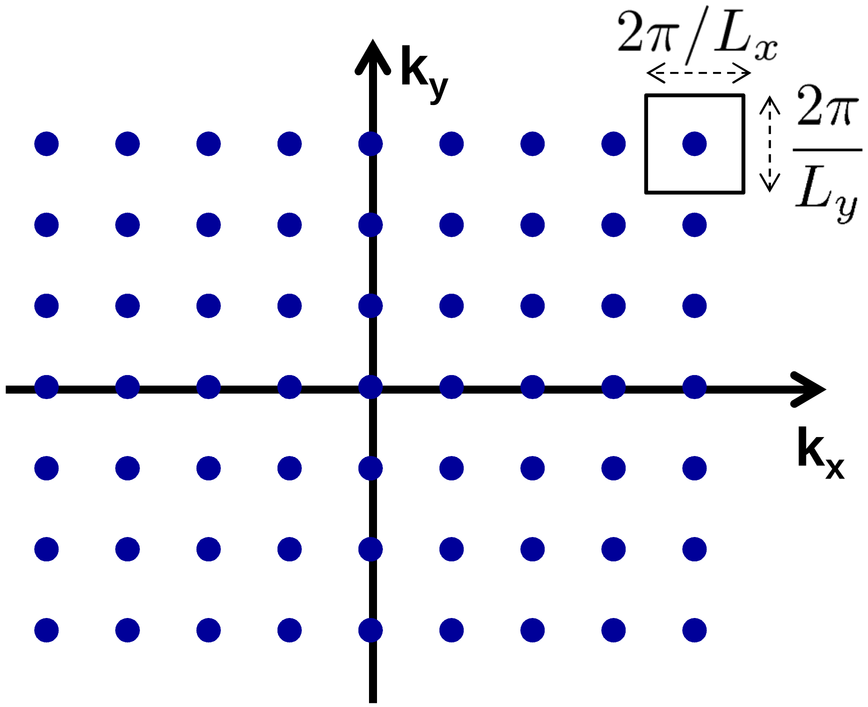
$$\boxed{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{L}} = 1}$$

- Solução: quantização da energia (ou de k):

$$k_xL_x + k_yL_y + k_zL_z = 2n\pi$$
$$n = 0, \pm1, \pm2, ...$$

# Contando os estados.

- Valores de k possíveis: $k_{x(y,z)} = \dfrac{2\pi n_{x(y,z)}}{L_{x(y,z)}}$ com $n_{x(y,z)} = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$




**Dica: para transformar Discreto →contínuo!**

$$\boxed{\frac{1}{V_{\mathbf{r}}} \sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}}$$

- Estado e energia para cada k:

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L_x L_y L_z}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \qquad \boxed{\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}}$$

- Número de estados no espaço k (3D) :

