

METODO SIMPLIFICADO PARA CALCULAR PROPIEDADES TERMODINAMICAS DE UN GAS DE ELECTRONES

P. Villaseñor*

Escuela de Física,

Universidad Autónoma de San Luis Potosí.

(recibido 17 de Agosto 1977)

RESUMEN

El potencial químico, la energía térmica, el calor específico y la conductividad eléctrica de un gas de electrones altamente degenerado se calcula aproximando la distribución de Fermi-Dirac por una recta en la región $\epsilon \approx \mu \pm K_{\beta}T$. La pendiente de la recta $1/\alpha K_{\beta}T$ se ajusta comparando el potencial químico y el calor específico obtenidos de manera aproximada, con los calculados por el método convencional; obteniéndose $\alpha = 2\pi$. Se justifica el valor de la pendiente exigiendo que el número de estados dado por la distribución de Fermi-Dirac, sea igual al número de estados en la aproximación para $\epsilon > \mu$. El método es ventajoso para calcular propiedades termodinámicas de un gas de electrones a temperaturas tales que, $K_{\beta}T \ll \epsilon_f$.

1. INTRODUCCION

En algunos problemas de interés físico en donde es necesario usar la función de distribución de Fermi-Dirac (F-D)

$$f(\epsilon) = \frac{1}{e^{\epsilon - \mu / K_{\beta}T} + 1} \quad (1)$$

para calcular promedios estadísticos de variables termodinámicas a $T \neq 0$ se encuentra la necesidad de evaluar integrales complicadas que requieren conocimiento de algunas técnicas matemáticas elaboradas. La función $f(\epsilon)$ para $T=0$ es una función escalón, lo cual simplifica el cálculo de promedios estadísticos en este límite.

* Becario de CONACyT y participante del proyecto "San Luis" que se desarrolla en el Instituto de Física de la U.A.S.L.P. con participación de la O.E.A. y CONACyT.

La distribución de (F-D) cuando $\frac{\mu}{k_{\beta}T} \gg 1$ toma aproximadamente el valor de 1 para $\epsilon < \mu$, y un intervalo alrededor de μ decrece rápidamente a cero (Fig. 1).

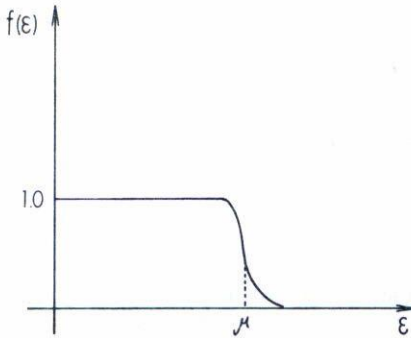


Fig. 1

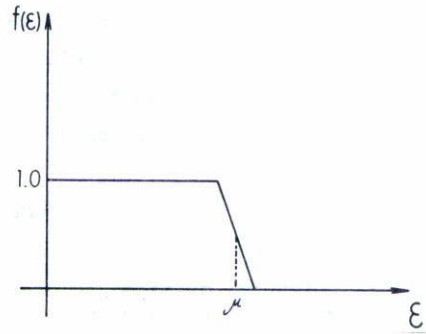


Fig. 2

En este trabajo se substituye la distribución de (F-D) por la siguiente aproximación:

$$f(\epsilon) = \begin{cases} 1 & 0 \leq \epsilon < \mu - \frac{1}{2} \alpha k_{\beta} T \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{\alpha k_{\beta} T} (\epsilon - \mu) & \mu - \frac{1}{2} \alpha k_{\beta} T < \epsilon \leq \mu + \frac{1}{2} \alpha k_{\beta} T \\ 0 & \text{para cualquier otra región, donde} \end{cases}$$

α es un parámetro. La forma geométrica de esta distribución se muestra en la Fig. 2. Utilizando esta aproximación, en la sección II se calcula el potencial químico como una función de la temperatura T y del parámetro α , en la sección III se obtiene el calor específico en términos de los mismos parámetros y en la sección IV se calcula la conductividad eléctrica en términos del parámetro α . El parámetro α se calcula en la sección V y las conclusiones se presentan en la sección VI.

