

Modelo de Sommerfeld



Arnold Sommerfeld
(1868-1951)



Arnold Sommerfeld
(1868-1951)

Wilmer Lanier Barrow
Karl Bechert
Hans Bethe
Peter Debye
Paul Sophus Epstein
Paul Peter Ewald
Herbert Fröhlich
Erwin Fues
Ernst Guillemin
Werner Heisenberg
Walter Heitler
Karl Herzfeld
Helmut Hönl

Ludwig Hopf
Walther Kossel
Adolf Kratzer
Alfred Landé
Otto Laporte
Wilhelm Lenz
Herman March
Wolfgang Pauli
Wojciech Rubinowicz
Rudolf Seeliger
Ludwig Waldmann
Heinrich Welker
Gregor Wentzel



Arnold Sommerfeld
(1868-1951)

Nobel Pz.(P): 1967 →

Nobel Pz.(C): 1936 →

Nobel Pz.(P): 1932 →

Wilmer Lanier Barrow

Karl Bechert

Hans Bethe

Peter Debye

Paul Sophus Epstein

Paul Peter Ewald

Herbert Fröhlich

Erwin Fues

Ernst Guillemin

Werner Heisenberg

Walter Heitler

Karl Herzfeld

Helmut Hönl

Nobel Pz.(P): 1945 →

Ludwig Hopf

Walther Kossel

Adolf Kratzer

Alfred Landé

Otto Laporte

Wilhelm Lenz

Herman March

Wolfgang Pauli

Wojciech Rubinowicz

Rudolf Seeliger

Ludwig Waldmann

Heinrich Welker

Gregor Wentzel

The many-body problem: Electrons in solids

Energia cinética dos elétrons

Interação elétron-íon

Interação elétron-íon

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_i \nabla_i^2 - \sum_{i,I} \frac{Z_I e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_I|} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$$

$$-\sum_I \frac{\hbar^2}{2M_I} \nabla_I^2 + \frac{1}{2} \sum_{I \neq J} \frac{Z_I Z_J e^2}{|\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_J|}$$

Energia cinética dos íons

Interação íon-íon

$$e^2 \rightarrow e^2 / (4\pi\epsilon_0)$$

\vec{R}_I → posição do I-ésimo íon

\vec{r}_i → posição do i-ésimo elétron

Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Elétrons livres e independentes:

- Livres: Não fortemente ligado aos núcleos
- Independentes: não interagem entre si (nem com os núcleos)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_i \nabla_i^2$$

Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Elétrons livres e independentes:

- Livres: Não fortemente ligado aos núcleos
- Independentes: não interagem entre si (nem com os núcleos)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_i \nabla_i^2$$

N problemas
de 1 elétron!!!

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2$$

Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Elétrons livres e independentes:

- Livres: Não fortemente ligado aos núcleos
- Independentes: não interagem entre si (nem com os núcleos)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_i \nabla_i^2$$

N problemas
de 1 elétron!!!

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad \left(1 = \int dV |\psi|^2\right) \\ \varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \end{array} \right.$$

Note que a forma do volume V deixa de ser relevante caso seja muito grande (i.e., muito maior que o pacote de ondas associado às minhas partículas). Assim, faremos $V = L^3$.

Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Mas, e qual serão as condições de contorno? Adotaremos condições de contorno periódicas (Born-von Karman)

(Poderia adotar condições de contorno diferentes? Antiperiódicas? Fechadas?)

Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Mas, e qual serão as condições de contorno? Adotaremos condições de contorno periódicas (Born-von Karman)

(Poderia adotar condições de contorno diferentes? Antiperiódicas? Fechadas?)

$$\psi(x + L, y, z) = \psi(x, y, z)$$

$$\psi(x, y + L, z) = \psi(x, y, z)$$

$$\psi(x, y, z + L) = \psi(x, y, z)$$

Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Mas, e qual serão as condições de contorno? Adotaremos condições de contorno periódicas (Born-von Karman)

(Poderia adotar condições de contorno diferentes? Antiperiódicas? Fechadas?)

$$\psi(x + L, y, z) = \psi(x, y, z)$$

$$\psi(x, y + L, z) = \psi(x, y, z)$$

$$\psi(x, y, z + L) = \psi(x, y, z)$$

$$e^{ik_\alpha L} = 1 \quad \Rightarrow \quad k_\alpha = \frac{2\pi}{L} n_\alpha$$

$$n_\alpha \in \mathbb{Z}$$

Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Mas, e qual serão as condições de contorno? Adotaremos condições de contorno periódicas (Born-von Karman)

(Poderia adotar condições de contorno diferentes? Antiperiódicas? Fechadas?)

$$\psi(x + L, y, z) = \psi(x, y, z)$$

$$\psi(x, y + L, z) = \psi(x, y, z)$$

$$\psi(x, y, z + L) = \psi(x, y, z)$$

$$e^{ik_\alpha L} = 1 \quad \Rightarrow \quad k_\alpha = \frac{2\pi}{L} n_\alpha$$

$$n_\alpha \in \mathbb{Z}$$

Exemplo: cadeia unidimensional

$$E(k_x) = \frac{\hbar^2}{2m_e} k_x^2 = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2 n_x^2$$

Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Mas, e qual serão as condições de contorno? Adotaremos condições de contorno periódicas (Born-von Karman)

(Poderia adotar condições de contorno diferentes? Antiperiódicas? Fechadas?)

$$\psi(x + L, y, z) = \psi(x, y, z)$$

$$\psi(x, y + L, z) = \psi(x, y, z)$$

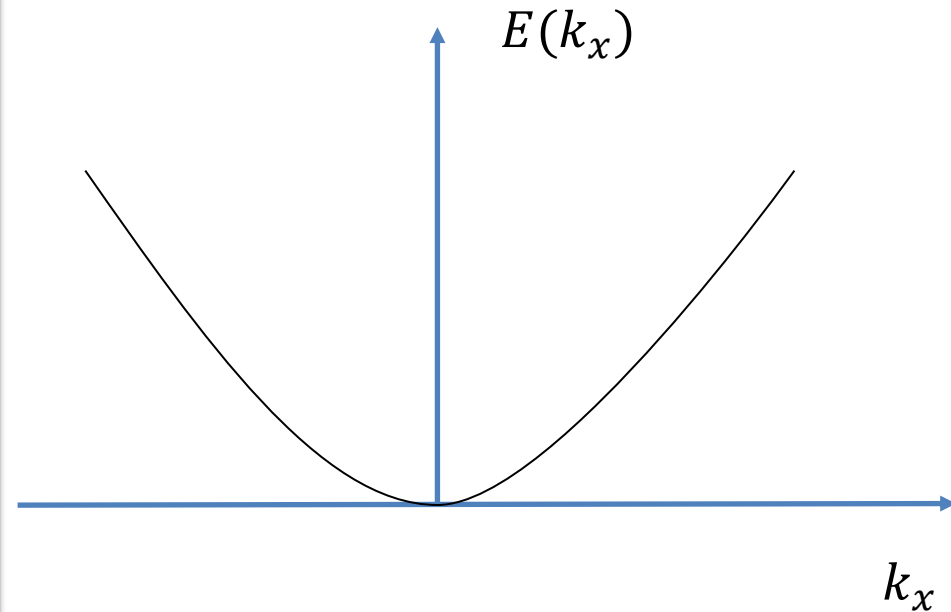
$$\psi(x, y, z + L) = \psi(x, y, z)$$

$$e^{ik_\alpha L} = 1 \quad \Rightarrow \quad k_\alpha = \frac{2\pi}{L} n_\alpha$$

$$n_\alpha \in \mathbb{Z}$$

Exemplo: cadeia unidimensional

$$E(k_x) = \frac{\hbar^2}{2m_e} k_x^2 = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2 n_x^2$$



Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Mas, e qual serão as condições de contorno? Adotaremos condições de contorno periódicas (Born-von Karman)

(Poderia adotar condições de contorno diferentes? Antiperiódicas? Fechadas?)

$$\psi(x + L, y, z) = \psi(x, y, z)$$

$$\psi(x, y + L, z) = \psi(x, y, z)$$

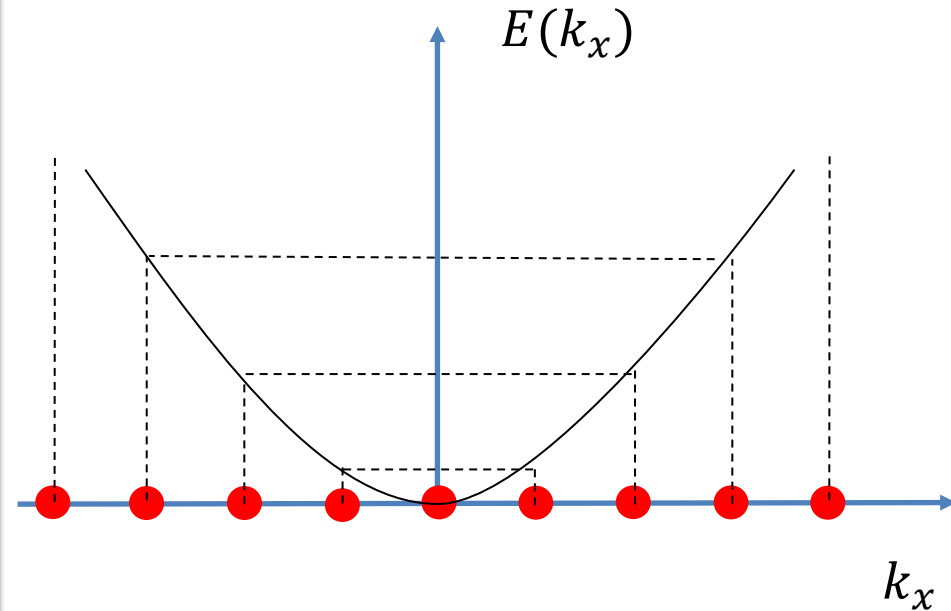
$$\psi(x, y, z + L) = \psi(x, y, z)$$

$$e^{ik_\alpha L} = 1 \quad \Rightarrow \quad k_\alpha = \frac{2\pi}{L} n_\alpha$$

$$n_\alpha \in \mathbb{Z}$$

Exemplo: cadeia unidimensional

$$E(k_x) = \frac{\hbar^2}{2m_e} k_x^2 = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2 n_x^2$$



Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Mas, e qual serão as condições de contorno? Adotaremos condições de contorno periódicas (Born-von Karman)

(Poderia adotar condições de contorno diferentes? Antiperiódicas? Fechadas?)

$$\psi(x + L, y, z) = \psi(x, y, z)$$

$$\psi(x, y + L, z) = \psi(x, y, z)$$

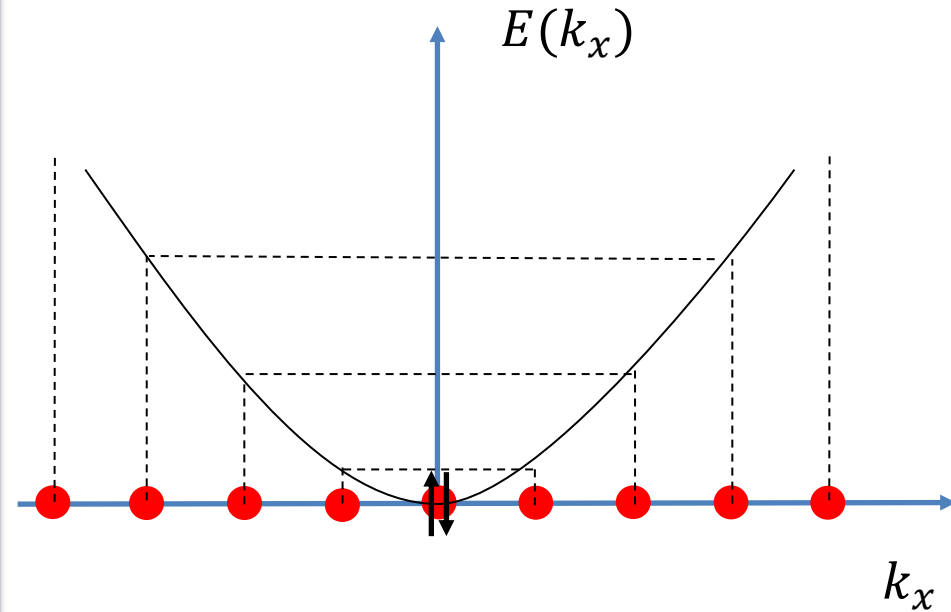
$$\psi(x, y, z + L) = \psi(x, y, z)$$

$$e^{ik_\alpha L} = 1 \quad \Rightarrow \quad k_\alpha = \frac{2\pi}{L} n_\alpha$$

$$n_\alpha \in \mathbb{Z}$$

Exemplo: cadeia unidimensional

$$E(k_x) = \frac{\hbar^2}{2m_e} k_x^2 = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2 n_x^2$$



Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Mas, e qual serão as condições de contorno? Adotaremos condições de contorno periódicas (Born-von Karman)

(Poderia adotar condições de contorno diferentes? Antiperiódicas? Fechadas?)

