

# Física Estadística

4º curso Licenciatura de Físicas. 2011-2012

## Lección 8: Sistemas Fermiónicos

- Gas ideal de fermiones degenerado; energía de Fermi.
- Átomos pesados: modelo de Thomas-Fermi.
- Método de Car-Parrinello.
- Enanas blancas: modelo de Chandrasekhar.
- Magnetismo y gas de Fermi (paramagnetismo de Pauli, diamagnetismo de Landau, efecto Hass-van Alphen).
- Propiedades del gas electrónico en metales; coeficientes de transporte.

### 1. Introducción. Fuerte degeneración

Un caso interesante del gas ideal cuántico ocurre para bajas  $T$ 's y/o altas densidades  $\rho$ , esto es para valores del parámetro

$$\delta = \rho g^{-1} \left( \frac{h^2}{2\pi m k_B T} \right)^{3/2} \gg 1.$$

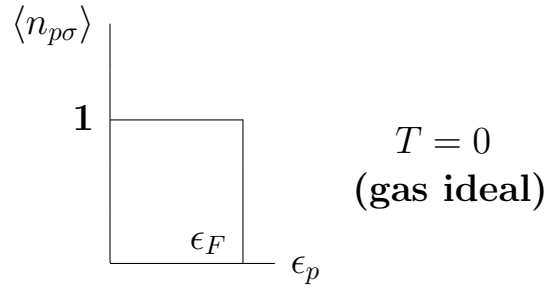
Se dice que el gas está **fuertemente degenerado**, los efectos cuánticos se manifiestan con intensidad, y es necesario estudiar por separado los casos de fermiones y bosones; aquí nos interesa el gas de fermiones fuertemente degenerado.

Si, con  $\rho = \text{const}$ , disminuimos la  $T$  hacia 0 la distribución de fermiones tiende a minimizar la energía total, pero no pueden acumularse las partículas en el estado fundamental, luego la distribución más favorable consistirá en la ocupación sucesiva de cada nivel energético por  $g$  (degeneración) fermiones, empezando por el de mínima energía.

**Energía de Fermi,  $\epsilon_F$**  : es la energía del nivel más alto que se alcanza de este modo suponiendo que tenemos un gas ideal. En esta situación, el número medio de ocupación de los niveles es

$$\langle n_{p\sigma} \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_p - \mu)} + 1} = \Theta(\epsilon_F - \epsilon_p), \quad (1)$$

para  $T \rightarrow 0$  con  $\Theta$  la función paso de Heaviside:



Puesto que, para  $\beta \rightarrow \infty$  :

$$\frac{1}{e^{\beta(\epsilon_p - \mu)} + 1} = \begin{cases} 1 & \text{si } \epsilon_p < \epsilon_F \text{ y } \beta \rightarrow \infty \\ 0 & \text{si } \epsilon_p > \epsilon_F \text{ y } \beta \rightarrow \infty, \end{cases}$$

de modo que

$$\epsilon_p - \mu \text{ es } \begin{cases} < 0 & \text{si } \epsilon_p < \epsilon_F \\ > 0 & \text{si } \epsilon_p > \epsilon_F, \end{cases}$$

se sigue necesariamente que la función  $\mu(T)$  (esto es, la densidad de energía libre de Gibbs o potencial químico) tiene la propiedad:

$$\mu(T = 0) = \epsilon_F$$

Así de la ecuación de estado del gas ideal cuántico si hacemos haciendo  $x = \beta\epsilon$  obtenemos:

$$\begin{aligned} \rho &= \alpha \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{1/2}}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} + 1} = \alpha \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{1/2} \Theta(\epsilon_F - \epsilon_p) \\ &= \alpha \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \epsilon^{1/2} = \alpha \frac{2}{3} \epsilon_F^{3/2}, \end{aligned} \quad (2)$$

Finalmente se sigue que

$$\rho = 2^{5/2} \pi m^{3/2} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} g \frac{2}{3} \epsilon_F^{3/2} = \frac{g}{6\pi^2} \frac{(2m)^{3/2}}{\hbar^3} \epsilon_F^{3/2}$$

luego la energía de Fermi es

$$\epsilon_F = \left( \frac{6\pi^2}{g} \right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m} \rho^{2/3} \quad (3)$$

Se define el **momento de Fermi** para el caso no relativista:

$$p_F \equiv \sqrt{\frac{\epsilon_F}{2m}} = \left( \frac{6\pi^2}{g} \right)^{1/3} \hbar \rho^{1/3}$$

Es notable como el momento de cada fermión en el cero absoluto es grande, en general, lo que hace que el **gas de fermiones completamente degenerado** sea un buen modelo, al menos cualitativo, para algunas situaciones físicas.

Si  $T$  es pequeña, pero finita, algunos fermiones pueden absorber excitaciones térmicas para abandonar el **mar de Fermi**, esto es, tener energías por encima de  $\epsilon_F$ .

Para obtener las expresiones relevantes a  $T$  finita hemos de buscar un desarrollo apropiado para la integral

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

donde  $f(\epsilon)$  es una función arbitraria tal que  $\int d\epsilon f(\epsilon) |_0 = 0$ . A temperaturas suficientemente bajas (gases suficientemente degenerados) puede escribirse (integrando por partes):

$$I = \beta \int_0^{\infty} d\epsilon G(\epsilon) \frac{\exp[\beta(\epsilon - \mu)]}{\{\exp[\beta(\epsilon - \mu)] + 1\}^2}$$

con

$$G(\epsilon) = \int d\epsilon f(\epsilon)$$

Haciendo  $\beta(\epsilon - \mu) = y$ :

$$I = \int_{-\beta\mu}^{\infty} dy G\left(\frac{y}{\beta} + \mu\right) \frac{e^y}{(e^y + 1)^2}.$$

Observamos que  $e^y/(e^y + 1)^2$  es una función positiva que es picuda alrededor de  $y = 0$  y que decrece exponencialmente rápido para  $|y| \rightarrow \infty$ . De esta forma los valores de  $y$  que contribuyen (no exponencialmente) son los que toman valores cercanos al cero. Así podemos desarrollar  $G$  para temperaturas pequeñas suponiendo que  $y/\beta$  son **siempre** pequeños, este desarrollo estará bien definido para  $T \rightarrow 0$ . Así:

$$\begin{aligned} I &= \int_{-\beta\mu}^{\infty} dy \sum_{n \geq 0} \frac{1}{n!} \frac{y^n}{\beta^n} G^{(n)}(\mu) \frac{e^y}{(e^y + 1)^2} \\ &= \sum_{n \geq 0} \frac{1}{n!} \frac{1}{\beta^n} G^{(n)}(\mu) \int_{-\infty}^{\infty} dy y^n \frac{e^y}{(e^y + 1)^2} \end{aligned}$$

donde hemos reemplazado  $-\beta\mu$  por  $-\infty$  puesto que estamos a bajas  $T$ 's ( $\beta \rightarrow \infty$ ) y el error es exponencialmente pequeño. Notamos ahora que el

cociente de exponenciales en el integrando es una función par, luego sólo las potencias pares de  $y$  contribuyen, y podemos escribir

$$I = \sum_{n \geq 0} \frac{1}{(2n)!} \frac{1}{\beta^{2n}} G^{(2n)}(\mu) 2 \int_0^\infty dy y^{2n} \frac{e^y}{(e^y + 1)^2}.$$

Para  $n = 0$ , el término a integrar es  $\int_0^\infty dy \frac{e^y}{(e^y + 1)^2} = \frac{1}{2}$  y, para  $n > 0$ , se tiene integrando por partes:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dy y^{2n} \frac{e^y}{(e^y + 1)^2} &= 2n \int_0^\infty dy y^{2n-1} (e^y + 1)^{-2} \\ &= (1 - 2^{1-2n}) (2n - 1)! \zeta(2n) \\ &= (2^{2n-1} - 1) \pi^{2n} B_n \end{aligned}$$

donde  $B_n$  son los números de Bernoulli. Finalmente,

$$I \simeq \int_0^\mu d\epsilon f(\epsilon) + \sum_{n \geq 1} \frac{2}{(2n)!} (2^{2n-1} - 1) \pi^{2n} B_n (k_B T)^{2n} f^{(2n-1)}(\mu)$$

cuyos primeros términos producen:

$$I = \int_0^\mu d\epsilon f(\epsilon) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 f'(\mu) + \frac{7\pi^4}{360} (k_B T)^4 f'''(\mu) + \dots,$$

Haciendo  $f(\epsilon) = \epsilon^{1/2}$ :

$$\begin{aligned} I_{1/2} &= \int_0^\mu d\epsilon \epsilon^{1/2} + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{1}{2} \mu^{-1/2} + \dots \\ &= \frac{2}{3} \mu^{3/2} \left[ 1 + \frac{\pi^2}{8} \left( \frac{k_B T}{\mu} \right)^2 + \dots \right] \end{aligned}$$

Usando esto en la ecuación de la densidad:  $\rho = \alpha I_{1/2}$ , y llevando el resultado a la expresión de  $\epsilon_F$ , obtenemos:

$$\epsilon_F = \mu \left[ 1 + \frac{\pi^2}{8} \left( \frac{k_B T}{\mu} \right)^2 + \dots \right]^{2/3}$$

Pero  $(1 + x)^{-n} = 1 - nx + (2!)^{-1} n(n+1)x^2 - \dots$ , luego, invirtiendo:

$$\mu = \epsilon_F \left[ 1 + \frac{\pi^2}{8} \left( \frac{k_B T}{\mu} \right)^2 + \dots \right]^{-2/3} \simeq \epsilon_F \left[ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{k_B T}{\mu} \right)^2 + \dots \right]$$

de donde, haciendo  $\mu \simeq \epsilon_F + \dots$ , tenemos (indicando sólo hasta segundo orden en  $T$ ):

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

Otra información termodinámica se sigue de aquí y de la ecuación  $P = P(T, \mu)$ . Por ejemplo, recordando que es  $P = \frac{2}{3} \tilde{\epsilon}$  para todo gas ideal no-relativista, se obtiene

$$\tilde{\epsilon} = \frac{3}{5} n \epsilon_F \left[ 1 + \frac{5\pi^2}{12} \left( \frac{k_B T}{\epsilon_F} \right)^2 + \dots \right]$$

de donde, a  $T$ 's bajas, el calor específico por partícula es

$$C_V = \frac{1}{n} \left( \frac{\partial \tilde{\epsilon}}{\partial T} \right)_n = \frac{\pi^2}{2} \frac{k_B T}{\epsilon_F} k_B,$$

esto es,  $C_V \sim T$  para  $T \rightarrow 0K$  que es el comportamiento típico de los fermiones.