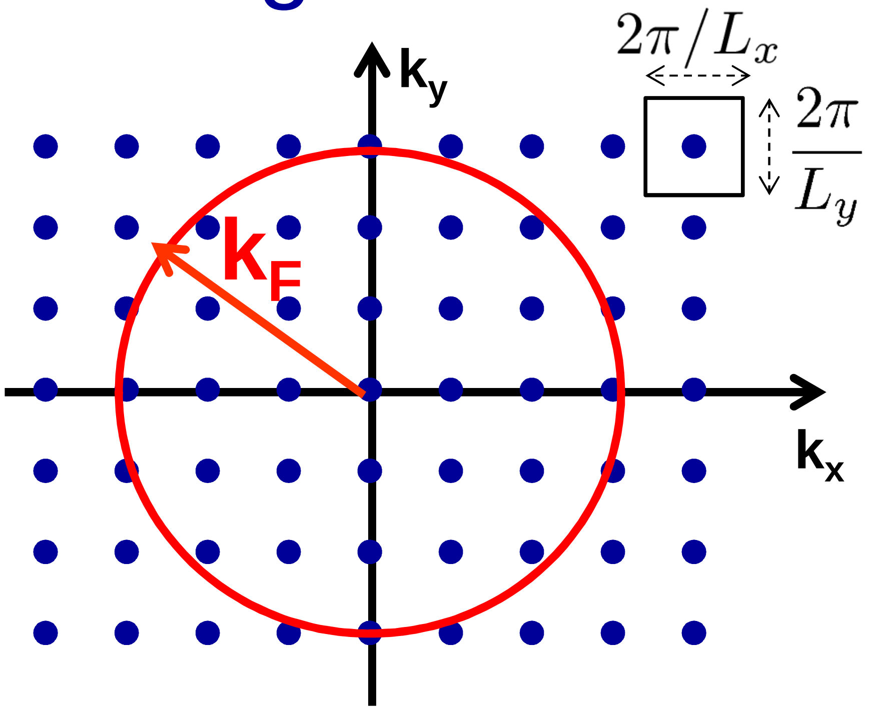
"Volume" de cada estado em k

$$V_{\mathbf{k}}^{1\text{st}} = \left(\frac{2\pi}{L_x}\right)\left(\frac{2\pi}{L_y}\right)\left(\frac{2\pi}{L_z}\right) = \frac{(2\pi)^3}{V_{\mathbf{r}}}$$

No. estados em um volume em k:

$$N_{\text{st}} = \sum_{\mathbf{k}} = \int \frac{d^3\mathbf{k}}{V_{\mathbf{k}}^{1\text{st}}} = V_{\mathbf{r}} \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$

# Energia de Fermi.




- Energia de Fermi $\varepsilon_F$: energia dos últimos estados ocupados.
- $\varepsilon = \varepsilon_F$: **esfera no espaço k**.
- O raio da esfera é o **vetor de onda de Fermi $k_F$**

$$k_F = \frac{\sqrt{2m^* \varepsilon_F}}{\hbar}$$

- Em cada estado ocupado ($k<k_F$) cabem 2 férmions com spin (Pauli).
- Para N férmions "com spin", temos:

$$N = 2 \sum_{|\mathbf{k}|<k_F} = 2V_{\mathbf{r}} \int_{V_{\mathbf{k}}} \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$

Integrando na esfera no espaço k:

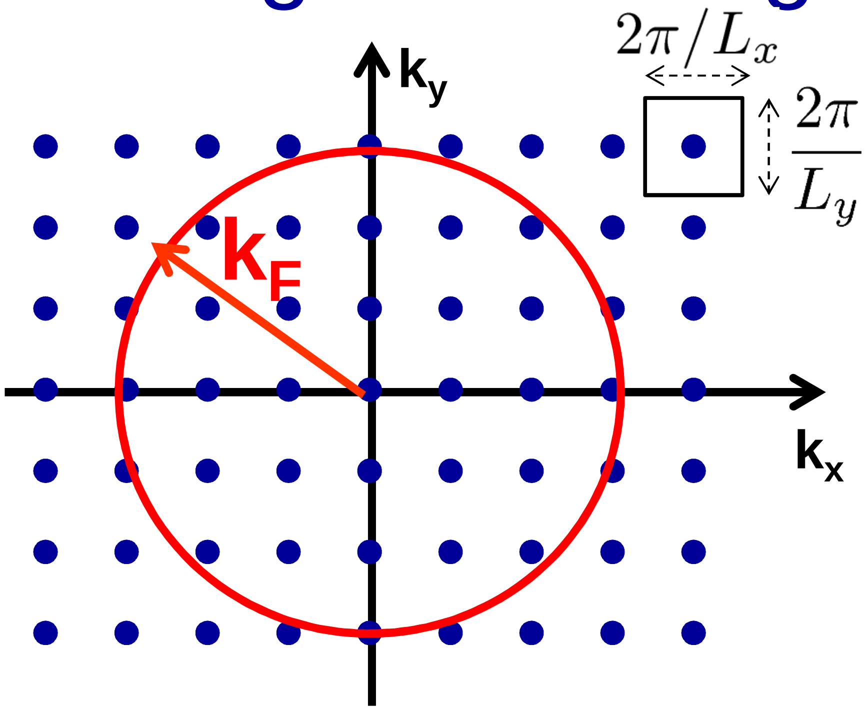
$$\frac{N}{V_{\mathbf{r}}} = \frac{2}{8\pi^3}\frac{4}{3}\pi k_F^3 = \frac{k_F^3}{3\pi^2}$$

- Em termos da densidade $n$=N/$V_r$ :

$$\boxed{\varepsilon_F = \left(\frac{\hbar^2 (3\pi^2)^{\frac{2}{3}}}{2m^*}\right) n^{\frac{2}{3}}}$$