$$\psi(x + L, y, z) = \psi(x, y, z)$$

$$\psi(x, y + L, z) = \psi(x, y, z)$$

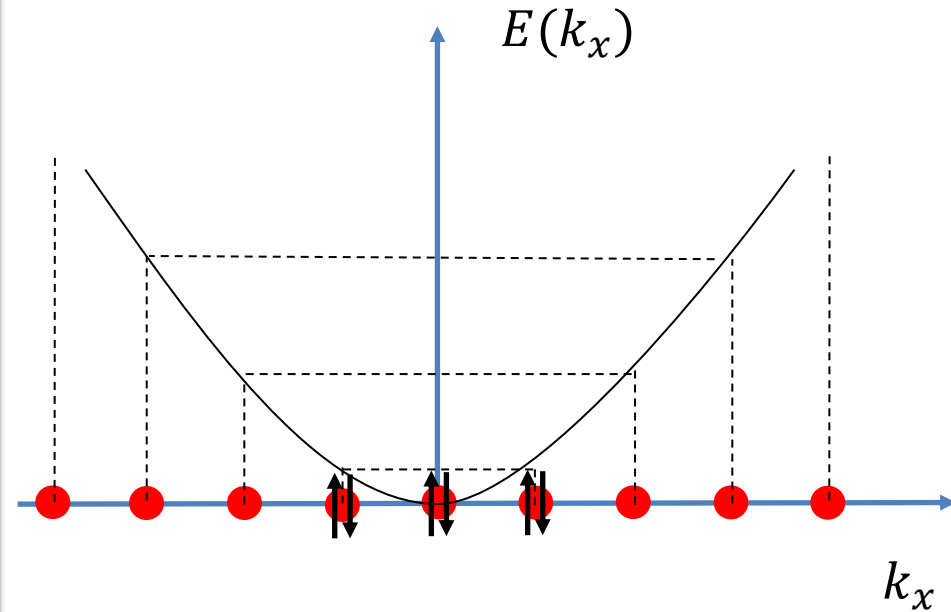
$$\psi(x, y, z + L) = \psi(x, y, z)$$

$$e^{ik_\alpha L} = 1 \quad \Rightarrow \quad k_\alpha = \frac{2\pi}{L} n_\alpha$$

$$n_\alpha \in \mathbb{Z}$$

Exemplo: cadeia unidimensional

$$E(k_x) = \frac{\hbar^2}{2m_e} k_x^2 = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2 n_x^2$$



Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Mas, e qual serão as condições de contorno? Adotaremos condições de contorno periódicas (Born-von Karman)

(Poderia adotar condições de contorno diferentes? Antiperiódicas? Fechadas?)

$$\psi(x + L, y, z) = \psi(x, y, z)$$

$$\psi(x, y + L, z) = \psi(x, y, z)$$

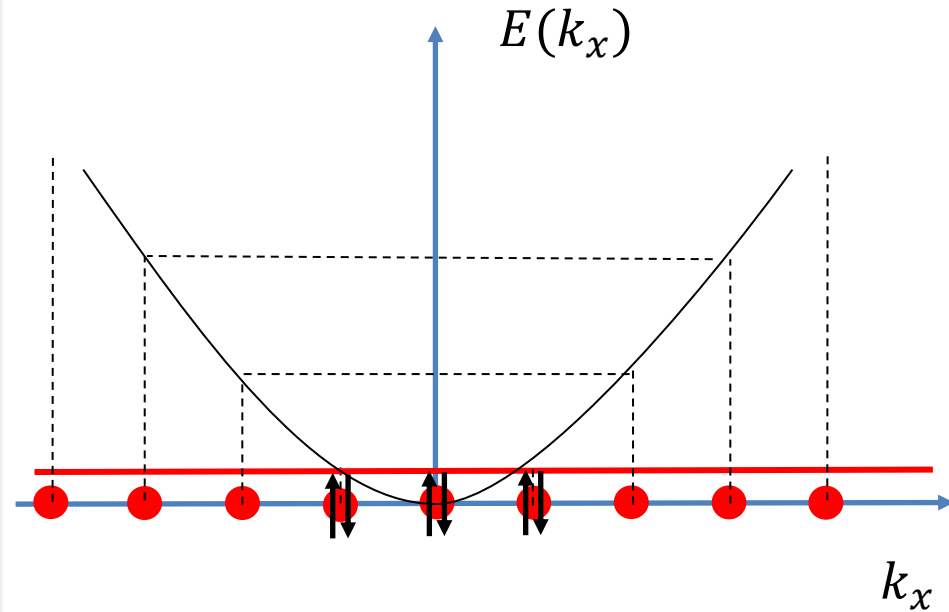
$$\psi(x, y, z + L) = \psi(x, y, z)$$

$$e^{ik_{\alpha}L} = 1 \quad \Rightarrow \quad k_{\alpha} = \frac{2\pi}{L} n_{\alpha}$$

$$n_{\alpha} \in \mathbb{Z}$$

Exemplo: cadeia unidimensional

$$E(k_x) = \frac{\hbar^2}{2m_e} k_x^2 = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2 n_x^2$$



Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Mas, e qual serão as condições de contorno? Adotaremos condições de contorno periódicas (Born-von Karman)

(Poderia adotar condições de contorno diferentes? Antiperiódicas? Fechadas?)

$$\psi(x + L, y, z) = \psi(x, y, z)$$

$$\psi(x, y + L, z) = \psi(x, y, z)$$

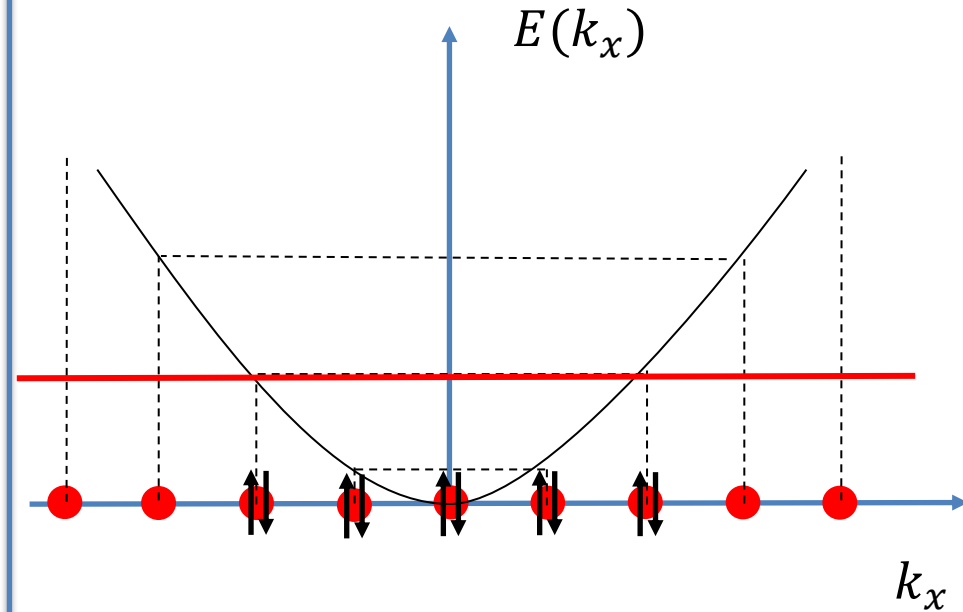
$$\psi(x, y, z + L) = \psi(x, y, z)$$

$$e^{ik_\alpha L} = 1 \quad \Rightarrow \quad k_\alpha = \frac{2\pi}{L} n_\alpha$$

$$n_\alpha \in \mathbb{Z}$$

Exemplo: cadeia unidimensional

$$E(k_x) = \frac{\hbar^2}{2m_e} k_x^2 = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2 n_x^2$$



Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Mas, e qual serão as condições de contorno? Adotaremos condições de contorno periódicas (Born-von Karman)

(Poderia adotar condições de contorno diferentes? Antiperiódicas? Fechadas?)

$$\psi(x + L, y, z) = \psi(x, y, z)$$

$$\psi(x, y + L, z) = \psi(x, y, z)$$

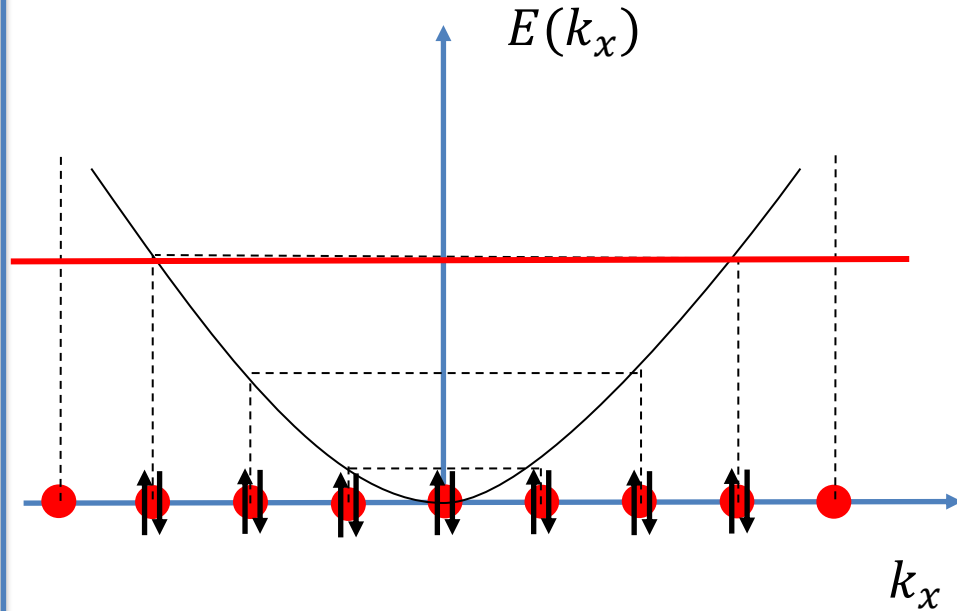
$$\psi(x, y, z + L) = \psi(x, y, z)$$

$$e^{ik_\alpha L} = 1 \quad \Rightarrow \quad k_\alpha = \frac{2\pi}{L} n_\alpha$$

$$n_\alpha \in \mathbb{Z}$$

Exemplo: cadeia unidimensional

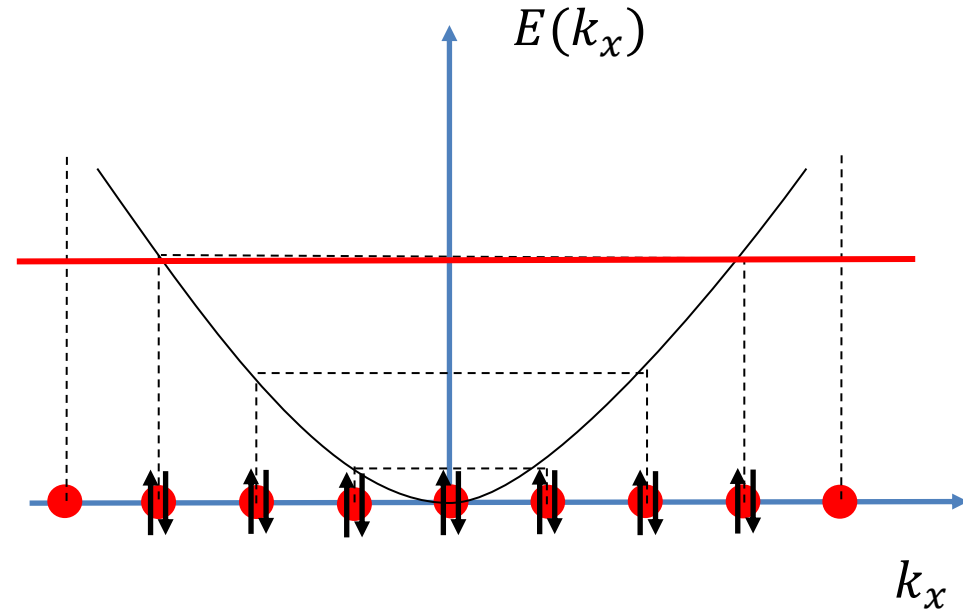
$$E(k_x) = \frac{\hbar^2}{2m_e} k_x^2 = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2 n_x^2$$



Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Um pouco de nomenclatura...

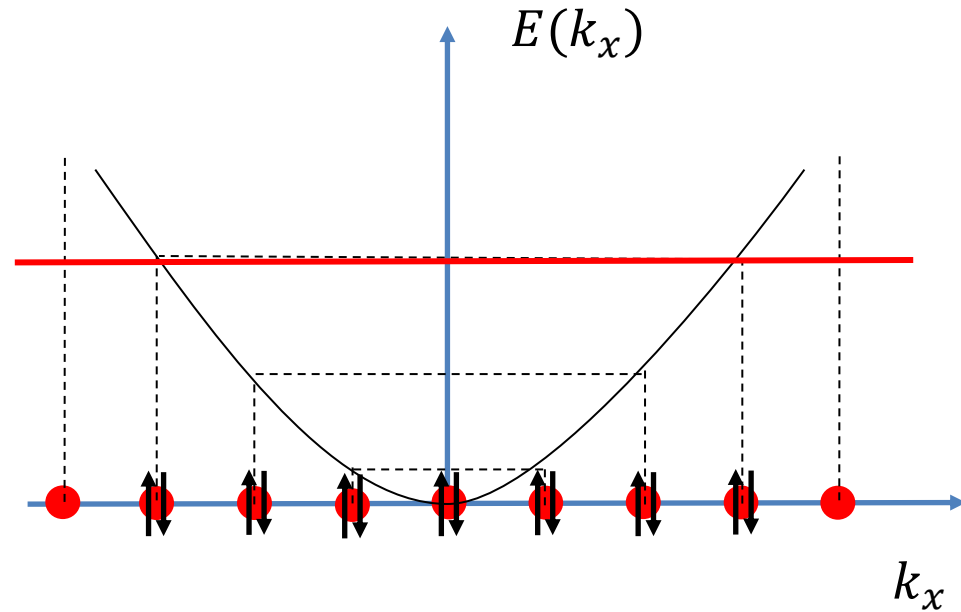
- $E_F \equiv$ Energia que define o último nível eletrônico preenchido;



Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Um pouco de nomenclatura...