II. CALCULO DEL POTENCIAL QUIMICO μ EN TERMINOS DE α

El potencial químico μ de un sistema termodinámico puede obtenerse a partir de la siguiente ecuación de restricción⁽¹⁾:

$$\int_0^{\infty} f(\epsilon) D(\epsilon) d\epsilon = N, \quad (3)$$

donde $f(\epsilon)$ es la distribución de (F-D), $D(\epsilon) d\epsilon = \frac{V}{2\pi^2} \left| \frac{2m}{\hbar^2} \right|^{3/2} \epsilon^{1/2} d\epsilon$ es el número de estados de traslación y N el número total de partículas.

Substituyendo la $f(\epsilon)$ aproximada, Ec. (2), y el número de estados de traslación podemos escribir la Ec. (3) como

$$N = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \left[\int_0^{\mu - \frac{\alpha K_\beta T}{2}} \epsilon^{1/2} d\epsilon + \int_{\mu - \frac{1}{2}\alpha K_\beta T}^{\mu + \frac{1}{2}\alpha K_\beta T} \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{\alpha K_\beta T} (\epsilon - \mu) \right] \epsilon^{1/2} d\epsilon \right]$$

obteniéndose el resultado

$$N = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \left\{ \frac{2}{3} \mu^{3/2} \left(1 - \frac{\alpha K_\beta T}{2\mu} \right)^{3/2} + \left[\frac{1}{3} + \frac{2}{3} \left(\frac{\mu}{\alpha K_\beta T} \right) \right] \mu^{3/2} \left[\left(1 + \frac{\alpha K_\beta T}{2\mu} \right)^{3/2} - \left(1 - \frac{\alpha K_\beta T}{2\mu} \right)^{3/2} \right] - \frac{2\mu^{5/2}}{5\alpha K_\beta T} \left[\left(1 + \frac{\alpha K_\beta T}{2\mu} \right)^{5/2} - \left(1 - \frac{\alpha K_\beta T}{2\mu} \right)^{5/2} \right] \right\} \quad (4)$$

Ahora, si $\frac{\alpha K_\beta T}{2\mu} \ll 1$ podemos desarrollar cada uno de los términos $(1 \pm \frac{\alpha K_\beta T}{2\mu})^n$ en serie de potencias. Tomando como buena aproximación hasta tercer orden (con lo cual se toman en cuenta todos los términos que dependen de T^2). Se substituye este desarrollo en la Ec. (4) y se obtiene:

$$N = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \left[\frac{2}{3} \mu^{3/2} + \frac{1}{48} \alpha^2 K_\beta^2 T^2 \mu^{-1/2} \right] \quad (5)$$

Podemos ver de esta ecuación que cuando $T \rightarrow 0$,

$$\mu (T = 0) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3 \pi^2 N}{V} \right)^{2/3},$$

que es precisamente la energía de Fermi ϵ_f . Así que a primera aproximación substituímos $\mu^{-1/2}$ por $\epsilon_f^{-1/2}$ en Ec. (5) encontrando que:

$$\mu = \epsilon_f \left[1 - \frac{\alpha^2}{32} \left(\frac{K_\beta}{\epsilon_f} \right)^2 T^2 \right]^{3/2}$$

Si además recordamos que $\frac{\alpha K_{\beta} T}{4\sqrt{\tau} \epsilon_f} \ll 1$, llegamos al siguiente resultado

$$\mu = \epsilon_f \left[1 - \frac{\alpha^2}{48} \left(\frac{K_{\beta}}{\epsilon_f} \right)^2 T^2 \right]. \quad (6)$$

Esta es la expresión para el potencial químico como función de la temperatura T y del parámetro α .

III. CALCULO DEL CALOR ESPECIFICO $C_{e\ell}$ EN TERMINOS DE α

Para conocer el calor específico de un sistema es necesario calcular, primero, su energía interna. Si consideramos el sistema de una temperatura $T = 0$ y lo calentamos a una temperatura T , entonces el incremento de energía del sistema, ΔE , lo podemos escribir como⁽²⁾

$$\Delta E = E_{\tau} - E_0 = \int_0^{\infty} f(\epsilon) D(\epsilon) \epsilon d\epsilon - \int_0^{\epsilon_f} f(\epsilon) D(\epsilon) \epsilon d\epsilon \quad (7)$$