## 2. Modelo estadístico de Thomas-Fermi para átomos (núcleos, moléculas,...) pesados

Suponemos que un átomo neutro está formado por un núcleo puntual de carga  $Ze$  rodeado de  $N$  electrones;  $N = Z$ . Nos interesa conocer las funciones distribución de electrones,  $n(\vec{r})$ , y el potencial eléctrico,  $\varphi(\vec{r})$ , alrededor del núcleo.

El estudio mecanocuántico sistemático (hidrógeno, helio,...) se complica mucho al crecer  $N$ , haciéndose necesario acudir en general a aproximaciones drásticas, incluso para  $N$  relativamente pequeño. Nos preguntamos si es posible un tratamiento mecanoeestadístico de los átomos pesados.

Thomas (1927) y Fermi (1928) lo intentaron aplicando el modelo de **gas ideal de fermiones degenerado**. El método tiene cierta utilidad y es generalizable a moléculas y núcleos; aquí sólo vemos la versión más sencilla.

A grandes rasgos el método está basado en la hipótesis de que, para un átomo pesado en el estado fundamental, los electrones ocuparán los estados de mínima energía sin dejar huecos, de modo que pueden suponerse que son un gas inhomogéneo de Fermi completamente degenerado.

Exigiendo que la configuración esté en equilibrio puede determinarse una ecuación diferencial que relacione  $n(\vec{r})$  y  $\varphi(\vec{r})$  en cada punto  $\vec{r}$ . Al combinar esta ecuación con otra información, se obtiene una función  $n(\vec{r})$  suave que, aunque no presenta a veces los esperados picos bien definidos que se corresponderían con las órbitas electrónicas en la teoría de Bohr, es bastante útil en el cálculo de propiedades globales, como las energías de ligadura.

Sean  $N$  electrones ( $g = 2$ ) completamente degenerados en un volumen  $V$ ,  $n = N/V$ , que llenan, en el espacio de momentos, una esfera de radio  $p_F = (3\pi^2 n)^{1/3} \hbar$  y su energía cinética es  $\epsilon_F = p_F^2/2m = (3\pi^2 n)^{2/3} \hbar^2/2m$ .

Si queremos describir inhomogeneidades suponemos la validez local de estas relaciones, esto es,

$$p_F(\vec{r}) = [3\pi^2 n(\vec{r})]^{1/3} \hbar.$$

Esto equivale a admitir una descripción semi-clásica cuya validez es analizada luego.

En estas condiciones, la energía total de un electrón en el nivel de Fermi y en la posición  $\vec{r}$  es:

$$\epsilon(\vec{r}) = \frac{1}{2m} p_F(\vec{r})^2 - e\varphi(\vec{r}) \quad (4)$$

con  $e$  ( $e > 0$ ) la carga del electrón y  $\varphi(\vec{r})$  un potencial medio debido al núcleo y a los demás electrones.

Como condición límite ( $|\vec{r}| \rightarrow \infty$ ) podemos suponer que nuestro recipiente es un sistema esférico de radio  $|\vec{r}| = r_0$ , donde la densidad en  $r_0$  es  $n(r_0) = 0$  y, como consecuencia  $p_F(r_0) = 0$ . Podemos entonces tomar  $\varphi(r_0) = cte$  y, eligiendo apropiadamente el cero de energía,  $\varphi(r_0) = 0$  (en otro caso, habría que arrastrar esta constante por las ecuaciones que siguen). Por último obtenemos que  $\epsilon(r_0) = 0$ .

Supongamos que el sistema se encuentra en un estado estacionario.  $\epsilon(\vec{r})$  ha de ser el mismo por todo el sistema, incluso en la superficie (de otro modo, habría flujos de electrones, en contra del concepto de estado estacionario), luego  $\epsilon(r) = \epsilon(r_0) \forall r$ , y se sigue

$$\frac{1}{2m} p_F(\vec{r})^2 - e\varphi(\vec{r}) = 0, \quad n(\vec{r}) > 0, \quad \text{estado estacionario}$$

Usando este resultado en la ecuación de estado:

$$n(\vec{r}) = \frac{(2me)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} \varphi(\vec{r})^{3/2}.$$

Por otra parte, puede recuperarse aquí la ecuación de Poisson entre  $\varphi(\vec{r})$  y la distribución de carga,  $\rho(\vec{r})$  :

$$\nabla^2 \varphi(\vec{r}) = -4\pi\rho(\vec{r}) = 4\pi en(\vec{r}) \quad \text{para } r \neq 0.$$

Combinando ambas ecuaciones e introduciendo las variables sin dimensiones,

$$x = 2 \left( \frac{4}{3\pi} \right)^{2/3} Z^{1/3} \frac{me^2}{\hbar^2} r = \frac{Z^{1/3}}{0'885a_B},$$

donde  $a_B$  es el primer radio de Bohr para el hidrógeno, y

$$\phi(x) = \frac{\varphi(r)}{Ze/r},$$

se tiene finalmente (para simetría esférica) la **ecuación de Thomas-Fermi** para este sistema,

$$\frac{d^2 \phi}{dx^2} = \frac{\phi^{3/2}}{x^{1/2}}, \quad x > 0, \quad \phi(x) > 0,$$

que ha de completarse con ecuaciones de contorno adecuadas:

- para  $r \rightarrow 0$ , al aproximar el núcleo,  $\varphi(r) \rightarrow Ze/r$ , pues tiende a cesar el apantallamiento de los electrones, luego

$$\phi(0) = 1$$

- para  $r \rightarrow r_0$ , al aproximar el límite del sistema,  $\varphi(r) \rightarrow 0$  si el átomo es neutro, luego

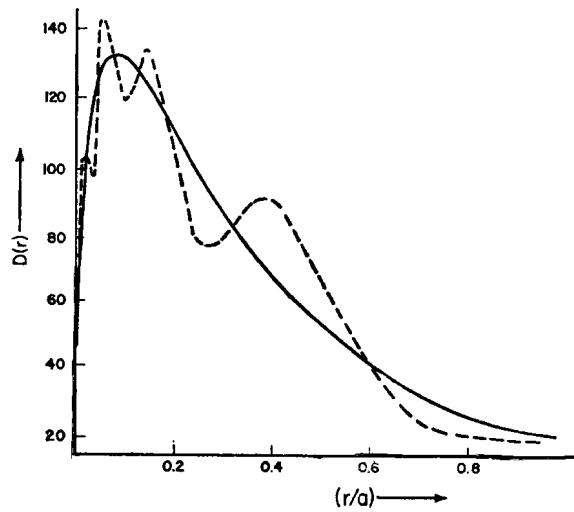
$$\phi(x_0) = 0$$

Conocida  $\phi(x)$ , sigue  $\varphi(r) = \phi(x) \frac{Ze}{r}$  y luego

$$n(\vec{r}) = \frac{(2me)^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3} \varphi(\vec{r})^{3/2}.$$

Un resultado concreto obtenido de este modo es la función  $D(r) \equiv 4\pi r^2 n(r)$  para el mercurio ( $r$  se mide en unidades atómicas de longitud,

$$a = \hbar^2/mc^2):$$



La distribución real (línea discontinua) refleja la preferencia de los electrones por encontrarse cerca de las órbitas semiclásicas, mientras que el modelo (línea continua) sólo produce una descripción correcta en promedio.

También puede determinarse la **energía de ligadura** del átomo calculando la energía total de la nube de electrones.

**Validez de la descripción semi-clásica:**  $p_F(\vec{r}) = [3\pi^2 n(\vec{r})]^{1/3} \hbar$

Está claro que esta localidad sólo está justificada cuando la  $\Lambda$  asociada con el electrón sea suficientemente menor que la longitud característica para las variaciones de  $p_F(\vec{r})$ ,  $n(\vec{r})$  y  $\varphi(\vec{r})$ , lo que podemos intuir que sólo es razonable para átomos suficientemente pesados. Un argumento cuantitativo puede construirse como sigue: Usando este modelo, la energía de ligadura del átomo se estima como  $E \simeq 21Z^{7/3}$  (valor aproximado que puede interpretarse como el primer término en un desarrollo en el que, para los valores de  $Z$  de interés, hay que considerar otros términos), luego:

$$\begin{aligned} &\text{la energía total es } E \propto Z^{7/3} \implies \\ \implies &\text{ la energía media por electrón es } \langle \epsilon \rangle \propto Z^{7/3}/Z = Z^{4/3} \\ \implies &\text{ la longitud de onda térmica es } \Lambda \sim 1/\sqrt{\langle \epsilon \rangle} \sim Z^{-2/3} \end{aligned}$$

Por otra parte, se encuentra que, típicamente, es  $\phi(x) \sim x$ , luego se sigue de la relación entre  $\varphi(r)$  y  $\phi(x)$  que  $\varphi = \frac{Ze}{r}\phi \sim \frac{Zx}{r} \propto \frac{ZZ^{1/3}r}{r} = Z^{4/3}$ .



Entonces:

$$\left. \begin{array}{l} \varphi \sim Z^{4/3} \\ n \propto \varphi^{3/2} \end{array} \right\} \implies n = \frac{N}{V} \equiv \frac{Z}{V} \sim \varphi^{3/2} \sim Z^2 \implies V \sim \frac{Z}{Z^2} = \frac{1}{Z}$$

luego, las dimensiones lineales de este gas de electrones son  $\propto Z^{-1/3}$ . Para que  $\Lambda$  sea mucho menor que esta dimensión característica,  $Z^{-2/3} \ll Z^{-1/3}$ , de manera que  $Z \gg 1$  es la condición de validez de la presente aproximación.

**Dirac (1930)** mejoró esta descripción introduciendo la interacción de intercambio, lo que conduce a

$$\frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} = x \left( \sqrt{\frac{\phi(x)}{x}} + \alpha \right)^3, \quad \alpha = \frac{0'665}{\pi Z^{2/3}}$$

Resolviendo esta ecuación se llega a valores propios que se comparan favorablemente con las medidas experimentales y, lo que es más importante, se obtienen funciones de onda para usar como punto de partida en métodos como el Hartree-Fock.

### 3. Método de Car-Parrinello

Hay varias extensiones de la idea básica de Thomas-Fermi que son de gran utilidad en física de la materia condensada y en aplicaciones tecnológicas (ver por ejemplo **Physics World, July 1996, vol. 9, no. 7, p. 31.**)

Un primer método corresponde al uso de **funcionales de la densidad**. **W. Kohn** que fue Nobel en 1998 por simplificar la descripción teórica de enlaces multielectrónicos donde se evita considerar la función de onda conjunta de todos los electrones por el uso de una densidad electrónica en cada punto del espacio. El otro Nobel de química de 1998, **J. Pople**, lo ha sido por desarrollar métodos computacionales a partir de las anteriores ecuaciones.

