

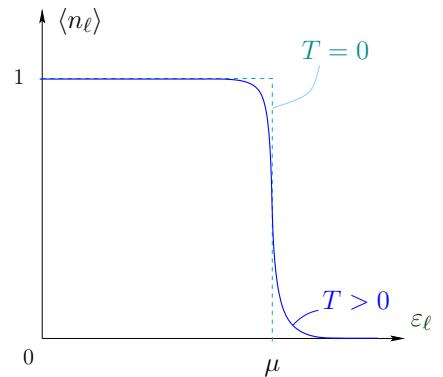
# Gas de Fermi-Dirac

límite termodinámico :  $\epsilon$  continua

$$\hookrightarrow n(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} + 1}$$

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

$$\sum_{\ell} f(p_{\ell}) \Delta \ell_x \Delta \ell_y \Delta \ell_z \rightarrow \frac{4\pi V}{h^3} \int dp p^2 f(p) = \frac{4\sqrt{2}\pi m^{3/2} V}{h^3} \int d\epsilon \sqrt{\epsilon} f(\epsilon)$$



$$\Omega_{\text{FD}}(T, V, \mu) = -kT g_s \sum_{\ell=0}^{\infty} \ln \left( 1 + z e^{-\beta \epsilon_{\ell}} \right) \rightarrow \Omega_{\text{FD}}(T, V, \mu) = -\frac{g_s k T V}{\lambda^3} f_{5/2}(z)$$

$$f_{5/2}(z) \equiv \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} dx x^2 \ln \left( 1 + z e^{-x^2} \right) \left[ = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(-1)^{j+1} z^j}{j^{5/2}} \quad \text{si } z < 1 \right]$$

$$\langle N \rangle = z \left( \frac{\partial \ln Z(\beta, V, z)}{\partial z} \right)_{\beta, V} = \frac{g_s V}{\lambda^3} f_{3/2}(z)$$

$$f_{3/2}(z) \equiv \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} dx x^2 \frac{1}{z^{-1} e^{x^2} + 1} = z \frac{\partial f_{5/2}(z)}{\partial z} \left[ = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(-1)^{j+1} z^j}{j^{3/2}} \quad \text{si } z < 1 \right]$$

## Gases de fermiones libres

- ▶ **e<sup>-</sup> en la banda de conducción** de un sólido

(potencial periódico *débil*)

$$v = \frac{\langle N \rangle}{V} \simeq (2\text{\AA})^3 \quad \rightarrow \quad \lambda_T \simeq 43 \text{\AA} \text{ a } T \text{ ambiente} \quad (\text{fuerte solapamiento})$$

- ▶ **gases inertes** con n° ímpar de nucleones

interactúan muy débilmente entre ellos

→ F-D en <sup>3</sup>He recién se nota a  $T < 3 \text{ K}$

- ▶ **núcleo atómico** : protones y neutrones (fermiones)

modelo de partículas no interactuantes puede brindar una buena descripción

(densidad tan alta →  $T = 0 \text{ K}$ )

- ▶ **estrella neutrónica**

← “supernova” ← estrellas masivas (mueren)

densidad altísima de neutrones ... fermiones libres

- ▶ **enanas blancas**

materia altamente ionizada : núcleos livianos (gas M-B) + e<sup>-</sup> (*alta degeneración*)

## Gas de Fermi-Dirac: Diamagnetismo de Landau (Huang)

*teorema de van Leeuwen* : no existe el diamagnetismo (el magnetismo en general) en la clásica Landau (1930) : **cuantización de órbitas** de partículas cargadas en un campo magnético

→ susceptibilidad magnética *por unidad de volumen*

$$\chi = \left( \frac{\partial M'}{\partial B} \right)_T \quad M' : \text{momento magnético } \textit{por } u / \textit{volumen}$$

ensamble canónico : acoplamiento con campo externo →

$$G(T, B, N) = -kT \ln Z_N(T, B) \quad \Rightarrow \quad M' = -\frac{1}{V} \left( \frac{\partial G}{\partial B} \right)_{T, N} = \frac{kT}{V} \frac{\partial}{\partial B} \ln Z_N$$