La segunda integral de la Ec. (7) la podemos evaluar facilmente:

$$E_0 = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^{\epsilon_f} \epsilon^{3/2} d\epsilon = \frac{2}{5} \left[\frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \right] \epsilon_f^{5/2}; \quad (8)$$

mientras que la primera integral se puede escribir como:

$$E_{\tau} = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \left[\int_0^{\mu - \frac{1}{2}\alpha K_{\beta} T} \epsilon^{3/2} d\epsilon + \int_{\mu - \frac{1}{2}\alpha K_{\beta} T}^{\mu + \frac{1}{2}\alpha K_{\beta} T} \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{\alpha K_{\beta} T} (\epsilon - \mu) \right] \epsilon^{3/2} d\epsilon \right].$$

El método para calcular E_{τ} en análogo al empleado para calcular el potencial químico, obteniéndose

$$E_{\tau} = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \left[\frac{2}{5} \mu^{5/2} + \frac{1}{16} \alpha^2 K_{\beta}^2 T^2 \mu^{1/2} \right] \quad (9)$$

Substituyendo Ec. (8) y Ec. (9) en Ec. (7), la energía puede escri-

birse como:

$$\Delta E = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \left[\frac{2}{5} (\mu^{3/2} - \epsilon_f^{5/2}) + \frac{1}{16} \alpha^2 K^2 T^2 \mu^{1/2} \right] . \quad (10)$$

Para eliminar la dependencia del potencial químico μ en esta expresión reemplazamos $(\mu^{5/2} - \epsilon_f^{5/2})$ calculado de la Ec. (6) y substituímos $\epsilon_f^{1/2}$ por $\mu^{1/2}$ en el segundo término de la Ec. (10) para obtener:

$$\Delta E = \frac{\alpha^2 K^2 N T^2}{16 \epsilon_f} .$$

Para calcular el calor específico solo debemos derivar la energía con respecto de la temperatura, manteniendo el volumen constante,

$$C_{el} = \left(\frac{\partial \Delta E}{\partial T}\right)_V = \frac{\alpha^2 K^2 N}{8 \epsilon_f} T. \quad (11)$$

Como puede verse este resultado es una función de la temperatura T y del parámetro α .

IV. CALCULO DE LA CONDUCTIVIDAD ELECTRICA

La conductividad eléctrica σ de un material que obedece la ley de Ohm se obtiene a partir del modelo de un gas de electrones como⁽³⁾

$$\sigma = \frac{2ne}{3mk_{\beta}T} \frac{\int_0^{\infty} \epsilon^{3/2} \tau(\epsilon) f(\epsilon) [1 - f(\epsilon)] d\epsilon}{\int_0^{\infty} \epsilon^{1/2} f(\epsilon) d\epsilon} \quad (12)$$

donde $f(\epsilon)$ es la distribución de (F-D), Ec. (1), $\tau(\epsilon)$ es el tiempo de relajación, n la concentración y e la carga eléctrica.

Para evaluar estas integrales substituímos $f(\epsilon)$ por la distribución aproximada, Ec. (2), y tomamos $\tau(\epsilon) = \tau(\epsilon_f)$ (dado que las colisiones que tienen lugar en un gas de Fermi cuando se coloca en un campo eléctrico,

involucra solo electrones cerca de la superficie de Fermi). Así, la integral en el numerador, Ec. (12), la evaluamos como en la sección II, obteniéndose

$$\int_0^{\infty} \epsilon^{3/2} \tau(\epsilon) f(\epsilon) [1 - f(\epsilon)] d\epsilon = \tau(\epsilon_f) \int_{\mu - \frac{1}{2}\alpha K_{\beta} T}^{\mu + \frac{1}{2}\alpha K_{\beta} T} \epsilon^{3/2} \left[\frac{1}{4} - \frac{1}{\alpha^2 K_{\beta}^2 T^2} (\epsilon - \mu)^2 \right] d\epsilon$$

$$= \frac{\alpha}{6} K_{\beta} T \mu \tau(\epsilon_f) \left[1 + \frac{3\alpha^2 K_{\beta}^2 T^2}{160\mu^2} \right], \quad (13)$$

en tanto que la integral en el denominador es

$$\int_0^{\infty} \epsilon^{1/2} f(\epsilon) d\epsilon = \int_0^{\mu - \frac{1}{2}\alpha K_{\beta} T} \epsilon^{1/2} d\epsilon + \int_{\mu - \frac{1}{2}\alpha K_{\beta} T}^{\mu + \frac{1}{2}\alpha K_{\beta} T} \epsilon^{1/2} \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{\alpha K_{\beta} T} (\epsilon - \mu) \right] d\epsilon$$

$$= \frac{2}{3} \mu^{3/2} \left[1 + \frac{\alpha^2 K_{\beta}^2 T^2}{32\mu^2} \right] \quad (14)$$