Un segundo método es el de **Car-Parrinello** que es una variante de la **Dinámica Molecular**: Se representa un sistema en el ordenador como colección (adecuada) de núcleos y electrones, dando sus posiciones y velocidades iniciales, y se usa teoría (mecanicocuántica) de funcionales densidad para determinar la energía del sistema y las fuerzas sobre los núcleo. Estas fuerzas se incluyen entonces en la ecuación de Newton para calcular el movimiento de los átomos de forma discreta, en un pequeño intervalo de tiempo, por diferencias finitas, y el proceso se repite.

Ya se obtienen resultados significativos, al menos cualitativamente, con un centenar de átomos, lo que requiere entre  $10^4$  y  $10^5$  flops (**floating-point operations**); puesto que las máquinas actuales "lentas" superan el Mflop por segundo, y las rápidas estándar se mueven por los 10 Gflops por segundo, y muy pronto será accesible el Teraflop ( $10^{12}$ ) (¡comparado con las 20 iteraciones por segundo que hacía la HP65 de 1974!), resulta que estas simulaciones son factibles, y, de hecho, casi rutinarias en la simulación de todo tipo de materiales, desde semiconductores y metales de transición hasta silicatos y moléculas orgánicas.

Un ejemplo de aplicación: estudio de procesos catalíticos, como en el control de las emisiones de los automóviles, que contienen monóxido de carbono, altamente tóxico, y óxidos de nitrógeno y sulfuro, que dañan el ambiente. Los **catalizadores** convierten estas sustancias en otras menos nocivas. Su acción se comprende en parte: Uno típico contiene partículas de platino y rodio sobre un soporte cerámico; NO y CO son absorbidos por las superficies metálicas, y se forman enlaces químicos entre las moléculas y el metal; esto debilita los enlaces moleculares, y el NO se separa en átomos de N y de O; el O -ayudado por las superficies- combina entonces con CO para liberar a la atmósfera CO<sub>2</sub>, que es inofensivo.

Pero este ejemplo es ideal: una excepción. Generalmente, no se conocen bien — o en absoluto — los procesos, o la secuencia de éstos. Mejorando su conocimiento permitirá incrementar la eficacia de los **catalizadores** y reducir su costo. Por ejemplo, cuando se conocen los procesos, es conveniente conocer los detalles energéticos, lo que puede conseguirse mediante simulación. El mejor conocimiento de procesos catalíticos tiene gran importancia económica en la producción de fertilizantes, productos farmacéuticos, combustibles, disolventes, y fibras sintéticas.

#### 4. Enanas blancas: modelo de Chandrasekhar.

Históricamente la primera aplicación de la teoría de Fermi es debida a **R.H. Fowler (1926)** que trata de explicar los distintos tipos de evolución que han podido tener distintos tipos de estrellas partiendo de la hipótesis de que se establece un estado de equilibrio en su interior. Este desarrollo es completado por **S. Chandrasekhar (1939, Nobel 1983)**; con la adición de algunos hechos más recientes, es todavía una descripción válida. (ver **S. Chandrasekhar, *Introduction to the Study of Stellar Structure*, Univ. of Chicago Press, Chicago 1939; *Principles of Stellar Dynamics*, Dover**

Pub., NY 1960 ).

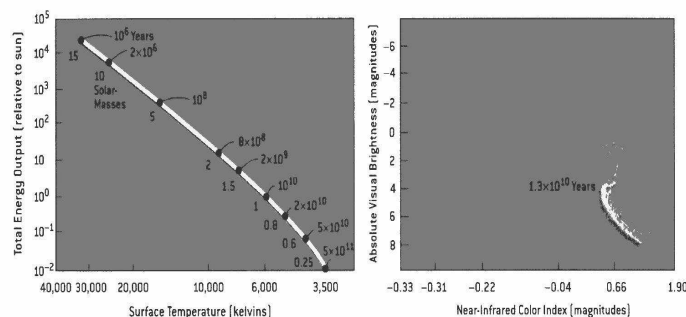
Otras referencias interesantes:

- R.J. Tayler, *Stellar Evolution*, Rep. on Progr. in Physics 31, 167 (1968).
- J. Nuckolls *et al*, *Laser-induced thermonuclear fusion*, Physics Today, August 1973, p. 46.
- Huang p. 230; Pathria p. 243
- W. Herbst & G.E. Assousa, *Supernovas and Star Formation*, Sci. Am. 241, 138 (1979).
- H.A. Bethe, *Supernova Mechanisms*, Rev. of Modern Physics 62, 801 (1990).
- R. Balian y J.P. Blaizot, *Stars and statistical physics: a teaching experience*, cond-mat/9909291.

Para la modelización de la evolución de las estrellas la observación juega aquí un papel más complejo que en otras partes de la ciencia debido a que:

- La escala temporal característica para las variaciones en las propiedades del Sol es de miles de millones de años.
- Las observaciones como las relacionadas con novas, supernovas, etc. podrían ser accidentes más que etapas de una evolución estándar, etc.
- Hay observaciones, como el **esquema de Hertzsprung-Rusell**, a las que viene atribuyéndoseles un gran valor indicativo del proceso seguido por una estrella típica. Así, caracterizando el **brillo** (por ejemplo como el logaritmo de la luminosidad real — la aparente medida en la Tierra corregida de la distancia a la estrella —) y el **color** (mediante un índice de color — una relación entre medidas fotoeléctricas de radiación emitida en bandas bien definidas del espectro, ej. en zonas ultravioleta, azul y amarilla — que, en condiciones normales — si radiasen como cuerpos negros —, se puede relacionar con la temperatura de la superficie de la estrella). Se observa que la mayor parte ( $\sim 90\%$ ) de las estrellas pertenecen a una franja bien definida, **secuencia principal** que implica cierta proporcionalidad entre brillo y

color (las blancas son brillantes, mientras que las rojas son mates):



HERTZSPRUNG-RUSSELL DIAGRAM shows that the energy output and temperature of middle-aged stars fall on a line, the "main sequence." As a star begins to die, it veers off [left]. From the observed brightness and color of stars in the cluster NGC 6652 (right), astronomers have prepared such a diagram and pinpointed which stars are on the verge of dying. [Because of compositional differences, the main-sequence lines are slightly offset.]

¿El 90% es siempre de la secuencia principal, o todas gastan el 90% de su vida en la secuencia principal? Ya Russell proponía — aceptando sugerencia de Kelvin (1861) — que las estrellas evolucionan como consecuencia (únicamente) de la energía gravitatoria liberada en un lento proceso de contracción (gigantes rojas → secuencia principal → enanas blancas). Esta aproximación es aceptable en el modelo actual que, sin embargo, involucra mayor complejidad (otras fuentes de energía, particularmente fusión, contracción del núcleo acompañada de expansión de capas más exteriores, etc.): esencialmente, mediante sucesivos procesos de contracción gravitatoria, fusión, expansión debida a degeneración cuántica, etc, se puede pasar de gran nube de hidrógeno a pequeña enana blanca, supernova, estrella de neutrones, agujero negro,...

Del hecho observacional se concluye que existen (esencialmente) tres clases de estrellas:

- **Estrellas de la secuencia principal:** Nuestro Sol es un ejemplo. Tiene un radio  $R_S = 7 \times 10^8 m$ , masa  $M_S = 2 \times 10^{30} kg$ , luminosidad  $L_S = 3.8 \times 10^{26} w$  y una temperatura en su superficies de  $T_S = 6000 K$  (su densidad media es comparable a la del agua,  $\simeq 1.4 gcm^{-1}$ ). En la secuencia principal todas las estrellas tienen masas que van desde  $0.1 M_S$  hasta  $100 M_S$ . El Sol está compuesto de hidrógeno, el 28% de su masa consiste en núcleos de  $^4He$  y un 2% de otros elementos ligeros. El número total de protones es de  $10^{57}$ .

- **Estrellas Enanas Blancas:** Tienen masas entre  $0.5M_S$  y  $1.4M_S$  y un radio típico de  $5 \times 10^6 m$  (como la Tierra). Su densidad es del orden de  $10^6 gcm^{-3}$ .
- **Estrellas de neutrones:** Tienen masas del orden de  $1.4M_S$  y un radio de 10Km por lo que su densidad es comparable a la del núcleo atómico:  $3 \times 10^{14} gcm^{-3}$ . Las estrellas de neutrones se observan como **púlsares** pues recibimos de ellas pulsos de radiación electromagnética espaciados regularmente en el tiempo. Cuando la masa de la estrella de neutrones es superior a  $3M_s$  se cree que colapsan en agujeros negros.

Vamos a estudiar en este contexto un **modelo idealizado de estrella enana blanca:**

- Temperatura central  $T \approx 10^7 K$ , a la que corresponde una energía térmica  $k_B T \approx 10^3 eV$ , para la que todo el helio ha de estar prácticamente ionizado.
- Masa  $M \approx 10^{33} gr$
- Densidad de masa  $\rho \approx 10^7 gr/cm^3$ . (Para el Sol,  $M$  y  $T$  son comparables, pero su densidad es  $\rho \approx 1 gr/cm^3$ .)

Si suponemos que toda la masa  $M$  es de helio ( $2e+2p+2n$ ), podemos suponerla formada por  $N$  electrones (de masa  $m$ ) y  $N/2$  núcleos de helio (de masa  $2m_p + 2m_n \simeq 4m_p$ ), y se tiene

- **masa:**

$$M \simeq Nm + \frac{N}{2}4m_p = N(m + 2m_p) \simeq 2Nm_p,$$

- **densidad de electrones:**

$$n = \frac{N}{V} \approx \frac{M/2m_p}{M/\rho} = \frac{\rho}{2m_p} = \frac{10^7 gr/cm^3}{3/4 \times 10^{24} gr} \sim \mathcal{O}\left(10^{30} \text{ electrones/cm}^3\right),$$

- **momento de Fermi:**

$$p_F = (3\pi^2 n)^{1/3} \hbar \approx 10^{10} \times 10^{-27} \sim \mathcal{O}(10^{-17} gr \text{ cm/s}),$$

- **energía de Fermi:**

$$\epsilon_F = p_F^2/2m \sim \mathcal{O}(10^{-7} \text{ ergios}) = \mathcal{O}(10^5 \text{ eV}),$$

- **temperatura de Fermi:**

$$T_F \equiv \epsilon_F/k \sim \mathcal{O}(10^{10} \text{ K})$$

Observamos que

- $p_F$  es comparable al momento ( $mc \simeq 9 \times 10^{-28} \text{gr} \times 3 \times 10^{10} \text{cm/s} \approx 10^{-17} \text{gr cm/s}$ ) del electrón, y  $\epsilon_F$  es comparable a la energía en reposo  $mc^2$  del electrón, se sigue que la dinámica de los electrones en las enanas blancas es relativista.
- aunque  $T$  está muy por encima de las temperaturas típicas en la Tierra, es muy inferior a la de Fermi ( $T_F/T \sim 10^3$ ), de modo que el gas de electrones está fuertemente degenerado.

