Práctica 5: Gas de electrones libres

1. (a) Calcular la densidad de niveles en el espacio k para un gas de electrones libres contenidos en:
    i. una caja unidimensional de longitud L.
    ii. una caja bidimensional de longitud L.
    iii. una caja tridimensional de longitud L.

   (b) Calcular la densidad de estados $g(E)$ en función de la energía en los tres casos.

2. (a) Encontrar como depende K_F con la densidad electrónica.

   (b) Mostrar que la energía total de un gas de N electrones libres a $T = 0$ es $U = \frac{3}{5} N E_F$.

   (c) Derivar una relación conectando la presión y el volumen

   (d) Mostrar que el módulo de bulk es:

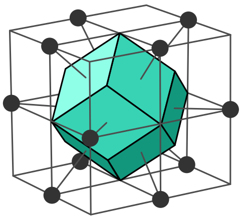
$$B = -V \frac{\partial P}{\partial V} = \frac{5}{3} P = \frac{10U}{9V} = \frac{2}{3} n E_F \tag{1}$$

   (e) Estimar el valor de B para el potasio, que tiene una densidad electrónica 1.4×10^{22} elect./cm^3 y su energía de Fermi es 2.12 eV. Comparar con el valor experimental:

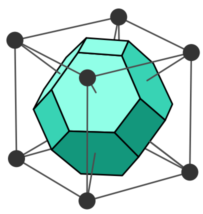
Bulk moduli in 10^{10} dynes/cm^3 for some typical metals

Metal	Free electron B	Measured B
Li	23.9	11.5
Na	9.23	6.42
K	3.19	2.81
Rb	2.28	1.92
Cs	1.54	1.43
Cu	63.8	134.3
Ag	34.5	99.9
Al	228	76.0

3. (a) Calcular el valor mínimo de la densidad electrónica para la cuál la esfera de Fermi toca el borde de la primera zona de Brillouin en:
    i. un metal con estructura bcc.
    ii. un metal con estructura fcc.



Primera zona de Brillouin de la red bcc



Primera zona de Brillouin de la red fcc

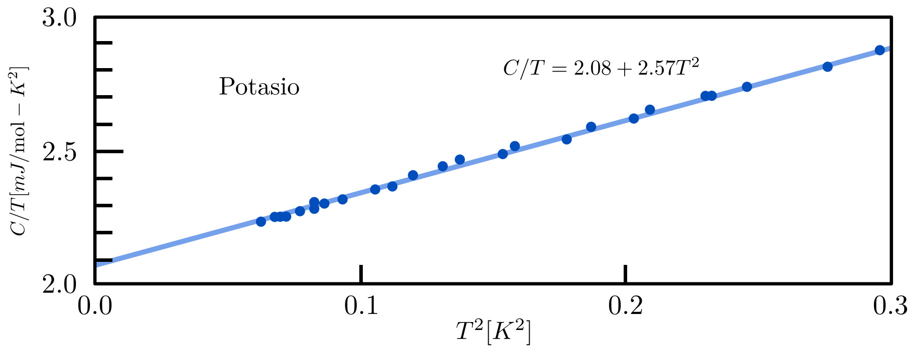
(b) Calcular la energía de Fermi del Na (bcc, $a = 4.3$ Å) y del Al (fcc, $a = 4$ Å) asumiendo la teoría de electrones libres. Determinar en cada caso si la esfera de Fermi está contenida dentro de la primer zona de Brillouin.

4. Susceptibilidad de Pauli

   Analice la contribución del spin de los electrones de conducción a la susceptibilidad magnética de un metal a $T = 0$ K. Para ello considere un campo magnético aplicado H y descomponga la densidad de estados $g(E)$ como suma de una $g_{\uparrow}(E)$ para electrones con spin paralelo al campo, y una $g_{\downarrow}(E)$ para electrones con spin antiparalelo. Escriba la magnetización en función del número de spines $\uparrow$ y $\downarrow$. Analice cuánto vale ahora la energía de un electron, y cómo se llenan los estados hasta el nivel de Fermi. Tenga en cuenta que aún para campos muy grandes (10^4 Gauss) la energía magnética ($\mu_B H$) es sólo del orden de $10^{-4} E_F$. Calcule la susceptibilidad.