Substituyendo la Ec. (13) y la Ec. (14), en la Ec. (12) obtenemos

$$\sigma = \frac{\alpha}{6} n e^2 \tau(\epsilon_f) \left[\frac{1 + \frac{3\alpha^2 K_{\beta}^2 T^2}{160\mu^2}}{1 + \frac{\alpha^2 K_{\beta}^2 T^2}{32\mu^2}} \right]$$

Pero como $\frac{K_{\beta} T}{\mu} \ll 1$, entonces

$$\sigma \approx \frac{\alpha}{6} n e^2 \tau(\epsilon_f). \quad (15)$$

Para comparar este resultado con el que se obtiene por el método convencional, necesitamos determinar el valor de α , y esto se hace en la siguiente sección.

V. DETERMINACION DEL PARAMETRO α

Para determinar el parámetro α , comparamos las expresiones del potencial químico μ , Ec. (6), y la del calor específico C_{el} , Ec. (11), con las que se obtienen por el método convencional^(1,2),

$$\mu = \epsilon_f \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{K_\beta}{\epsilon_f} \right)^2 T^2 \right] \text{ y } C_{el} = \frac{\pi^2 K_\beta^2 N}{2\epsilon_f} T ;$$

observamos que para que nuestro método esté de acuerdo con el convencional,

$$\alpha = 2\pi = 6.28$$

Substituyendo este valor en la Ec. (15) encontramos para la conductividad eléctrica

$$\sigma = \frac{2\pi}{6} n e^2 \tau(\epsilon_f) \approx n e^2 \tau(\epsilon_f) ,$$

el cual está de acuerdo con el obtenido convencionalmente⁽³⁾.

Además, la determinación de $\alpha = 2\pi$ podemos justificarla pidiendo que el número de estados para $\epsilon > \mu$ dado por la distribución de (F-D), - Ec. (1), sea el mismo que cuando se usa la aproximación, Ec. (2). Esto es, el área A_0 bajo la curva (Fig. 1) desde el punto $\epsilon = \mu$ hasta el infinito debe ser igual al área A_T encerrada por el triángulo de base $\frac{1}{2} \alpha K_\beta T$ y altura $\frac{1}{2}$, (Fig. 2). Entonces

$$A_T = \frac{\alpha K_\beta T}{8} ,$$

en tanto que

$$A_0 = \int_0^\infty \frac{d\epsilon}{e^{\epsilon/K_\beta T} + 1} = K_\beta T \ln 2 ;$$

igualando estos resultados, encontramos que

$$\alpha = 8 \ln 2 = 5.55$$

el cual es 13% más pequeño que $\alpha = 2\pi$.

VI. CONCLUSIONES

Puede usarse la distribución aproximada Ec. (2), como un sustituto de la distribución de (F-D) tomando $\alpha = 2\pi$ para obtener los mismos valores de potencial químico, calor específico y conductividad eléctrica, para el caso en que $k_B T \ll \epsilon_f$, que se encuentran por el método convencional. Esta distribución aproximada es de fácil manejo y simplifica la evaluación de integrales en donde aparezca la distribución de (F-D).

AGRADECIMIENTOS

Agradezco al Dr. A. Valladares sus valiosas sugerencias en este trabajo, así como al Dr. J. Urías y al Dr. J. Cisneros sus interesantes observaciones. También expreso mi agradecimiento a la ANUIES por la beca otorgada para realizar estudios de Maestría en el IF-UASLP, durante el año escolar 1975-1976.

REFERENCIAS

1. F. Reif, Fundamentos de Física Estadística y Térmica, McGraw Hill - Book Company, Sec. 9.17.
2. Charles Kittel, Introduction to Solid State Physics, John Wiley & Sons, Inc., Fourth Edition, Cap. 7.
3. J.P. McKelvey, Física del Estado Sólido y de Semiconductores, Editorial Limusa, Sec. 7.3.