↪ gran canónico :

$$M' = - \left[ \frac{\partial}{\partial B} \left( \frac{\tilde{\Omega}}{V} \right) \right]_{T(V), z} = kT \left[ \frac{\partial}{\partial B} \left( \frac{\ln Z_\mu}{V} \right) \right]_{T(V), z}$$

$\tilde{\Omega} = \dots - BM \dots$   $V$  irrelevante en general

# Gas de Fermi-Dirac: Diamagnetismo de Landau

diamagnético :  $\chi < 0$

paramagnético :  $\chi > 0$

núcleos de una red cristalina :  $\mu_{\text{nucl}} \ll \mu_e$  (típicamente 1000 veces más chico)

**alineamiento de espines** con campo externo → **paramagnetismo**

compite con el movimiento orbital

(gas de electrones libres)

campo magnético externo →  $\mathbf{A}$  (potencial vector)

$$\hookrightarrow \hat{H}_1 = \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \quad (\text{no relativista})$$

ec. Schrödinger independiente de  $t$  invariante ante transformaciones de gauge

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) \longrightarrow \mathbf{A}(\mathbf{r}) - \nabla \omega(\mathbf{r})$$

$$\psi(\mathbf{r}) \longrightarrow e^{-\frac{ie}{\hbar c} \omega(\mathbf{r})} \psi(\mathbf{r})$$

$\omega(\mathbf{r})$  cualquier función continua

## Gas de Fermi-Dirac: Diamagnetismo de Landau

para  $\mathbf{B} = B\hat{k}$  : autovalores

$$\epsilon = \frac{p_z^2}{2m} + \hbar\omega_o \left( j + \frac{1}{2} \right)$$

niveles de Landau

$$\omega_o \equiv \frac{eB}{mc} \text{ frecuencia ciclotrónica}$$

$$j = 0, 1, 2, \dots$$

$$p_z \equiv \hbar k_z$$

osciladores centrados en

$$y_o = \frac{\hbar c}{eB} k_x = \frac{\hbar c}{eB} \frac{2\pi}{L} n_x \quad (\text{material de longitud } L)$$

$$\hookrightarrow \quad y_o \leq L \quad \Rightarrow \quad n_x \leq \frac{eB}{hc} L^2 = g \quad (\text{degeneración} = \text{número de } k_x \text{ permitidos})$$

entonces  $B \neq 0$ : energías asociadas al movimiento en el plano  $x-y$  **dejan de ser continuas**

$$\chi = -\frac{z}{3kT\lambda^3} \left( \frac{e\hbar}{2mc} \right)^2 \quad (\neq 0) \quad (\text{ejercicio})$$

(¡tomá van Leewen!)

$\chi < 0$  : **diamagnético**

## Niveles de Landau : efecto de Haas - van Alphen

$T$  bajas : los  $e^-$  ocupan los estados de menor energía

disminuye  $B \rightarrow$  caben menos en el estado fundamental :

$$\text{degeneración } g = \frac{eB}{hc} L^2$$

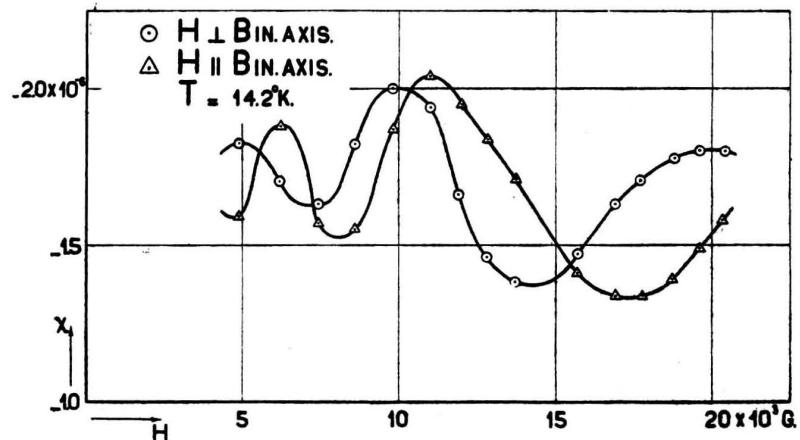
### de Haas - van Alphen

experimento (1930)

muestra de Bi a 14,2 K

entre 0,5 y 2 Tesla

oscilaciones en la magnetización



## Niveles de Landau : efecto de Haas - van Alphen

$kT \ll \hbar\omega_o$  : tomamos directamente  $T = 0$  en las expresiones anteriores