Estos hechos sugieren que el modelo idealizado de una estrella enana blanca es **un gas de Fermi muy degenerado** (esto es, en el estado fundamental) formado por  $N$  electrones relativistas que se mueven en el campo creado por  $N/2$  núcleos de helio, supuestos sin movimiento, que proporcionan la cohesión gravitatoria.

Así, los únicos efectos que esperamos son:

- Tendencia a la contracción gravitatoria hacia el centro de la estrella.
- Presión hacia fuera debida al gran momento medio que tienen los electrones (**presión de degeneración**).

## Gas relativista de Fermi completamente degenerado

**La energía (cinética)** de una partícula relativista, usando  $\theta$  sin dimensiones tal que  $p \equiv mc \sinh \theta$  :

$$\begin{aligned} \epsilon &= \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2} - mc^2 = mc^2 \left\{ \left[ 1 + \left( \frac{p}{mc} \right)^2 \right]^{1/2} - 1 \right\} \\ &= mc^2 \left[ (1 + \sinh^2 \theta)^{1/2} - 1 \right] = mc^2 (\cosh \theta - 1) \end{aligned}$$

y **la velocidad**:

$$u \equiv \frac{\partial \epsilon}{\partial p} = \frac{2pc^2}{2\sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2}} = c \frac{p/mc}{\sqrt{1 + (p/mc)^2}} = c \tanh \theta$$

En el cero absoluto, **la energía total** del gas (suponiendo degeneración  $g = 2$  — como para electrones —, y una descripción continua — sistema

macroscópico) es

$$\begin{aligned} E_0 &= 2 \sum_{|\vec{p}| < p_F} \epsilon \simeq \frac{2V}{h^3} \int_0^{p_F} \epsilon \, 4\pi p^2 \, dp \\ &= \frac{8\pi V m^4 c^5}{h^3} \int_0^{\theta_F} \sinh^2 \theta (\cosh \theta - 1) \cosh \theta \, d\theta \end{aligned}$$

**La presión (presión de degeneración)** se puede calcular  $P_0 = -\partial E_0 / \partial V$  notando que  $\theta_F$  (tal que  $p_F \equiv mc \sinh \theta_F$ ) depende de  $V$ ; de hecho,  $p_F$  puede definirse:  $2 \frac{V}{h^3} \left( \frac{4}{3} \pi p_F^3 \right) = N$ . Alternativamente, recordar que

$$P \equiv \frac{1}{3} \rho \langle u \cdot u \rangle = \frac{1}{3} \frac{M}{V} \langle u \cdot u \rangle = \frac{1}{3} \frac{Nm}{V} \langle u \cdot u \rangle = \frac{1}{3} \frac{N}{V} \langle p \cdot u \rangle$$

para el caso no-relativista y que, para el relativista, todavía puede escribirse

$$P = \frac{1}{3} \frac{N}{V} \langle p \cdot u \rangle$$

aunque ahora es  $p \neq mu$  ( $p = mc \sinh \theta \neq mu = m c \tanh \theta$ ). En el cero absoluto,

$$\langle p \cdot u \rangle_0 = \frac{2 \sum_{|\vec{p}| < p_F} p u}{2 \sum_{|\vec{p}| < p_F} 1} = \frac{\frac{2V}{h^3} \int_0^{p_F} p u \, 4\pi p^2 \, dp}{N}$$

de donde se sigue

$$\begin{aligned} P_0 &\equiv \frac{1}{3} \frac{N}{V} \langle p \cdot u \rangle_0 = \frac{2}{3h^3} \int_0^{p_F} p u \, 4\pi p^2 \, dp = \frac{8\pi}{3h^3} \int_0^{p_F} u \, p^3 \, dp \\ &= \frac{8\pi m^4 c^5}{3h^3} \int_0^{\theta_F} \sinh^4 \theta \, d\theta \end{aligned}$$

Usando las definiciones:

$$x \equiv \sinh \theta_F = \frac{p_F}{mc} = (3\pi^2 n)^{1/3} \frac{\hbar}{mc}, \quad (5)$$

$$A(x) = x(2x^2 - 3) \sqrt{x^2 + 1} + 3 \sinh^{-1} x$$

$$B(x) = 8x^3 \left( \sqrt{x^2 + 1} - 1 \right) - A(x)$$

se tiene:

$$P_0 = \frac{\pi m^4 c^5}{3h^3} A(x), \quad E_0 = \frac{\pi m^4 c^5}{3h^3} V B(x) \quad (6)$$

El comportamiento asintótico de las funciones  $A(x)$  y  $B(x)$  es:

$$A(x) = \begin{cases} \frac{8}{5}x^5 - \frac{4}{7}x^7 + \frac{1}{3}x^9 - \frac{5}{22}x^{11} + \dots, & x \ll 1 \\ 2x^4 - 2x^2 + 3 \left( \ln 2x - \frac{7}{12} \right) + \frac{5}{4x^2} + \dots, & x \gg 1 \end{cases} \begin{cases} \text{no relativ.} \\ mc \gg p_F \\ \\ \text{relativista} \\ mc \ll p_F \end{cases}$$

$$B(x) = \begin{cases} \frac{12}{5}x^5 - \frac{3}{7}x^7 + \frac{1}{6}x^9 - \frac{15}{176}x^{11} + \dots, & x \ll 1, \text{ no relativ.} \\ 6x^4 - 8x^3 + 6x^2 - 3 \left( \ln 2x - \frac{1}{4} \right) + \frac{3}{4x^2} + \dots, & x \gg 1, \text{ relativista} \end{cases}$$

Las ecuaciones anteriores establecen una relación funcional entre  $P_0$  y el radio  $R$  de la estrella enana blanca, supuesta esférica. En efecto, puesto que  $x$  depende del volumen de la estrella, se tiene:  $P_0 = P_0(n) = \tilde{P}_0(V) = \hat{P}_0(R)$ .

El resultado es que, para una masa  $M$  dada,  $P_0$  aumenta rápidamente al disminuir  $R$ , tanto si la estrella es relativista como si no. Podemos entonces preguntarnos por el estado en el que se compensa  $P_0$  con la presión debida a la fuerza gravitatoria, si esto es posible.

En efecto, el gas uniforme de fermiones (esto es, la estrella) ejerce una presión  $P_0(n)$  sobre unas paredes imaginarias que implica un trabajo:

$$\int_{\infty}^R P_0 4\pi r^2 dr;$$

es decir, una caja o un agente externo tienen que hacer el negativo de este trabajo para comprimir la estrella desde un estado de densidad cero hasta un estado de densidad finita (suponemos una esfera de radio  $R$ ). Es claro que este agente externo es la interacción gravitatoria en la propia estrella, que origina una energía de la forma  $-\alpha GM^2/R$ . Si  $R$  es el radio de equilibrio, esta energía ha de compensar el trabajo hecho al comprimir la estrella, de donde se sigue el resultado

$$\int_{\infty}^R P_0 4\pi r^2 dr = -\alpha \frac{G M^2}{R}$$

Donde  $\alpha = 3/5$  si suponemos que la densidad es constante en el interior de la estrella.

Derivando respecto de  $R$ :

$$P_0 = \frac{\alpha G M^2}{4\pi R^4},$$

que es la relación que caracteriza nuestro modelo de estrella enana blanca.



La condición anterior ha de completarse con la dependencia  $P_0(R)$  obtenida anteriormente. Veamos casos explícitos:

- $T \gg T_F \simeq 10^{10}\text{K}$ : el sistema puede aproximarse por un gas (clásico) de Boltzmann, esto es,  $P_0 = nk_B T$ , y se sigue

$$R = \frac{2}{3}\alpha M \frac{\mathbf{G} m_p}{k_B T}.$$

Donde hemos usado el hecho que  $M \simeq 2Nm_p$ , y

$$n = \frac{N}{V} = \frac{M/2m_p}{\frac{4}{3}\pi R^3} = \frac{3M}{8\pi m_p R^3}.$$

Obviamente este caso puede usarse para comparar pero, por supuesto, no es aplicable a las estrellas enanas blancas donde  $T \sim 10^7$  K. Sin embargo si es aplicable al estudio de las protoestrellas donde predice correctamente el hecho de que el radio va disminuyendo mientras que la temperatura va aumentando. Cuando se llega al estadio de fusión del Hidrógeno se ha de tener en cuenta ese hecho como un mecanismo extra en la equilibración de la estrella.

- $T \ll T_F$  y **baja densidad de electrones**: Esto es, tenemos un gas ideal fuertemente degenerado de electrones no relativistas. En este caso recordemos que  $P_0$  dependía de

$$x = \frac{p_F}{mc} = \left(3\pi^2 \frac{N}{V}\right)^{1/3} \frac{\hbar}{mc} \quad (7)$$

y que

$$x \begin{cases} \ll \\ \sim \\ \gg \end{cases} 1 \implies R \begin{cases} \gg \\ \sim \\ \ll \end{cases} 10^8 \text{cm} \implies \begin{cases} \text{caso no relativista} \\ \text{caso relativista} \end{cases}$$

Luego en este caso tenemos que  $x \ll 1$  lo que implica que  $R \gg 10^8$  (en contra de lo observado para las enanas blancas) y  $A(x) \simeq \frac{8}{5}x^5$ , de donde

$$P_0 \simeq \frac{\pi m^4 c^5}{3h^3} \frac{8}{5} x^5 \propto n^{5/3} \propto \frac{M^{5/3}}{R^5}.$$

Usando esta expresión en la condición de equilibrio obtenemos:

$$R \simeq \frac{3(9\pi)^{2/3}}{40\alpha} \frac{\hbar^2}{\mathbf{G} m m_p^{5/3} M^{1/3}} \propto M^{-1/3}$$

- $T \ll T_F$  y alta densidad de electrones: En este caso si son importantes los efectos relativistas y  $x \gg 1$  lo que implica  $R \ll 10^8$  cm y  $A(x) \simeq 2x^4 - 2x^2$ , y se tiene:

$$R \simeq \frac{\sqrt[3]{9\pi}}{2} \frac{\hbar}{mc} \left(\frac{M}{m_p}\right)^{1/3} \sqrt{1 - \left(\frac{M}{M_0}\right)^{2/3}} \propto M^{1/3} \sqrt{1 - \left(\frac{M}{M_0}\right)^{2/3}},$$

con la constante (con dimensiones de masa).

$$M_0 = \frac{9}{64} \left(\frac{3\pi}{\alpha^3}\right)^{1/2} \frac{(\hbar c/G)^{3/2}}{m_p^2}.$$

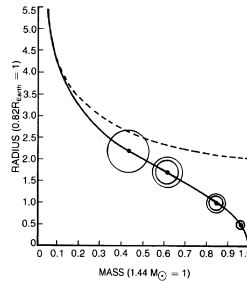


Figure 1: Masa versus radio. La curva discontinua. se sigue de las consideraciones de degeneración no-relativista de Fowler: el radio para la configuración de equilibrio disminuye, pero sólo se hace cero para masa infinita. En este caso, una estrella de cualquier masa puede confortablemente equilibrarse en el estado estrella enana blanca. Esto no ocurre para configuraciones completamente degeneradas. (Dibujo del propio Chandrasekhar.)