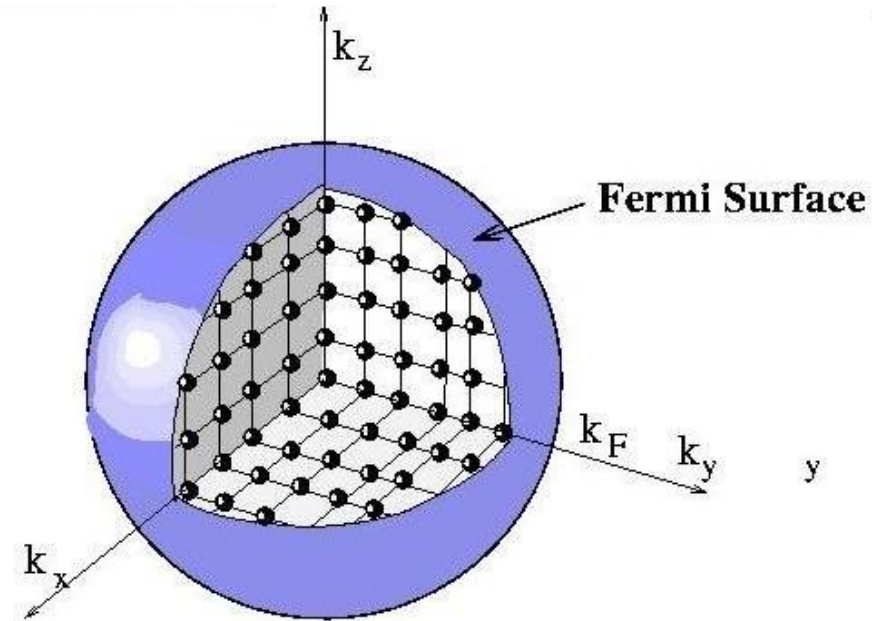
- $E_F \equiv$ Energia que define o último nível eletrônico preenchido;
- $k_F \equiv$ o conjunto de vetores de onda cuja energia associada é E_F ;



Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Um pouco de nomenclatura...

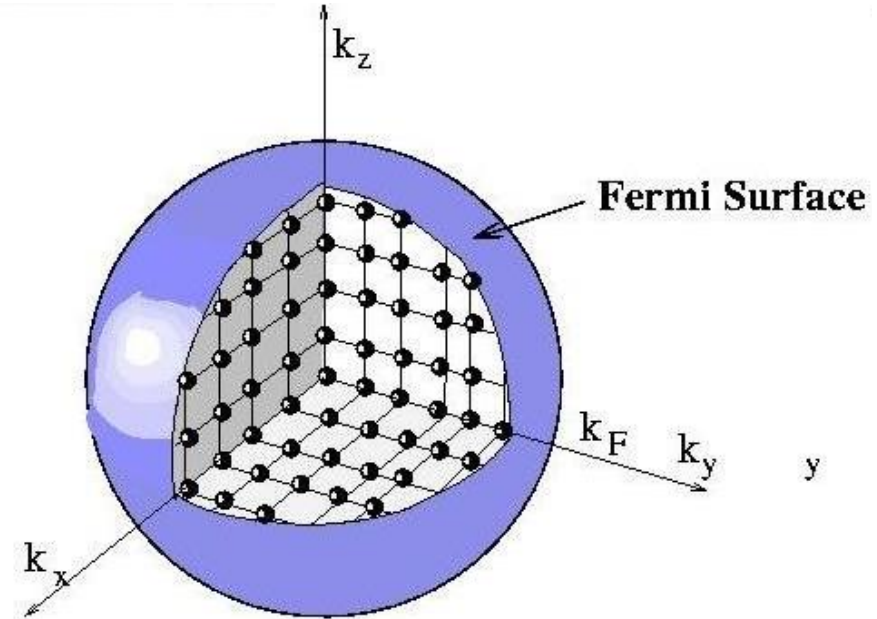
- $E_F \equiv$ Energia que define o último nível eletrônico preenchido;
- $k_F \equiv$ o conjunto de vetores de onda cuja energia associada é E_F ;



Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Um pouco de nomenclatura...

- $E_F \equiv$ Energia que define o último nível eletrônico preenchido;
- $k_F \equiv$ o conjunto de vetores de onda cuja energia associada é E_F ;
- Esfera de Fermi \equiv Conjunto de todos os vetores cujas energias associadas são $E(\vec{k}) \leq E_F$;
- Superfície de Fermi \equiv Lugar geométrico definido pelo conjunto de todos os vetores de onda k_F .



Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Qual é a densidade eletrônica para um dado valor de k_F ? Ou, dada a densidade eletrônica, qual é o valor de k_F ?

Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Qual é a densidade eletrônica para um dado valor de k_F ? Ou, dada a densidade eletrônica, qual é o valor de k_F ?

$$N_e = 2 \times N_k = 2 \times \frac{\textit{Fermi Sphere}}{\textit{k - point volume}}$$

$$N_e = 2 \times N_k = 2 \times \frac{\frac{4}{3}\pi k_F^3}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3}$$

Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Qual é a densidade eletrônica para um dado valor de k_F ? Ou, dada a densidade eletrônica, qual é o valor de k_F ?

$$N_e = 2 \times N_k = 2 \times \frac{\textit{Fermi Sphere}}{\textit{k - point volume}}$$

$$N_e = 2 \times N_k = 2 \times \frac{\frac{4}{3}\pi k_F^3}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3}$$

$$\frac{N_e}{V} \equiv n = \frac{k_F^3}{3\pi^3} \left\{ \begin{array}{l} k_F = (3\pi^3 n)^{1/3} \\ E_F = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^3 n)^{2/3} \end{array} \right.$$

Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Qual é a densidade eletrônica para um dado valor de k_F ? Ou, dada a densidade eletrônica, qual é o valor de k_F ?

$$N_e = 2 \times N_k = 2 \times \frac{\text{Fermi Sphere}}{k\text{-point volume}}$$

$$N_e = 2 \times N_k = 2 \times \frac{\frac{4}{3}\pi k_F^3}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3}$$

$$\frac{N_e}{V} \equiv n = \frac{k_F^3}{3\pi^3} \left\{ \begin{array}{l} k_F = (3\pi^3 n)^{1/3} \\ E_F = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^3 n)^{2/3} \end{array} \right.$$

Um pouco mais de nomenclatura...

Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Qual é a densidade eletrônica para um dado valor de k_F ? Ou, dada a densidade eletrônica, qual é o valor de k_F ?

$$N_e = 2 \times N_k = 2 \times \frac{\text{Fermi Sphere}}{k\text{-point volume}}$$

$$N_e = 2 \times N_k = 2 \times \frac{\frac{4}{3}\pi k_F^3}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3}$$

$$\frac{N_e}{V} \equiv n = \frac{k_F^3}{3\pi^3} \left\{ \begin{array}{l} k_F = (3\pi^3 n)^{1/3} \\ E_F = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^3 n)^{2/3} \end{array} \right.$$

Um pouco mais de nomenclatura...

- $v_F \equiv$ velocidade de Fermi (velocidade associada aos elétrons no nível de Fermi);

$$\frac{\hbar^2 k_F}{2m} = \frac{1}{2} m v_F^2 \quad v_F \approx 10^6 \text{ m/s}$$

Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Qual é a densidade eletrônica para um dado valor de k_F ? Ou, dada a densidade eletrônica, qual é o valor de k_F ?

$$N_e = 2 \times N_k = 2 \times \frac{\text{Fermi Sphere}}{k\text{-point volume}}$$

$$N_e = 2 \times N_k = 2 \times \frac{\frac{4}{3}\pi k_F^3}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3}$$

$$\frac{N_e}{V} \equiv n = \frac{k_F^3}{3\pi^3} \left\{ \begin{array}{l} k_F = (3\pi^3 n)^{1/3} \\ E_F = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^3 n)^{2/3} \end{array} \right.$$

Um pouco mais de nomenclatura...

- $v_F \equiv$ velocidade de Fermi (velocidade associada aos elétrons no nível de Fermi);

$$\frac{\hbar^2 k_F}{2m} = \frac{1}{2} m v_F^2 \quad k_B T_F = E_F$$

- $T_F \equiv$ Temperatura de Fermi (escala de temperatura associada à energia térmica para excitar os elétrons mais internos);

$$k_B T_F = E_F \quad T_F \approx 10^4 \text{ K}$$

Table 2.1

**FERMI ENERGIES, FERMI TEMPERATURES, FERMI WAVE VECTORS, AND
FERMI VELOCITIES FOR REPRESENTATIVE METALS^a**

ELEMENT	r_s/a_0	ϵ_F	T_F	k_F	v_F
Li	3.25	4.74 eV	5.51×10^4 K	$1.12 \times 10^8 \text{ cm}^{-1}$	$1.29 \times 10^8 \text{ cm/sec}$
Na	3.93	3.24	3.77	0.92	1.07
K	4.86	2.12	2.46	0.75	0.86
Rb	5.20	1.85	2.15	0.70	0.81
Cs	5.62	1.59	1.84	0.65	0.75
Cu	2.67	7.00	8.16	1.36	1.57
Ag	3.02	5.49	6.38	1.20	1.39
Au	3.01	5.53	6.42	1.21	1.40
Be	1.87	14.3	16.6	1.94	2.25
Mg	2.66	7.08	8.23	1.36	1.58
Ca	3.27	4.69	5.44	1.11	1.28
Sr	3.57	3.93	4.57	1.02	1.18
Ba	3.71	3.64	4.23	0.98	1.13
Nb	3.07	5.32	6.18	1.18	1.37
Fe	2.12	11.1	13.0	1.71	1.98
Mn	2.14	10.9	12.7	1.70	1.96
Zn	2.30	9.47	11.0	1.58	1.83
Cd	2.59	7.47	8.68	1.40	1.62
Hg	2.65	7.13	8.29	1.37	1.58
Al	2.07	11.7	13.6	1.75	2.03
Ga	2.19	10.4	12.1	1.66	1.92
In	2.41	8.63	10.0	1.51	1.74
Tl	2.48	8.15	9.46	1.46	1.69
Sn	2.22	10.2	11.8	1.64	1.90
Pb	2.30	9.47	11.0	1.58	1.83
Bi	2.25	9.90	11.5	1.61	1.87
Sb	2.14	10.9	12.7	1.70	1.96

Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Notem que $n = 2 \times \frac{\Omega_F}{2\pi^3}$

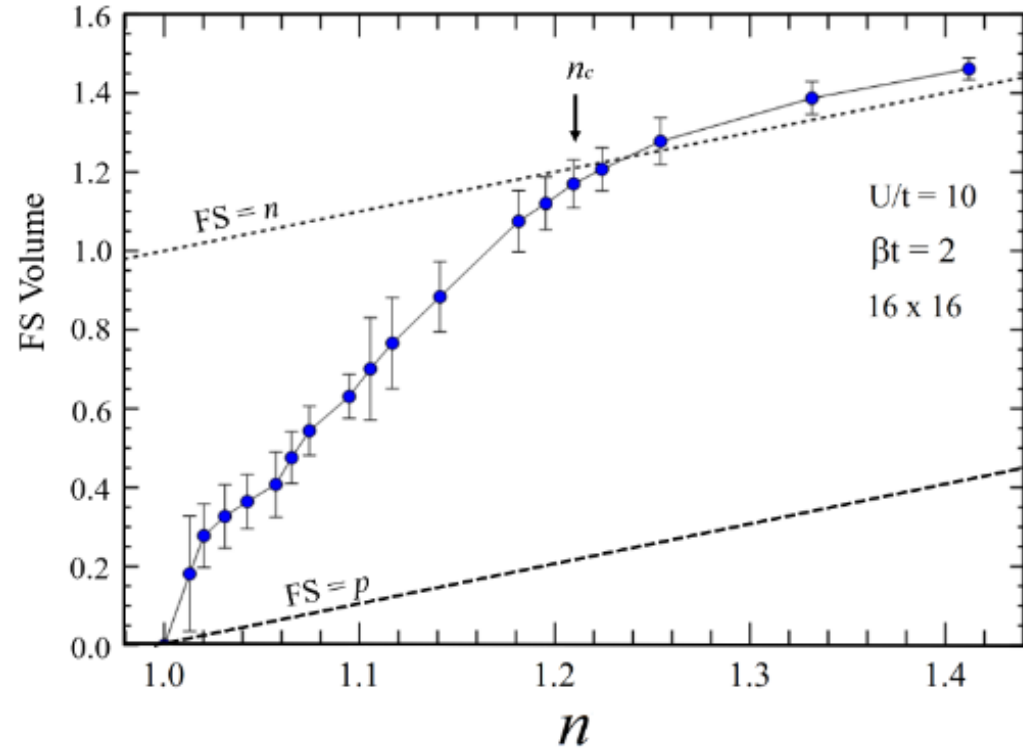
Teorema de Luttinger: O volume da esfera de Fermi Ω_F (i.e. dos estados limitados pela superfície de Fermi) é constante e depende apenas da ocupação eletrônica, independente se o sistema é interagente ou não.

Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Notem que
$$n = 2 \times \frac{\Omega_F}{2\pi^3}$$

Teorema de Luttinger: O volume da esfera de Fermi Ω_F (i.e. dos estados limitados pela superfície de Fermi) é constante e depende apenas da ocupação eletrônica, independente se o sistema é interagente ou não.

Breakdown of the LT



Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Como calcular grandezas físicas?

$$F_{tot} = 2 \sum_{k < k_F} F(\mathbf{k})$$

Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Como calcular grandezas físicas?

$$F_{tot} = 2 \sum_{k < k_F} F(\mathbf{k}) \quad F_{tot} = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{k < k_F} d\mathbf{k} F(\mathbf{k})$$

Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Como calcular grandezas físicas?

$$F_{tot} = 2 \sum_{k < k_F} F(\mathbf{k}) \quad F_{tot} = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{k < k_F} d\mathbf{k} F(\mathbf{k})$$

Vamos calcular a energia interna...

Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Como calcular grandezas físicas?

$$F_{tot} = 2 \sum_{k < k_F} F(\mathbf{k}) \quad F_{tot} = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{k < k_F} d\mathbf{k} F(\mathbf{k})$$

Vamos calcular a energia interna...

$$\begin{aligned} E &= 2 \sum_{k < k_F} \varepsilon(\mathbf{k}) \\ &= 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{k < k_F} d\mathbf{k} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \end{aligned}$$

Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Como calcular grandezas físicas?

$$F_{tot} = 2 \sum_{k < k_F} F(\mathbf{k}) \quad F_{tot} = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{k < k_F} d\mathbf{k} F(\mathbf{k})$$

Vamos calcular a energia interna...

$$\begin{aligned} E &= 2 \sum_{k < k_F} \varepsilon(\mathbf{k}) \\ &= 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{k < k_F} d\mathbf{k} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \\ &= \frac{V}{4\pi^3} \int_0^{k_F} dk (4\pi k^2) \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_F^5 V}{10\pi^2 m} \end{aligned}$$

Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Como calcular grandezas físicas?

$$F_{tot} = 2 \sum_{k < k_F} F(\mathbf{k}) \quad F_{tot} = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{k < k_F} d\mathbf{k} F(\mathbf{k})$$

Vamos calcular a energia interna...

$$\begin{aligned} E &= 2 \sum_{k < k_F} \varepsilon(\mathbf{k}) \\ &= 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{k < k_F} d\mathbf{k} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \\ &= \frac{V}{4\pi^3} \int_0^{k_F} dk (4\pi k^2) \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_F^5 V}{10\pi^2 m} \end{aligned}$$

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{5} \varepsilon_F$$

Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Como calcular grandezas físicas?

$$F_{tot} = 2 \sum_{k < k_F} F(\mathbf{k}) \quad F_{tot} = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{k < k_F} d\mathbf{k} F(\mathbf{k})$$

Vamos calcular a energia interna...

$$\begin{aligned} E &= 2 \sum_{k < k_F} \varepsilon(\mathbf{k}) \\ &= 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{k < k_F} d\mathbf{k} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \\ &= \frac{V}{4\pi^3} \int_0^{k_F} dk (4\pi k^2) \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_F^5 V}{10\pi^2 m} \end{aligned}$$

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{5} \varepsilon_F$$

$$P = - \left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_N$$

$$B = -V \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_N = \frac{2}{3} n \varepsilon_F$$

Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Como calcular grandezas físicas?

$$F_{tot} = 2 \sum_{k < k_F} F(\mathbf{k}) \quad F_{tot} = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{k < k_F} d\mathbf{k} F(\mathbf{k})$$

Vamos calcular a energia interna...

$$\begin{aligned} E &= 2 \sum_{k < k_F} \varepsilon(\mathbf{k}) \\ &= 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{k < k_F} d\mathbf{k} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \\ &= \frac{V}{4\pi^3} \int_0^{k_F} dk (4\pi k^2) \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_F^5 V}{10\pi^2 m} \end{aligned}$$

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{5} \varepsilon_F \quad P = - \left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_N$$

$$B = -V \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_N = \frac{2}{3} n \varepsilon_F$$

Metal	Gás de elétrons livres	Experimental
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

Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Densidade de estados

Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Densidade de estados

$$F_{tot} = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{k < k_F} d\mathbf{k} F(\mathbf{k})$$

Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Densidade de estados

$$F_{tot} = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{k < k_F} d\mathbf{k} F(\mathbf{k})$$

$$F_{tot} = V \int d\varepsilon D(\varepsilon) F(\varepsilon)$$

Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Densidade de estados

$$F_{tot} = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{k < k_F} d\mathbf{k} F(\mathbf{k})$$

$$F_{tot} = V \int d\varepsilon D(\varepsilon) F(\varepsilon)$$

$$D(\varepsilon) = \frac{\gamma}{(2\pi)^3} \int_{k < k_F} d\mathbf{k} \delta[\varepsilon - \epsilon(\vec{k})]$$

- $D(\varepsilon)d\varepsilon \equiv \#$ de estados com energia entre ε e $\varepsilon + d\varepsilon$ (por unidade de volume)

Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Densidade de estados

$$F_{tot} = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{k < k_F} d\mathbf{k} F(\mathbf{k})$$

$$F_{tot} = V \int d\varepsilon D(\varepsilon) F(\varepsilon)$$

$$D(\varepsilon) = \frac{\gamma}{(2\pi)^3} \int_{k < k_F} d\mathbf{k} \delta[\varepsilon - \epsilon(\vec{k})]$$

- $D(\varepsilon)d\varepsilon \equiv \#$ de estados com energia entre ε e $\varepsilon + d\varepsilon$ (por unidade de volume)

Gás de elétrons 3D:

ε

Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

Densidade de estados

$$F_{tot} = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{k < k_F} d\mathbf{k} F(\mathbf{k})$$

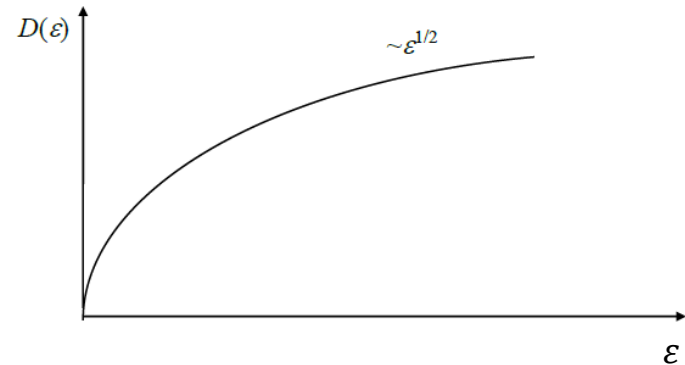
$$F_{tot} = V \int d\varepsilon D(\varepsilon) F(\varepsilon)$$

$$D(\varepsilon) = \frac{\gamma}{(2\pi)^3} \int_{k < k_F} d\mathbf{k} \delta[\varepsilon - \varepsilon(\vec{k})]$$

- $D(\varepsilon)d\varepsilon \equiv \#$ de estados com energia entre ε e $\varepsilon + d\varepsilon$ (por unidade de volume)

Gás de elétrons 3D:

$$D(\varepsilon) = \frac{\gamma}{(2\pi)^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \varepsilon^{1/2}$$



Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

De um modo geral, a densidade de estados pode ser escrita como

$$D(\varepsilon) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{dS}{|\vec{\nabla}\varepsilon(\vec{k})|}$$

Sempre que $|\vec{\nabla}\varepsilon(\vec{k})| \rightarrow 0$, o integrando diverge, logo a integral pode ou não divergir. Tais divergências são especiais, e serão chamadas de agora em diante de singularidades de *van Hove*.