**Em 3D, $\varepsilon_F$ varia com $n^{2/3}$!!**

# Energia total do gás de férmions.




- Somando as energias de cada estado ocupado:

$$E = 2\sum_{|\mathbf{k}|<k_F} \varepsilon_k = 2V_\mathbf{r}\int_{V_\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$

- Integrando e rearranjando:

$$E = \frac{3}{5}V_\mathbf{r} n\varepsilon_F \Rightarrow \frac{E}{N} = \frac{3}{5}\varepsilon_F$$

Energia por partícula em um gás de férmions

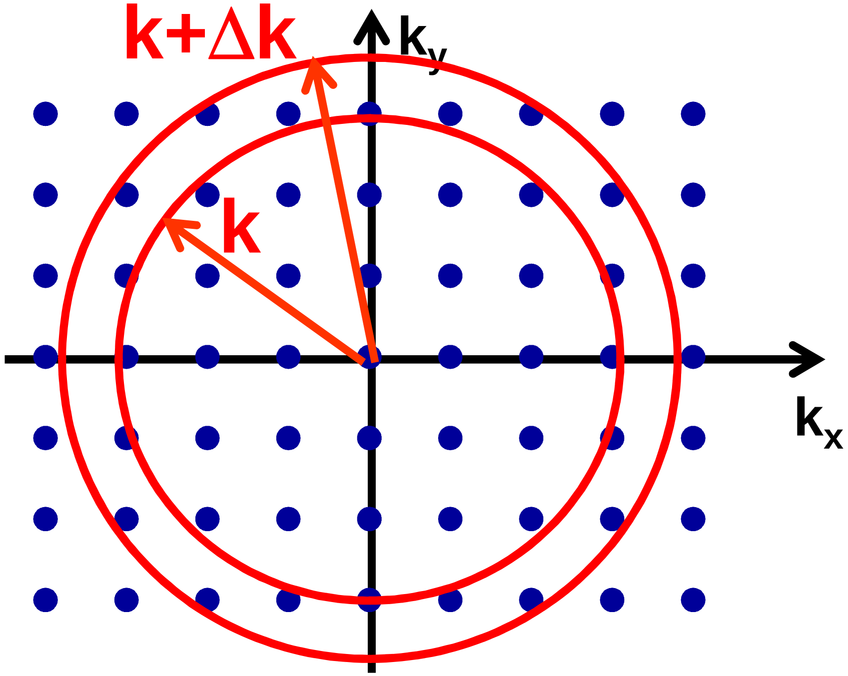
- Valores típicos em metais (cobre) :

$$\varepsilon_F \approx 7.03 \text{ eV} = 81600 \text{ K}/\text{k}_B$$

- Número bom para ter em mente:

$$(1 \text{ meV} = 11.6 \text{ K}/\text{k}_B)$$

# Densidade de estados.




- No de estados entre k e k+Δk (3D):

$$\Delta N_{\mathrm{st}}^{\Delta \mathbf{k}} = 2\frac{\Delta V_{\mathbf{k}}}{V_{\mathbf{k}}^{1\mathrm{st}}} = V_{\mathbf{r}}\frac{8\pi k^2 dk}{(2\pi)^3}$$

$$\boxed{\Delta N_{\mathrm{st}}^{\Delta \mathbf{k}} = V_{\mathbf{r}}\frac{k^2 dk}{\pi^2}}$$

- No de estados entre ε e ε+Δε :

$$\Delta N_{\mathrm{st}}^{\Delta \varepsilon} = \rho(\varepsilon) d\varepsilon$$

onde ρ(ε) é a densidade de estados:

- Convertendo de k para ε:

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \Rightarrow d\varepsilon = \frac{\hbar^2 k dk}{m^*}$$

Como o número de estados é o mesmo , temos:

$$\Delta N_{\mathrm{st}}^{\Delta \mathbf{k}} = \Delta N_{\mathrm{st}}^{\Delta \varepsilon} = \frac{V_{\mathbf{r}}}{2\pi^2}\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \varepsilon^{\frac{1}{2}} d\varepsilon$$

- Densidade de estados em 3D:

$$\boxed{\rho_{3\mathrm{D}}(\varepsilon) = \frac{V_{\mathbf{r}}}{2\pi^2}\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \varepsilon^{\frac{1}{2}}}$$