### Conclusiones:

- No es posible tener una estrella enana blanca con  $M > M_0$  puesto que la ecuación de equilibrio no tiene soluciones reales.
- $M_0$  es el **límite de Chandrasekhar** y resulta  $M_0 \approx 10^{33}$ gr.
- Chandrasekhar llegó a estimar  $M_0 = 5.75 (\mu_e)^{-2} M_\odot$ , donde
 
$$M_\odot \simeq 2 \times 10^{33} \text{gr es la masa del Sol}$$

$$\mu_e \text{ es el grado de ionización del gas.}$$
- En la práctica,  $\mu_e \simeq 2$ , luego se sigue  $M_0 \simeq 1.44 M_\odot$ .
- No se tiene noticia de la existencia de estrellas enanas blancas mayores.

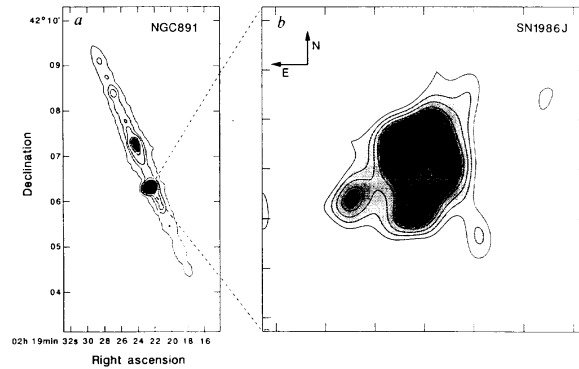


Figure 2: Supernova 1986J en la galaxia NGC891. Extraordinariamente luminosa se estima que la explosión ocurrió a finales de 1982 (incertidumbre de 8 meses). La estrella madre tenía probablemente una masa 20 ó 30 veces la del Sol. Se expande con velocidad media inferior a unos 15.000 km/s

- Para estrellas con masa  $M > M_{\odot}$  la presión de degeneración  $P_0$  consecuencia del principio de exclusión de Pauli no es suficiente para contrarrestar la tendencia al colapso gravitacional y el sistema sigue contrayéndose generando nuevos fenómenos.

## Galeria de Imágenes:



# “Estuve preocupado por la posibilidad de inteligencia extraterrestre”

J. S. Santander “Estaba enormemente preocupado”, reconocía el otro día Anthony Hewish, el descubridor de los púlsares. “Si aquello eran realmente señales de seres inteligentes extraterrestres, ¿qué debía hacer yo como científico?: ¿hacerlo público?, ¿devolver el mensaje de radioseñales, diciéndoles ‘eh, estamos aquí’, con el riesgo de que los emisores tuvieran en su planeta graves problemas demográficos o de otro tipo y vinieran a conquistarnos?”.

Hewish recuerda ahora sus tribulaciones sin perder su cortés sonrisa ni su flema británica, pero lo cierto es que en aquellos días se pasó tres semanas sin apenas dormir. “Tres semanas era el tiempo que necesitaba para determinar con precisión la procedencia de la señal. Si eran seres vivos, debían estar en un planeta, y la precisión de las señales era suficiente para determinar si sus movimientos orbitales eran los esperables de un planeta”. Hewish trabajó febrilmente,

tratando de corregir los efectos que sobre sus mediciones primaría la propia rotación de Tierra. El resultado: la señal provenía de un planeta, sino la propia estrella pequeña, del púlsar.

“Por un lado, fue decepcionante”, admite Hewish, “pero por otro me sentí muy aliviado al saber que lo que tenía en manos era un mero descubrimiento científico y no una cuestión de política galáctica”. Recibió el Premio Nobel de Física en 1974 por su descubrimiento.

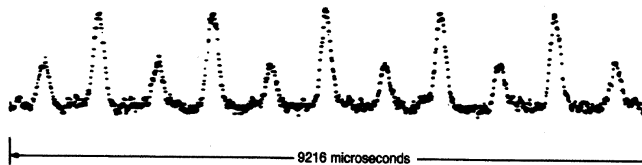
*El País 4/9/96*



Anthony Hewish (a la izquierda) y Joseph Taylor en Santander la pasada semana.

*Nobel 1974*

**ANTHONY HEWISH ► DESCUBRIDOR DE LOS PÚLSARES**



Waveform of the pulsating radio signal from the millisecond pulsar recently discovered at Arecibo by Donald Backer and his colleagues. The full period of 1.558 milliseconds shows a main peak separated from a secondary peak by about 180°. The two peaks presumably come from the opposite magnetic poles of the rapidly spinning neutron star. Most of the pulse width seen here is attributed to the signal-averaging instrumentation rather than the intrinsic signal.

PHYSICS TODAY / MARCH 1983

## 5. Magnetismo y gas de Fermi: paramagnetismo de Pauli, diamagnetismo de Landau, efecto Hass-van Alphen.

Las propiedades magnéticas de la materia son consecuencia esencialmente de los electrones (libres o ligados), luego el estudio de las propiedades magnéticas de un gas (ideal) de electrones es relevante en este contexto.

Como ya sabemos los electrones en presencia de un campo, tanto si son libres como si están ligados a los átomos, presentan dos efectos importantes conceptualmente distintos:

- (a) Tienden a describir órbitas cuantizadas, lo que origina el **diamagnetismo**, caracterizado por la susceptibilidad,

$$\chi \equiv \lim_{\mathcal{H} \rightarrow 0} \frac{\partial M_z}{\partial \mathcal{H}},$$

**negativa**. Recordar que  $\vec{M} = (M_x, M_y, M_z \equiv M_{\vec{\mathcal{H}}})$  es la magnetización con que responde el sistema al campo aplicado.

- (b) Los espines de los electrones tienden a alinearse con  $\vec{\mathcal{H}}$ , originando el **paramagnetismo**, con  $\chi > 0$ .

Estos efectos coexisten en los sistemas reales, que manifiestan el resultado de la competencia, pero pueden imaginarse independientes (lo que simplifica su estudio) si la interacción espín-órbita es despreciable.

### Paramagnetismo de Pauli:

Como ya vimos, el paramagnetismo clásico se dice de Langevin. Así vimos que la teoría de Langevin describe muy bien el comportamiento de muchas sustancias a temperaturas altas. En particular se obtiene que:

$$M_z = n\bar{\mu}B_J(x), \quad x \equiv \frac{\bar{\mu}\mathcal{H}}{k_B T}$$

con  $n$  la densidad de partículas,  $\bar{\mu} = g\mu_B J$ ,  $g$  el factor de Landé,  $\mu_B$  el magnetón de Bohr,  $J$  el número cuántico de momento angular total,  $B_J(x)$  la función de Brillouin. Esto implica el comportamiento de  $\chi$  fuertemente condicionado por  $T$  así:

- (1): Para temperaturas altas,  $\chi = \mathcal{C}/T$ , con  $\mathcal{C}$  la **constante de Curie**, lo que está de acuerdo con experimentos a temperaturas suficientemente altas.

(2): Para temperaturas bajas se tiende al estado de saturación magnética:

$$M_z = n\bar{\mu} = ng\mu_B J \implies \chi = 0$$

pues la agitación térmica es despreciable, y casi todos los momentos estarán orientados en la dirección de  $\vec{\mathcal{H}}$ .

Pero la situación experimental a bajas temperaturas no coincide con esta predicción. **Se observa con generalidad que a temperaturas suficientemente bajas la susceptibilidad es una constante no nula.**

**Pauli (1927)** explicó este desacuerdo como consecuencia de que los electrones de conducción de los metales alcalinos son gas de Fermi muy degenerado. Pauli razona que como consecuencia del principio de exclusión no puede alcanzarse la saturación magnética a temperatura cero: si dos electrones están en el mismo estado es imposible que tengan sus espines en la dirección  $\vec{\mathcal{H}}$ . Por lo tanto, ha de esperarse una susceptibilidad límite,  $\chi_0$ , que será independiente de la temperatura aunque probablemente con fuerte dependencia en la densidad del gas. De hecho, incluso suponiendo que el gas es ideal, el resultado es entonces acorde con los datos.

El hamiltoniano de un electrón libre no-relativista en un campo magnético externo,  $\vec{\mathcal{H}}$  es:

$$\frac{1}{2m} \left( \vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - \vec{\mu} \cdot \vec{\mathcal{H}}$$

con  $\vec{\mu}$  el operador momento magnético intrínseco del electrón (proporcional al operador de espín).

Sean  $N$  fermiones libres de espín  $\hbar/2$  y energía

$$\epsilon = \frac{p^2}{2m} - \vec{\mu} \cdot \vec{\mathcal{H}}$$

En estas condiciones,  $\vec{\mu}$  es paralelo o antiparalelo a  $\vec{\mathcal{H}}$ , luego  $\vec{\mu} \cdot \vec{\mathcal{H}} = \mu \vec{\sigma} \cdot \vec{\mathcal{H}}$  (donde los valores propios de  $\vec{\sigma} \cdot \vec{\mathcal{H}}$  son  $\sigma \mathcal{H}$  con  $\sigma = \pm 1$ ) y pueden distinguirse dos tipos de partículas en el gas con energía respectivas

$$\epsilon = \frac{p^2}{2m} \pm \mu \mathcal{H}$$

y procede estudiar esta mezcla.

