

Física Quântica (2009-2010)

dúvidas	qualquer dia	9h00-18h00 (gab D43)
entregar	quarta feira 9/12	(gab D43)

- 22.** Um gás de fermiões, *gás de Fermi* ou *gás de electrões livres*, termos usados para descrever um conjunto de electrões não interactivos, é a versão de um gás ideal da Mecânica Quântica para o caso de partículas fermiónicas. Electrões em metais e semicondutores podem aproximadamente ser considerados gases de Fermi.

A distribuição da energia dos fermiões num gás de Fermi em equilíbrio térmico é determinada por sua densidade, pela temperatura e pelos estados disponíveis, através da estatística Fermi-Dirac.

Pelo princípio de exclusão de Pauli, nenhum estado quântico pode ser ocupado por mais de um fermião. Portanto, até à temperatura do zero absoluto a energia total do gás de Fermi é superior ao produto do número de partículas vezes a energia do estado fundamental.

- a** Considere uma partícula (massa m) livre, *i.e.* sem contribuição de qualquer forma de energia potencial ao Hamiltoniano, mas confinada a uma caixa unidimensional (fronteiras $x = 0$ e $x = L > 0$). Utilizando as condições fronteiras $\psi(x = 0) = \psi(x = L) = 0$, mostre que os níveis energéticos disponíveis à partícula são dados por (http://en.wikipedia.org/wiki/Particle_in_a_box)

$$E_n = \frac{1}{2m} n^2 \left(\frac{\pi \hbar}{L} \right)^2 .$$

- b** Determine a energia total para um conjunto que consiste num número de $2N$ electrões (<http://mathforum.org/library/drmath/view/56920.html>) e mostre que quando $N \gg 1$ o resultado pode ser aproximado por

$$E(2N) \approx \frac{1}{3m} N^3 \left(\frac{\pi \hbar}{L} \right)^2 .$$

- c** Explique porque o resultado da alínea **b** também pode ser obtido através a seguinte integração.

$$E(2N) \approx 2 \int_0^N dn E_n .$$

- 23.** Em virtude de se estar a estudar um gás de Fermi mais realista é preciso de considerar o movimento de electrões livres em três dimensões.
- a** Considere uma caixa cúbica com um volume de $V = L^3$. Mostre que a energia própria de uma função de onda admissível da forma

$$\sin\left(\frac{n_x\pi x}{L}\right)\sin\left(\frac{n_y\pi y}{L}\right)\sin\left(\frac{n_z\pi z}{L}\right) \quad ,$$

é dada por $E(n_x, n_y, n_z) = \frac{1}{2m} n^2 \left(\frac{\pi\hbar}{L}\right)^2$ com $n^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$.

- b** Os níveis energéticos disponíveis aos electrões podem ser representados por pontos (vectores) com três coordenadas $n_x = 1, 2, 3, \dots$, $n_y = 1, 2, 3, \dots$ e $n_z = 1, 2, 3, \dots$. Para um certo valor máximo $n_{\max}$ da grandeza n estes pontos enchem um oitavo de uma esfera com raio $n_{\max}$.
Utilizando a integração em três dimensões

$$\int_{\text{oitavo da esfera}} d^3n = \frac{1}{8} 4\pi \int_0^{n_{\max}} n^2 dn \quad ,$$

determine a relação entre o número de estados N e o "raio" da esfera $n_{\max}$.

- c** Determine a energia total $E(n_{\max})$ para um conjunto de $2N$ electrões que se movem livremente dentro da caixa cúbica acima referida e mostre que o resultado é igual a

$$E(2N) = \frac{6N\hbar^2}{10m} \left(\frac{6\pi^2 N}{V}\right)^{2/3} \quad .$$

- 24.** Mostre que a energia ε_F (energia de Fermi) dos níveis energéticos mais elevados de um conjunto de $2N$ electrões que se movem livremente dentro da uma caixa cúbica de volume V , é dada por

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

- a** Determine as energias de Fermi de cobre (densidade de electrões livres = $8.50 \times 10^{28}/\text{m}^3$), de sódio (densidade de electrões livres = $2.50 \times 10^{28}/\text{m}^3$), de prata (densidade de electrões livres = $5.76 \times 10^{28}/\text{m}^3$) e de ouro (densidade de electrões livres = $5.90 \times 10^{28}/\text{m}^3$).

Literatura: Charles Kittel, *Thermal Physics*.

Capítulo 10: Enumeration of orbitals.

Capítulo 14: Fermi-Dirac distribution.