5. (a) Cuando $T = 0$, el potencial químico μ es igual a la energía de Fermi. Calcular el primer término de corrección para $T \neq 0$ en los casos uni-, bi-, y tridimensionales.

   (b) Determinar analíticamente el calor específico a V constante de un gas de electrones que obedece la estadística de Fermi. Explicar por qué el calor específico del potasio a bajas temperaturas sigue una ley como la que se muestra en la siguiente figura.



   (c) Encontrar la razón entre el calor específico de un gas que obedece la estadística de Fermi y uno que sigue la estadística clásica. Calcular esta relación a temperatura ambiente para un metal cuya $E_F = 4$ eV.

6. La siguiente tabla muestra datos experimentales de la capacidad calorífica del cobre, expresada en 10^{-2} cal/mol K, en función de la temperatura en K.

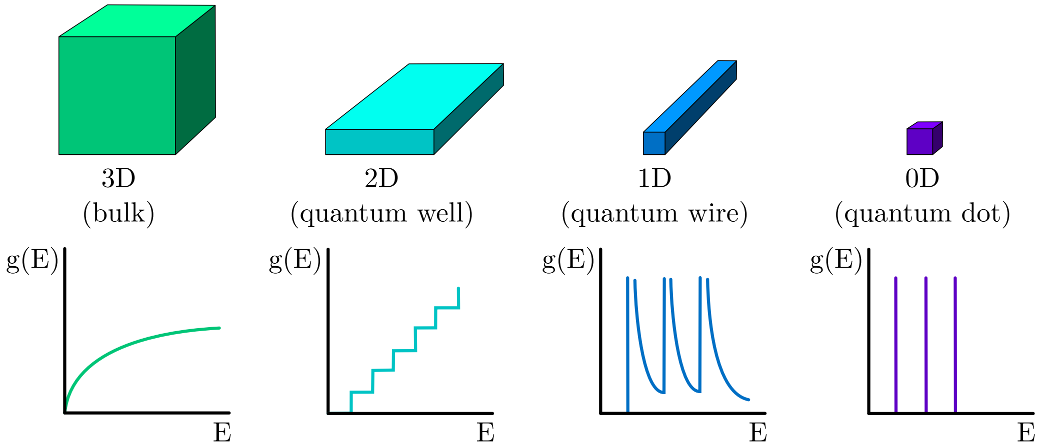
T	0.418	0.517	0.787	1.252	1.452	1.968	2.603
C_V	0.0070	0.0087	0.0136	0.0229	0.0275	0.0410	0.06214

T	3.020	3.498	3.579	4.023	4.606	5.301
C_V	0.0809	0.1065	0.1109	0.1407	0.1867	0.3464

   Mostrar que los resultados siguen una ley $C_V = \gamma T + aT^3$. Determinar los valores de γ y a. Estimar la energía de Fermi y la temperatura de Debye del Cu.

7. Considere un gas de electrones confinado en una caja de dimensiones L_x, L_y, L_z, donde $L_x \ll L_y$, L_z ("quantum well")

    (a) Explicar porqué la densidad de estados en función de la energía tiene el comportamiento indicado en la figura

    (b) Considerando la figura, argumente sobre el comportamiento de la densidad de estados para electrones confinados en dos ("quantum wire") y tres dimensiones ("quantum dot").

8. En ciertos casos de interés, como en la teoría BCS de la superconductividad, charge density waves, spin density waves, etc, el espectro de excitaciones de los estados electrónicos puede ser aproximado por la siguiente expresión:

$$E(k) = \left[(\epsilon(k) - E_F)^2 + \Lambda^2\right]^{1/2} \tag{2}$$

donde $\epsilon(k)$ es la relación de dispersión de un gas de electrones libres, E_F es la energía de Fermi, y Λ es una constante que proviene de una interacción efectiva entre electrones. Considerando que $\Lambda \ll E_F$:

    (a) Calcular y graficar la densidad de estados $g(E)$.

    (b) Comparar con el caso $\Lambda = 0$.

    (c) ¿Qué ocurre con las propiedades de conducción del gas de electrones libres cuando se "prende" la interacción efectiva entre los electrones?