Sea  $n_p^\pm$  el número de partículas con momento  $\vec{p}$  cuyo momento magnético

es paralelo (antiparalelo) al campo. La energía total del gas es

$$\begin{aligned}
 E &= \sum_{\vec{p}} \left[ \left( \frac{p^2}{2m} - \bar{\mu}\mathcal{H} \right) n_p^- + \left( \frac{p^2}{2m} + \bar{\mu}\mathcal{H} \right) n_p^+ \right] \\
 &= \sum_{\vec{p}} \frac{p^2}{2m} (n_p^+ + n_p^-) - \bar{\mu}\mathcal{H} \sum_{\vec{p}} (n_p^+ - n_p^-) \\
 &= \sum_{\vec{p}} \frac{p^2}{2m} (n_p^+ + n_p^-) - \bar{\mu}\mathcal{H} (N^+ - N^-)
 \end{aligned}$$

la función de partición se sigue de

$$Z = \sum_{\substack{N=N^++N^-=\sum_{\vec{p}} n_p^++\sum_{\vec{p}} n_p^- \\ n_p^\pm=0,1}} \exp(-\beta E)$$

que puede calcularse fijando  $N^+$  (que fija  $N^- = N - N^+$ ), sumando sobre todos los posibles  $n_p^\pm$ , y sumando sobre  $N^+$ , desde  $N^+ = 0$  hasta  $N^+ = N$ , esto es,

$$\begin{aligned}
 Z &= \sum_{N^+=0}^N \left[ e^{\beta\bar{\mu}\mathcal{H}(2N^+-N)} \left( \sum_{\substack{n_p^+ \\ (\sum n_p^+=N^+)}} e^{-\beta\sum_{\vec{p}} \frac{p^2}{2m} n_p^+} \right) \left( \sum_{\substack{n_p^- \\ (\sum n_p^-=N^-)}} e^{-\beta\sum_{\vec{p}} \frac{p^2}{2m} n_p^-} \right) \right] \\
 &= e^{-\beta\bar{\mu}\mathcal{H}N} \sum_{N^+=0}^N \left[ e^{2\beta\bar{\mu}\mathcal{H}N^+} Z_0(N^+) Z_0(N - N^+) \right]
 \end{aligned}$$

donde

$$Z_0(\mathcal{N}) = \sum_{\substack{n_p=\pm 1 \\ (\sum n_p=\mathcal{N})}} e^{-\beta\sum_{\vec{p}} \frac{p^2}{2m} n_p} \equiv \exp[-\beta A_0(\mathcal{N})]$$

representa la función de partición de un gas ideal de Fermi de  $\mathcal{N}$  partículas **sin espín** de masa  $m$ , y  $A_0(\mathcal{N})$  es la energía libre de este sistema ficticio.

Tomando logaritmos:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{N} \ln Z(N) &= -\beta\bar{\mu}\mathcal{H} \\
 + \frac{1}{N} \ln \sum_{N^+=0}^N &\underbrace{\exp[2\beta\bar{\mu}\mathcal{H}N^+ - \beta A_0(N^+) - \beta A_0(N - N^+)]}_{\equiv f(N^+)}
 \end{aligned}$$

Las propiedades de la distribución  $f(N^+)$  nos son familiares. Aplicando **steepest descends** se tiene

$$\frac{1}{N} \ln Z(N) = -\beta \bar{\mu} \mathcal{H} + \frac{1}{N} \ln f(\bar{N}^+)$$

donde  $\bar{N}^+$  es el valor de  $N^+$  que hace  $f(N^+)$  máximo.

El número medio de partículas con espín paralelo en el estado de equilibrio,  $\bar{N}^+$ , se sigue de la condición de máximo,

$$2\bar{\mu}\mathcal{H} - \left[ \frac{\partial A_0(N^+)}{\partial N^+} \right]_{\bar{N}^+} - \left[ \frac{\partial A_0(N - N^+)}{\partial N^+} \right]_{\bar{N}^+} = 0,$$

que equivale a

$$\mu_0(\bar{N}^+) - \mu_0(N - \bar{N}^+) = 2\bar{\mu}\mathcal{H}$$

con  $\mu_0(N)$  el potencial químico del sistema ficticio.

Si definimos  $r$  tal que:

$$\bar{N}^+ = \frac{1+r}{2}N, \quad \bar{N}^- = \frac{1-r}{2}N,$$

se puede expresar la condición anterior como una ecuación para  $r$ :

$$\mu_0\left(\frac{1+r}{2}N\right) - \mu_0\left(\frac{1-r}{2}N\right) = 2\bar{\mu}\mathcal{H}$$

Por último, conocido  $\bar{N}^+$ , la magnetización se sigue ( $\bar{N}^- = N - \bar{N}^+$ ) de

$$M = \bar{\mu}(\bar{N}^+ - \bar{N}^-) \equiv \bar{\mu}Nr, \quad (0 \leq r \leq 1)$$

Para  $\mathcal{H} = 0$ , no hay dirección preferida por los espines, luego  $M = 0$  y  $r = 0$  si  $\mathcal{H}$  es suficientemente pequeño, se puede desarrollar alrededor de  $r = 0$  para escribir:

$$\begin{aligned} \mu_0\left(\frac{N}{2}\right) + \frac{r}{2} \left[ \frac{\partial \mu_0(xN)}{\partial x} \right]_{x=\frac{1}{2}} + \dots - \mu_0\left(\frac{N}{2}\right) + \\ \frac{r}{2} \left[ \frac{\partial \mu_0(xN)}{\partial x} \right]_{x=\frac{1}{2}} + \dots = 2\bar{\mu}\mathcal{H} \end{aligned}$$

de donde

$$\chi = \frac{1}{V} \lim_{\mathcal{H} \rightarrow 0} \frac{\partial M}{\partial \mathcal{H}} = \frac{2\bar{\mu}^2 n}{\left[ \frac{\partial \mu_0(xN)}{\partial x} \right]_{x=\frac{1}{2}}}$$

Para hacer explícito este resultado, hay que usar aquí la expresión adecuada para el potencial químico del sistema de partículas sin espín.



- cerca del cero absoluto ( $\mu \simeq \epsilon_F$ ), de modo que, al hacer  $T \rightarrow 0$  tenemos que

$$\mu \simeq \epsilon_F = \left( \frac{3N}{4\pi gV} \right)^{2/3} \frac{h^2}{2m}$$

luego se tiene para el sistema ficticio ( $g = 1$ , y cambiando  $N \rightarrow xN$ ):

$$\mu_0(xN) = x^{2/3} \left( \frac{3N}{4\pi V} \right)^{2/3} \frac{h^2}{2m}$$

y para el sistema real ( $g = 2$ )

$$\epsilon_F^{\text{real}} = \frac{1}{2^{2/3}} \left( \frac{3N}{4\pi V} \right)^{2/3} \frac{h^2}{2m}.$$

Así:

$$\left[ \frac{\partial \mu_0(xN)}{\partial x} \right]_{x=\frac{1}{2}} = \frac{2}{3} \underbrace{\left[ x^{-1/3} \right]_{1/2}}_{2^{4/3}/3} \left( \frac{3N}{4\pi V} \right)^{2/3} \frac{h^2}{2m} = \frac{2^2}{3} \epsilon_F^{\text{real}}$$

y se sigue:

$$\chi_0 = \frac{2\bar{\mu}^2 n_3}{2^2 \epsilon_F^{\text{real}}} = \frac{3}{2} \bar{\mu}^2 \frac{n}{\epsilon_F^{\text{real}}}$$

que es no-nula e independiente de  $T$  (pero depende de  $n$ ).

- Para temperaturas bajas, es

$$\mu \simeq \epsilon_F \left[ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{k_B T}{\epsilon_F} \right)^2 \right]$$

y se sigue que

$$\chi \simeq \chi_0 \left[ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{k_B T}{\epsilon_F} \right)^2 \right]$$

- Para discutir temperaturas mayores usamos la ecuación de estado paramétrica para el gas ideal de fermiones:

$$\begin{aligned} n &= g\Lambda^{-3} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx \frac{x^{1/2}}{\exp(x - \mu/k_B T) + 1} \\ &= \frac{g}{\Lambda^3} \left( z - \frac{z^2}{2^{3/2}} + \frac{z^3}{3^{3/2}} + \dots \right), \end{aligned}$$

donde la segunda igualdad es para  $z \equiv e^{\mu/k_B T} \ll 1$ . En consecuencia,

– Si  $T \rightarrow \infty$  :

$$z = e^{\beta\mu} \simeq \frac{\Lambda^3 N}{g V} \implies \mu \simeq k_B T \ln \left( \frac{N\Lambda^3}{gV} \right).$$

Así, para el sistema ficticio con  $g = 1$  es:  $\mu_0(xN) \simeq k_B T \ln(xN\Lambda^3/gV)$ , de donde

$$\left[ \frac{\partial \mu_0(xN)}{\partial x} \right]_{x=\frac{1}{2}} = \left[ k_B T \frac{1}{xN\Lambda^3/gV} \left( \frac{N\Lambda^3}{V} \right) \right]_{x=\frac{1}{2}} = 2k_B T$$

y se sigue la ley de Curie,

$$\chi_\infty = \frac{n\bar{\mu}^2}{k_B T}$$

– Si  $T$  es alta, pero finita, es apropiado quedarse con más términos en el desarrollo de  $n$  y se tiene

$$\chi = \chi_\infty \left( 1 - \frac{n\Lambda^3}{2^{5/2}} + \dots \right),$$

que indica explícitamente la dependencia en  $n$  y  $T$ .

### Diamagnetismo de Landau:

El diamagnetismo es consecuencia de la libertad de movimiento que tienen los electrones en presencia de un campo. Pero como vimos, por el Teorema de Bohr-van Leeuwen, la teoría clásica es incapaz de explicar efectos magnéticos, luego ha de estar asociado a fenómeno cuántico. **Landau (1930)** lo asoció con la cuantización de las órbitas de las partículas cargadas en presencia de  $\vec{\mathcal{H}}$ , esto es, con el hecho de que la energía cinética de las partículas asociada con el movimiento perpendicular a la dirección del campo magnético no puede tomar cualquier valor. Esta circunstancia implicaba que existe una contribución adicional a la susceptibilidad paramagnética, que es cualitativamente semejante a ésta, pero negativa.