(ignoramos el movimiento en  $z$  : no aporta)

$$\mu_o \equiv \frac{e\hbar}{2mc} \rightarrow \text{niveles de Landau : } \epsilon_j = 2\mu_o B(j + 1/2)$$

$$\left( n = \frac{N}{L^2} \right) \quad B_o \equiv \frac{nhc}{e} \rightarrow \text{degeneración : } g = \frac{eB}{hc} L^2 = \frac{NB}{B_o}$$

$\hookrightarrow$  **mínimo**  $B$  para que todos los  $e^-$  quepan en un nivel de Landau

a  $T = 0$ , si  $B > B_o$  todos los  $e^-$  en el nivel fundamental ( $j = 0$ )

→ energía por partícula :  $E_o/N = \mu_o B$

primeros  $j+1$  niveles (0 a  $j$ ) completos , el ( $j+1$ ) parcialmente lleno y los otros vacíos

$$(j+1)g < N < (j+2)g$$

$$\rightarrow (j+1)N \frac{B}{B_o} < N < (j+2)N \frac{B}{B_o} \Rightarrow \frac{1}{j+2} < \frac{B}{B_o} < \frac{1}{j+1}$$

## Niveles de Landau : efecto de Haas - van Alphen

$$(j+1)g < N < (j+2)g \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{j+2} < \frac{B}{B_o} < \frac{1}{j+1} \quad (\text{ejercicio})$$

$$\hookrightarrow \quad \frac{E_o}{N} = \frac{g}{N} \sum_{k=0}^j \epsilon_k + \left[ 1 - \frac{(j+1)g}{N} \right] \epsilon_{j+1} = \mu_o B \left[ 2j+3 - (j+1)(j+2) \frac{B}{B_o} \right]$$

$$\frac{E_o}{N}(B) = \begin{cases} \mu_o B_o x & \text{si } x \equiv \frac{B}{B_o} > 1 \\ \mu_o B_o x [2j+3 - (j+1)(j+2)x] & \text{si } \frac{1}{j+2} < x < \frac{1}{j+1} \end{cases}$$

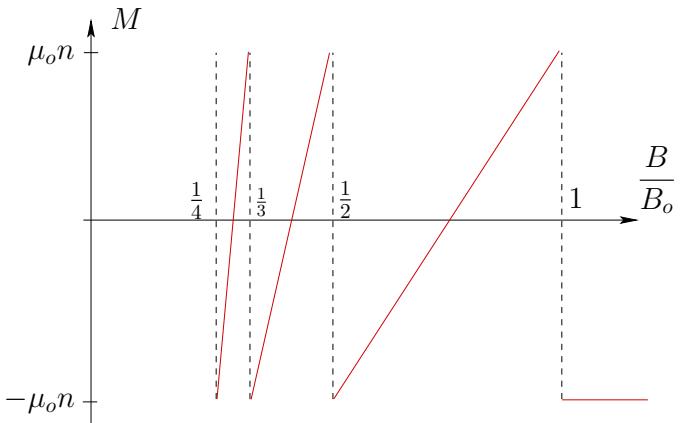
$$(j = 0, 1, 2, \dots)$$

... de donde obtenemos (¿cómo y por qué?)

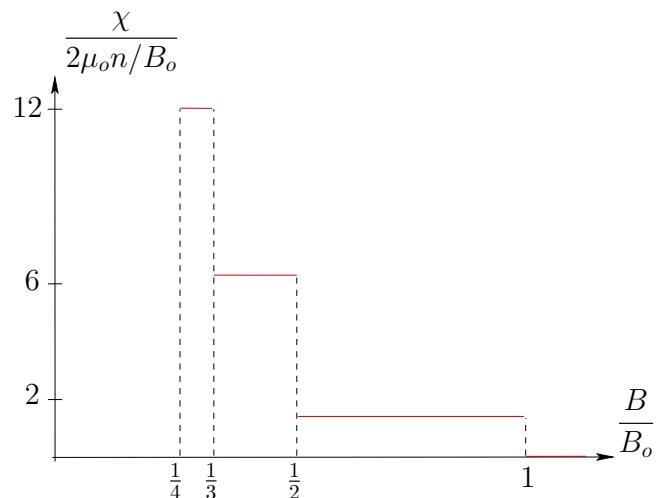
$$\begin{cases} M^> = -\mu_o n \\ M^{(x)} = \mu_o n [2(j+1)(j+2)x - (2j+3)] \end{cases}$$

## Niveles de Landau : efecto de Haas - van Alphen

$$\begin{cases} M^> = -\mu_o n \\ M^{(x)} = \mu_o n [2(j+1)(j+2)x - (2j+3)] \end{cases}$$



$$\begin{cases} \chi^> = 0 \\ \chi^{(x)} = \frac{2\mu_o n}{B_o} (j + 1)(j + 2) \end{cases}$$



# Ferromagnetismo : Modelo de Ising

espines alineados con  $B$  → paramagnetismo ✓

momento magnético orbital predominante → diamagnetismo ✓

magnetización “espontánea” → ferromagnetismo ?

Fe , Co , Ni

... al calentarse pierden esa propiedad

hamiltoniano de Heisenberg o isotrópico

$\hat{\sigma} = (\hat{\sigma}^x, \hat{\sigma}^y, \hat{\sigma}^z)$  matrices de Pauli

$$\hat{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \hat{\sigma}_i \cdot \hat{\sigma}_j - \mu_B \mathbf{B} \cdot \sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_i$$

c / sitio de la red : 1 espín 1/2

momento magnético  $\mu_B \times \hbar$  (magnetón de Bohr)

$J_{ij}$  “integral de intercambio” → ... aprox. : primeros vecinos  $\langle ij \rangle$

## Ferromagnetismo : Modelo de Ising

$$\hat{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \hat{\sigma}_i \cdot \hat{\sigma}_j - \mu_B B \cdot \sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_i$$

$J_{ij} > 0$  : *ferromagnético*

$J_{ij} < 0$  : *antiferromagnético*

solo importa una orientación ( $B = B\hat{k}$ )  $\rightarrow$  **modelo de Ising** (o **anisotrópico**)

tomando  $J_{ij} = J$  (primeros vecinos)

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z - \mu_B B \sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_i^z$$

modelo de Ising originalmente desarrollado para describir ferromagnetismo

se adapta para describir otros cambios de fase :

transiciones orden-desorden (aleaciones) , vidrios de espín , “gas de red” , redes neuronales

## Modelo de Ising unidimensional

1D : se simplifica notablemente con condiciones de contorno periódicas ( $N+1 \rightarrow 1$ )

$$\hat{H} = -J \sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_{i+1} - \frac{\mu_B B}{2} \sum_{i=1}^N (\hat{\sigma}_i + \hat{\sigma}_{i+1})$$

canónico : operadores  $\hat{\sigma}_i$  en el espacio de Hilbert correspondiente      autovalores  $\sigma_i = \pm 1$

$$Z_N(T, B) = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} e^{\beta \sum_{i=1}^N \left[ J\sigma_i\sigma_{i+1} + \frac{\mu_B B}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right]}$$

definiendo el operador  $\hat{P}$  :

$$\langle \sigma_i | \hat{P} | \sigma_{i+1} \rangle = e^{\beta \left[ J\sigma_i\sigma_{i+1} + \frac{\mu_B B}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right]}$$

(simétrico)

base :  $\sigma = 1 \leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \sigma = -1 \leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \rightarrow \quad \hat{P} = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+\mu_B B)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-\mu_B B)} \end{pmatrix}$

$$\hookrightarrow Z_N(T, B) = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \langle \sigma_1 | \hat{P} | \sigma_2 \rangle \langle \sigma_2 | \hat{P} | \sigma_3 \rangle \cdots \langle \sigma_N | \hat{P} | \sigma_1 \rangle$$