Sea un gas de electrones libres, salvo que interaccionan con  $\vec{\mathcal{H}}$ , sin espín (ya conocemos las consecuencias de este grado de libertad), y confinado en volumen  $V$ . Con notación usual, el hamiltoniano es

$$H = \frac{1}{2m} \left( \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + \varphi(\vec{r}).$$

donde  $\vec{A} = \left( \frac{-y\mathcal{H}}{2}, \frac{x\mathcal{H}}{2}, 0 \right)$  Resolviendo la ecuación de Schrödinger, sus valores propios son

$$\epsilon(j, p_z) = \frac{e\hbar\mathcal{H}}{mc} \left( j + \frac{1}{2} \right) + \frac{p_z^2}{2m}, \quad j = 0, 1, 2, \dots \quad (8)$$

Cada nivel energético  $j$  tiene una degeneración

$$g = L_x L_y \frac{e\mathcal{H}}{hc}$$

Esto es,  $g$  niveles  $\epsilon(p_x, p_y, p_z)$  cuando  $\mathcal{H} = 0$  se transforman en un solo  $\epsilon(j, p_z)$  cuando  $\mathcal{H} \neq 0$ . Esta degeneración se estima de la siguiente forma:

$$g = \int \int_{\text{en un círculo}} dn_x dn_y \underset{p=\frac{h}{L}n}{=} \frac{L_x L_y}{h^2} \int \int_{\frac{e\hbar\mathcal{H}}{mc}j \leq \frac{p_x^2+p_y^2}{2m} \leq \frac{e\hbar\mathcal{H}}{mc}(j+1)} dp_x dp_y$$

(integrando en coordenadas polares)

$$= \frac{L_x L_y}{h^2} \pi \left[ 2m \frac{e\hbar\mathcal{H}}{mc} \{(j+1) - j\} \right] = L_x L_y \frac{e\mathcal{H}}{hc},$$

que es una medida de la libertad que tiene la partícula para acomodar el centro de su órbita en el área  $L_x L_y$  del espacio físico.

La Función de Partición Macrocanónica es

$$\begin{aligned} \ln \Xi &= \sum_{\epsilon} \ln (1 + z e^{-\beta\epsilon}) = \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{p_z} g \ln [1 + z e^{-\beta\epsilon(j,p_z)}] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dp_z \frac{L_z}{h} L_x L_y \frac{e\mathcal{H}}{hc} \sum_{j=0}^{\infty} \ln [1 + z e^{-\beta\epsilon(j,p_z)}] \\ &= \frac{Ve\mathcal{H}}{h^2c} \int_{-\infty}^{\infty} dp_z \sum_{j=0}^{\infty} \ln [1 + z e^{-\beta\epsilon(j,p_z)}] \end{aligned} \quad (9)$$

y se tiene para el número de electrones en equilibrio:

$$N \equiv \left[ z \frac{\partial}{\partial z} \ln \Xi \right]_{\mathcal{H}, V, T} = \frac{Ve\mathcal{H}}{h^2c} \int_{-\infty}^{\infty} dp \sum_{j=0}^{\infty} \frac{z e^{-\beta\epsilon}}{\underbrace{1 + z e^{-\beta\epsilon}}_1} = \frac{Ve\mathcal{H}}{h^2c} \int_{-\infty}^{\infty} dp \sum_{j=0}^{\infty} \frac{z e^{-\beta\epsilon}}{z^{-1} e^{\beta\epsilon} + 1}$$

**Implicaciones:**

- **Temperaturas altas:** Si suponemos que la densidad es suficientemente baja, entonces  $z \ll 1$ , así desarrollando las expresiones anteriores ten-

emos:

$$\begin{aligned}
\ln \Xi &\simeq \frac{Ve\mathcal{H}}{h^2c} \int_{-\infty}^{\infty} dp_z \sum_{j=0}^{\infty} z \exp[-\beta\epsilon(j, p_z)] \\
&= \frac{zVe\mathcal{H}}{h^2c} \int_{-\infty}^{\infty} dp_z \sum_{j=0}^{\infty} \exp\left[-\beta\frac{p_z^2}{2m} - \beta\frac{e\hbar\mathcal{H}}{mc}\left(j + \frac{1}{2}\right)\right] \\
&= \frac{zVe\mathcal{H}}{h^2c} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dp \exp\left(-\beta\frac{p^2}{2m}\right)}_{\text{integral gaussiana}} \underbrace{\sum_{j=0}^{\infty} \exp\left[-\beta\frac{e\hbar\mathcal{H}}{mc}\left(j + \frac{1}{2}\right)\right]}_{\text{serie geométrica}} \\
&= \frac{zVe\mathcal{H}}{h^2c} \overbrace{\left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{1/2}}^{\text{integral}} \overbrace{\left[2 \operatorname{senh}\left(\beta\frac{e\hbar\mathcal{H}}{2mc}\right)\right]^{-1}}^{\text{serie}} \\
&= \frac{zV}{\Lambda^3} \frac{x}{\operatorname{senh} x},
\end{aligned}$$

donde

$$x \equiv \beta\mu_B\mathcal{H} \quad (\mu_B = \text{magnetón de Bohr})$$

y

$$M \equiv \frac{1}{\beta} \left( \frac{\partial}{\partial \mathcal{H}} \ln \Xi \right) = -\mu_B N L(x)$$

donde  $L(x) \equiv \coth x - \frac{1}{x}$  es la función de Langevin que ya apareció antes. De hecho, este resultado coincide con el paramagnético, salvo que ahora es  $M < 0$  independientemente del signo de la carga eléctrica de la partícula como se observa en situaciones diamagnéticas.

- **Temperaturas altas,  $n \ll 1$  y campos magnéticos débiles:** Entonces  $\mu_B\mathcal{H} \ll k_B T \implies x \equiv \frac{\mu_B\mathcal{H}}{k_B T} \ll 1$ , luego:

$$M \simeq -\mu_B N \frac{x}{3} = -N \frac{\mu_B^2 \mathcal{H}}{3k_B T}$$

y

$$\chi_\infty = -\frac{n\mu_B^2}{3k_B T}$$

que es el equivalente magnético de la ley de Curie.

- **$k_B T \ll \epsilon_F$  (gas ideal muy degenerado) y  $\mathcal{H}$  débil:** En este caso tenemos:

$$\mu \simeq \epsilon_F \left[ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{k_B T}{\epsilon_F} \right)^2 \right]$$

$$z \equiv \exp \left( \frac{\mu}{k_B T} \right) = \exp \left( \frac{\epsilon_F}{k_B T} + \dots \right) \gg 1.$$

Si, además el sabemos que  $\mu_B \mathcal{H} \ll k_B T$ , puede aproximarse la suma sobre  $j$  de la función de partición por una integral utilizando la fórmula de Euler:

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

obteniendo después de un pequeño cálculo:

$$\chi_0 = -\frac{1}{2} n \mu_B^2 / \epsilon_F,$$

otra vez independiente de la carga y del mismo orden que el efecto paramagnético cuando  $\bar{\mu}$  es del orden de magnitud de  $\mu_B$ .

- **Efecto Haas-van Alphen (1930):** para temperaturas muy por debajo de la de Fermi y campos relativamente fuertes, esto es,

$$k_B T \approx \mu_B \mathcal{H} \ll \epsilon_F$$

la Función de Partición Macrocanónica tiene una parte oscilatoria de la forma:

$$(\ln \Xi)_{\text{osc}} \propto (\mu_B \mathcal{H})^{3/2} \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{(-1)^\ell \cos \left( \frac{\ell \pi}{\mu_B \mathcal{H}} \epsilon_F - \frac{\pi}{4} \right)}{\ell^{3/2} \sinh \left( \frac{\ell \pi}{\mu_B \mathcal{H}} \pi k_B T \right)}$$

de donde se sigue una susceptibilidad oscilatoria,

$$\chi_{\text{osc}} = \frac{1}{\beta V \mathcal{H}} \left( \frac{\partial}{\partial \mathcal{H}} \ln \Xi \right)_{\text{osc}}.$$

Es notable el coseno del numerador, que predice violentas oscilaciones con  $1/\mathcal{H}$ :

- Las oscilaciones son despreciables para  $\mu_B \mathcal{H} \ll k_B T$ , como consecuencia de la función hiperbólica en el denominador, y se tienen propiedades suaves como predice el diamagnetismo de Landau
- Estos términos oscilatorios serán apreciables si  $\mu_B \mathcal{H} \approx \pi^2 k_B T$ , lo que corresponde a  $\mathcal{H} \sim 10^5 T$  Oersted.

- \* Luego han de ser observables para campos suficientemente intensos a muy bajas temperaturas, lo que explica oscilaciones descritas por primera vez en 1930, conocidas como efecto Haas-van Alphen.
- \* Parte de su importancia radica en que el periodo de la oscilación es función de  $\epsilon_F$ . Lo que permite conocer experimentalmente  $\epsilon_F$ .

## 6. Propiedades del gas electrónico en metales: calores específicos, coeficientes de transporte, número de Lorentz.

Los metales se caracterizan por altas conductividades eléctrica  $\sigma$  y térmica  $\kappa$ . Alrededor de 1990 quedó claro que la carga tenía naturaleza discreta y que altas  $\sigma$  en metales eran consecuencia de que los electrones exteriores en átomos estaban muy débilmente ligados. A este conjunto de electrones prácticamente libres se le llamó **gas electrónico**, y comenzaron a aplicarle los métodos de la Teoría Cinética y Mecánica Estadística. **Drude (1900-1902)** y **Lorentz (1904-1909)** trataron el gas electrónico como un gas de Boltzmann. Se consiguen así descripciones cualitativamente correctas a veces, pero hay fallos importantes.

### Calor específico:

La primera dificultad del modelo clásico ocurre con el calor específico: El suponer que los electrones se comportan como un gas ideal clásico que sigue la distribución de Maxwell-Boltzmann implica que los electrones han de satisfacer el **principio de equipartición**, esto es, cada electrón ha de contribuir  $3 \times \frac{1}{2}k_B$  al calor específico, lo que implica su independencia con la temperatura. Las medidas muestran que todos los sólidos tienden a presentar un calor específico independiente de la temperatura para temperaturas suficientemente alta (es la **ley de Dulong y Petit**, discutida en otra parte), pero:

- El valor experimental es aproximadamente  $3R$  por mol para sólidos monoatómicos, en lugar de la predicción  $\frac{9}{2}R$  puesto que Maxwell-Boltzmann establece que

electrones:	3 grados lib.	$\implies$	$3 \times \frac{k}{2} = \frac{3}{2}k$
red :	3 gl $\times$ 2 tnos. cuadrát.	$\implies$	$3 \times 2 \times \frac{k}{2} = \frac{6}{2}k$

- Si la temperatura no es tan alta,  $C_V$  presenta decidida dependencia en  $T$ .
- Einstein y Debye notaron cómo los modos de vibración de la red tienen naturaleza bosónica y (como se vió en otra parte) contribuyen con un  $C$ :

$$C_v = \frac{12\pi^4}{5} k \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^3, \quad \theta_D = \text{temp de Debye} \quad (10)$$

Pero ¿y la contribución del gas electrónico? Si sumamos a esto una contribución constante, como la que produciría un gas clásico, no se obtiene acuerdo con los datos para metales.

**Sommerfeld (1928)** notó que era muy importante tratar el gas electrónico como un gas de Fermi degenerado. En efecto, tomando  $g = 2$ , tenemos

$$\epsilon_F^{\text{electr}} = \frac{1}{2^{2/3}} \left( \frac{3N}{4\pi V} \right)^{2/3} \frac{h^2}{2m},$$

donde es  $N/V = n_e n_a / a^3$  ( $n_e = \#$  electrones de conducción por átomo;  $n_a = \#$  átomos por celda unidad;  $a =$  espaciado de la red). Si usamos los valores para el átomo de Na, por ejemplo, esto es,  $n_e = 1$ ,  $n_a = 2$ ,  $a = 4'29 \text{ \AA}$ , se sigue  $n = 2'53 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ , y haciendo  $m$  igual a 0'98 veces la masa del electrón para compensar los efectos de interacción culombiana entre los electrones y así tratar a este gas como ideal, se tiene

$$\epsilon_F \simeq 5'146 \times 10^{-12} \text{ erg} = 3'21 \text{ eV}$$

Si definimos la **temperatura de Fermi**

$$T_F \equiv \epsilon_F / k_B \simeq 3'3 \times 10^4 \text{ K}$$

para el sodio.

Así, en general, todos los metales tienen una  $T_F$  en el rango  $10^4 - 10^5 \text{ K}$   $\gg$  temperatura ambiente ( $\simeq 3 \times 10^2 \text{ K}$ ), luego el gas electrónico está, en efecto, completamente degenerado, y el número medio de ocupación correspondiente diferirá muy poco de la función paso para  $0 \text{ K}$ : sólo las esquinas estarán ligeramente redondeadas en una región del orden de  $k_B T$ , despreciable comparada con  $\epsilon_F$ .

En estas condiciones, como se vió, hemos de asumir para el gas electrónico:

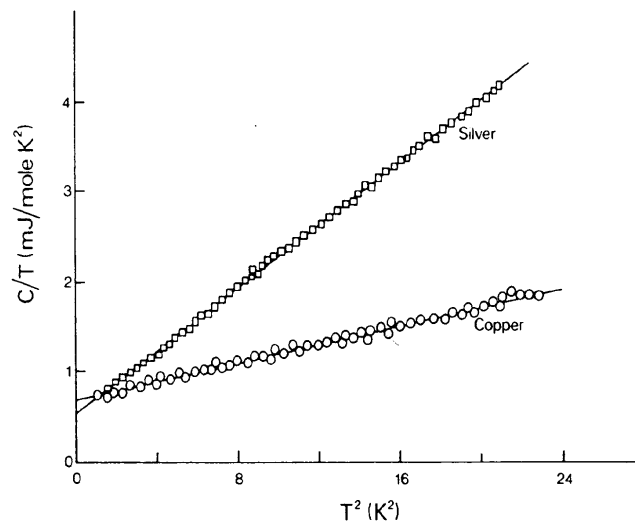
$$C_V = \frac{\pi^2}{2} k_B \left( \frac{k_B T}{\epsilon_F} \right). \quad (11)$$

Pero, a temperaturas ordinarias, es  $(k_B T / \epsilon_F) \equiv T / T_F \sim \mathcal{O}(10^{-2})$ , esto es, esta contribución es del orden de  $10^{-2} R$  por mol, despreciable frente a la de la red,  $3R$  por mol. En consecuencia, los metales a temperaturas ordinarias han de presentar únicamente la contribución bosónica, lo que confirman los experimentos.

La contribución bosónica decrece rápidamente con la temperatura (reflejando cómo los osciladores van congelándose) de modo que, a bajas temperaturas, puede hacerse comparable a la fermiónica. En particular la predicción es:

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

que es confirmada muy bien en metales y aleaciones:



Observamos que la pendiente  $\delta$  de estas rectas (a muy baja  $T$ ) permite determinar  $\theta_D$  (temperatura de Debye), mientras que el corte  $\gamma$  con el eje vertical está relacionado con  $\epsilon_F$ .

### Coefficientes de transporte:

En general las conductividades eléctrica  $\sigma$  y térmica  $\kappa$  son altas en los metales, lo que los distingue de otros sólidos. Estas conductividades son ejemplos típicos de **coeficientes de transporte** (otros son viscosidad, movilidad, coeficiente de difusión) y, por tanto, su estudio sistemático se hace a partir de las ecuaciones de transporte que involucran situaciones fuera del equilibrio. Sin embargo, bajo las hipótesis de cuasi-equilibrio o equilibrio local, es posible desarrollar argumentos que explican algunas de las propiedades de esas conductividades. Una propiedad de  $\sigma$  y  $\kappa$  es la **ley (fenomenológica) de Wiedemann-Franz (1853)** que establece que



$L = \kappa/\sigma T$  es independiente de  $T$  y del metal en cuestión. A esta relación se le conoce también como **número de Lorentz** puesto que éste fue el primero en calcularla teóricamente.

El cálculo de Lorentz se refiere a electrones clásicos con sus velocidades distribuidas maxwellianamente; la predicción es

$$L = 3 \left( \frac{k_B}{e} \right)^2 = 2'23 \times 10^{-8} \text{ W } \Omega \text{ K}^{-2},$$

a comparar con valores experimentales recientes (en  $\text{W } \Omega \text{ K}^{-2}$ ):

	0°C	100°C
Pb	2'47	2'56
Pt	2'51	2'60
Ag	2'31	2'37
Au	2'35	2'40

Esto es, la ley de Wiedemann-Franz sólo parece aproximada, y el valor clásico de Lorentz subvalora los datos en un 10% aproximadamente.

La situación se aclara y la discrepancia desaparece calculando  $\sigma$  y  $\kappa$  mediante teoría de transporte. En particular, son necesarios conceptos cuánticos. Aquí vamos a ver sólo el argumento más sencillo que permite estimar  $L$  aceptablemente.

Puesto que el gas es muy degenerado, sólo los electrones en el nivel de Fermi pueden ser excitados térmicamente (con una energía de excitación  $k_B T \ll k_B T_F$ ), luego tendrán velocidad  $v_F = (2\epsilon_F/m)^{1/2}$ . Si su recorrido libre medio es  $\lambda_F$ , se sigue un tiempo medio entre colisiones  $\tau_F = \lambda_F/v_F$ .

Si el gas está sometido a campo eléctrico  $E$ , cada partícula sufre una aceleración  $a = eE/m$ , viajando una distancia  $\frac{1}{2}at^2$  en cualquier tiempo  $t$ , o una distancia media  $\frac{1}{2}a \langle t^2 \rangle$  en el tiempo característico  $\langle t \rangle$

La teoría general, mediante un argumento independiente, establece que la fracción de recorridos libre medio que terminan en el intervalo temporal  $(t, t + dt)$  es

$$f(t) dt = \frac{1}{\tau} e^{-t/\tau} dt.$$

Usando esta distribución con  $\tau = \tau_F$  para calcular aquellos promedios,

$$\begin{aligned} \langle t^2 \rangle &= \frac{1}{\tau_F} \int_0^\infty t^2 e^{-t/\tau_F} dt = \text{(integrando por partes)} \\ &= 2 \int_0^\infty t e^{-t/\tau_F} dt = 2\tau_F \frac{1}{\tau_F} \int_0^\infty t e^{-t/\tau_F} dt = 2\tau_F \langle t \rangle \end{aligned}$$

luego

$$\langle v \rangle = \frac{\frac{1}{2}a \langle t^2 \rangle}{\langle t \rangle} = a\tau_F = \frac{eE}{m}\tau_F = \frac{eE\lambda_F}{mv_F}$$

donde  $\langle v \rangle$  es la velocidad media de arrastre que tiene en cuenta la aceleración debida a campo eléctrico y la deceleración a colisionar con los núcleos.

Puesto que

**conductividad eléctrica** = densidad de carga  $\times$  movilidad

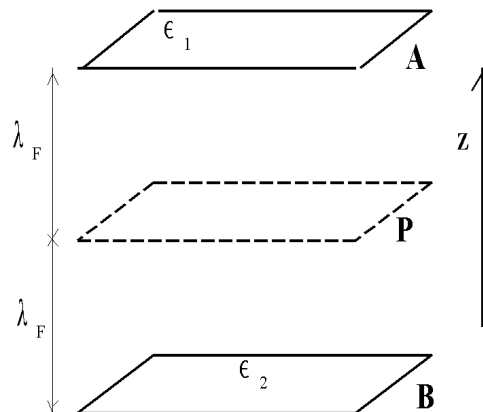
**densidad de carga** = # cargas por u. vol ( $n$ )  $\times e$

**movilidad**  $\equiv$  veloc media de arrastre por u. de campo =  $\frac{e\lambda_F}{mv_F}$

se tiene finalmente:

$$\sigma = \frac{ne^2\lambda_F}{mv_F}$$

Para calcular  $\kappa$ , supongamos tres superficies de área unidad (A, P y B) en el seno del gas, paralelas entre sí separadas  $\lambda_F$ , tal que  $\epsilon_1$  y  $\epsilon_2$  son las energías típicas de las partículas en las proximidades de A y B, respectivamente



Suponiendo que la dirección de la velocidad es aleatoria, puesto que hay 6 direcciones, la superficie P será atravesada en promedio por  $\frac{1}{6}nv_F$  electrones por unidad de tiempo viniendo de A y otros tantos viniendo de B.

Así, el transporte neto de energía por unidad de tiempo a través de P

es

$$\begin{aligned}\frac{dQ}{dt} &= \frac{1}{6}nv_F (\epsilon_1 - \epsilon_2) = \frac{1}{6}nv_F 2\lambda_F \left(-\frac{\partial\epsilon}{\partial z}\right) \\ &= -\frac{1}{3}nv_F \lambda_F \left(\frac{\partial\epsilon}{\partial T}\right) \left(\frac{\partial T}{\partial z}\right)\end{aligned}$$

Pero la conductividad se define

$$\frac{dQ}{dt} \equiv -\kappa \left(\frac{\partial T}{\partial z}\right)$$

luego

$$\kappa = \frac{1}{3}nv_F \lambda_F \left(\frac{\partial\epsilon}{\partial T}\right) = \frac{1}{3}nv_F \lambda_F \frac{\pi^2}{2} \left(\frac{k^2 T}{\epsilon_F}\right),$$

usando la expresión para el calor específico por electrón,  $\partial\epsilon/\partial T$ , y escribiendo  $\epsilon_F = \frac{1}{2}mv_F^2$ :

$$\kappa = \frac{\frac{1}{6}nv_F \lambda_F \pi^2 k^2 T}{\frac{1}{2}mv_F^2} = \frac{n\pi^2 k^2 \lambda_F T}{3mv_F}.$$

Combinando estas expresiones obtenemos:

$$L = \frac{\kappa}{\sigma T} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e}\right)^2 = 2'44 \times 10^{-8} \text{ W } \Omega \text{ K}^{-2}$$

que, aunque difiere poco del clásico, lo mejora e involucra un cálculo más acorde con la situación.