## Modelo de Ising unidimensional

$$Z_N(T, B) = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \langle \sigma_1 | \hat{P} | \sigma_2 \rangle \langle \sigma_2 | \hat{P} | \sigma_3 \rangle \cdots \langle \sigma_N | \hat{P} | \sigma_1 \rangle$$

$$\sum_{\sigma=\pm 1} |\sigma\rangle \langle \sigma| = I \quad \rightarrow \quad Z_N(T, B) = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \langle \sigma_1 | \hat{P}^N | \sigma_1 \rangle = \text{Tr}(\hat{P}^N)$$

$\hat{P}$  simétrico  $\rightarrow$  diagonalizable  $\rightarrow$   $\text{Tr}(\hat{P}^N) = \lambda_+^N + \lambda_-^N \quad (\lambda_+ > \lambda_-)$

$$g(T, B) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} G(T, B, N) = -k T \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{N} \ln \left[ \lambda_+^N \left( 1 + \left( \frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right) \right] \right\}$$

$$\hookrightarrow g(T, B) = -k T \ln \lambda_+(B)$$

$$\langle M \rangle = -N \left( \frac{\partial g}{\partial B} \right)_T = \frac{N \mu_B \operatorname{senh}(\beta \mu_B B)}{\sqrt{e^{-4\beta J} + \operatorname{senh}^2(\beta \mu_B B)}} \xrightarrow[B \rightarrow 0]{} 0$$

no hay magnetización espontánea en una dimensión

## Modelo de Weiss

modelo de Ising puede resolverse en 2D (funciona)

3D : muuuuuuy complicado

... métodos aproximados → **método de Weiss** o modelo de **campo molecular**

se reemplaza interacción con  $\gamma$  primeros vecinos por un promedio

$$\hat{H}_W = -\frac{J\gamma}{2} \sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_i \langle \sigma \rangle - \mu_B B \sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_i$$

campo efectivo  $\frac{J\gamma\langle\sigma\rangle}{2\mu_B}$

iii espines no interactuantes !!!

$$\hookrightarrow \hat{H}_W = - \sum_{i=1}^N \left( \frac{J\gamma\langle\sigma\rangle}{2} + \mu_B B \right) \hat{\sigma}_i = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i \quad \rightarrow \quad Z_N = Z_1^N$$

$$Z_1 = 2 \cosh \left[ \beta \left( \frac{J\gamma\langle\sigma\rangle}{2} + \mu_B B \right) \right] \quad (\text{ejercicio})$$

$$\hookrightarrow \langle \sigma \rangle = \langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{Z_1} \sum_{\sigma=\pm 1} \sigma e^{-\beta H_1} = \tgh \left[ \beta \left( \frac{J\gamma\langle\sigma\rangle}{2} + \mu_B B \right) \right]$$

## Modelo de Weiss

$$\langle \sigma \rangle = \operatorname{tgh} \left[ \beta \left( \frac{J\gamma \langle \sigma \rangle}{2} + \mu_B B \right) \right]$$

puede tener solución no nula para  $B = 0$  (ejercicio: graficar)

predice *temperatura crítica* por encima de la cual solo existen soluciones triviales :  $T_c = \frac{J\gamma}{2k}$

para  $B = 0$  : “ecuación de Curie-Weiss”

$$\langle \sigma \rangle = \operatorname{tgh} \left( \frac{J\gamma}{2kT} \langle \sigma \rangle \right)$$



resolviendo numéricamente ...  $m(T) \equiv \mu_B \langle \sigma \rangle(T)$

asíntotas para  $T$  bajas :  $m/\mu_B \simeq 1 - 2e^{-\frac{J\gamma m}{\mu_B kT}}$

y para  $T \rightarrow T_c^-$  :  $m/\mu_B \simeq \sqrt{3 \left( 1 - \frac{T}{T_c} \right)}$

... *exponentes críticos*