Pode se mostrar que em sistemas 2 e 3D temos pelo menos uma singularidade de van Hove.

Modelo de Sommerfeld: Estado Fundamental

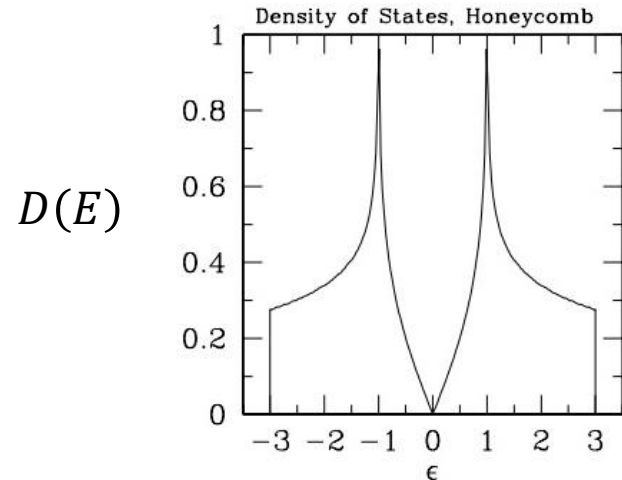
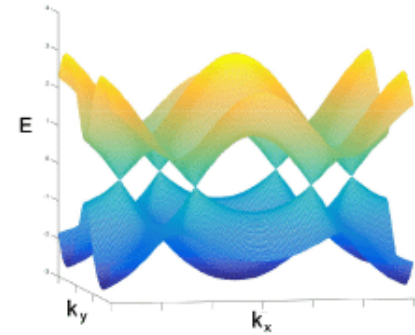
De um modo geral, a densidade de estados pode ser escrita como

$$D(\varepsilon) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{dS}{|\vec{\nabla}\varepsilon(\vec{k})|}$$

Sempre que $|\vec{\nabla}\varepsilon(\vec{k})| \rightarrow 0$, o integrando diverge, logo a integral pode ou não divergir. Tais divergências são especiais, e serão chamadas de agora em diante de singularidades de *van Hove*.

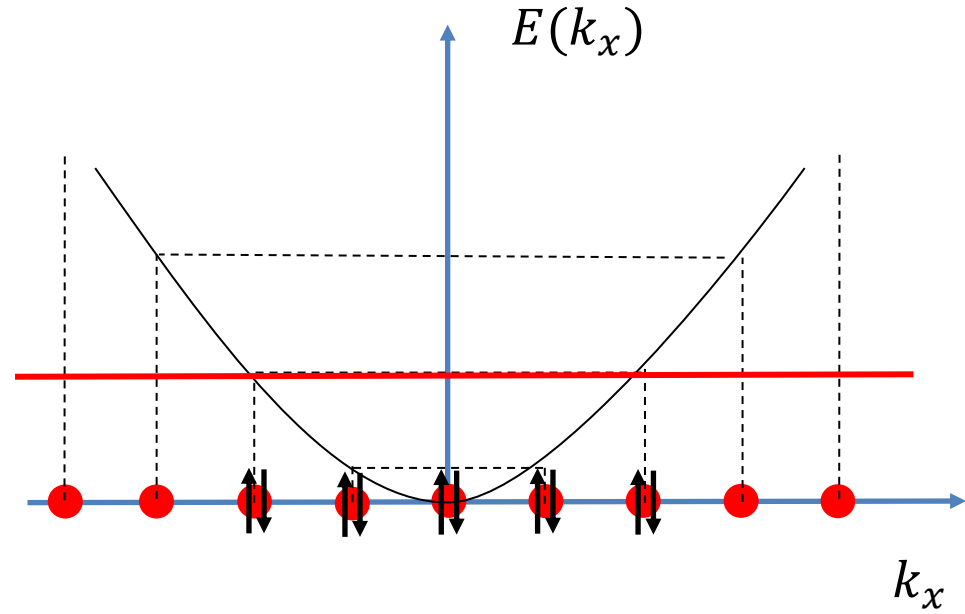
Pode se mostrar que em sistemas 2 e 3D temos pelo menos uma singularidade de van Hove.

Ex: Graphene (honeycomb lattice)



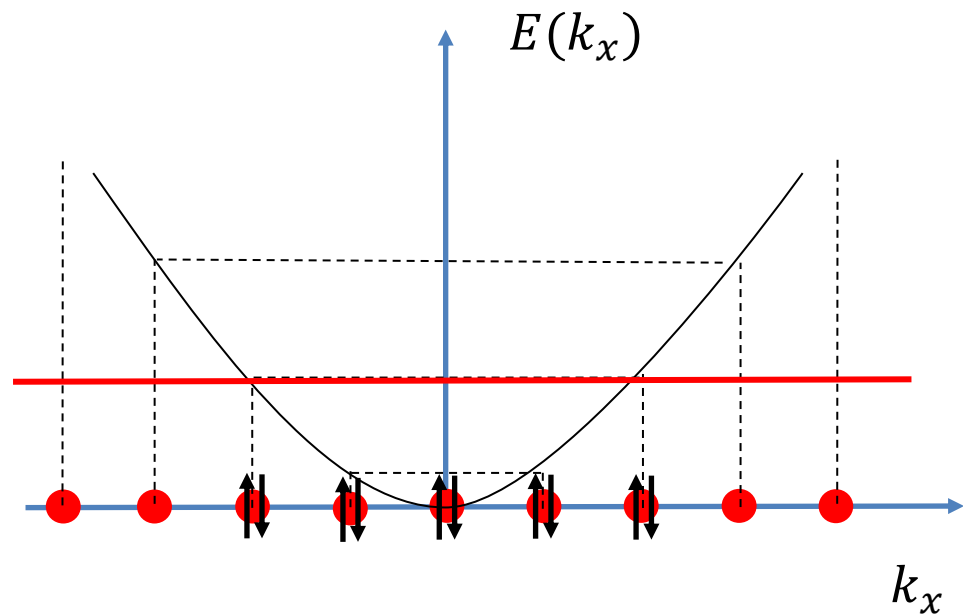
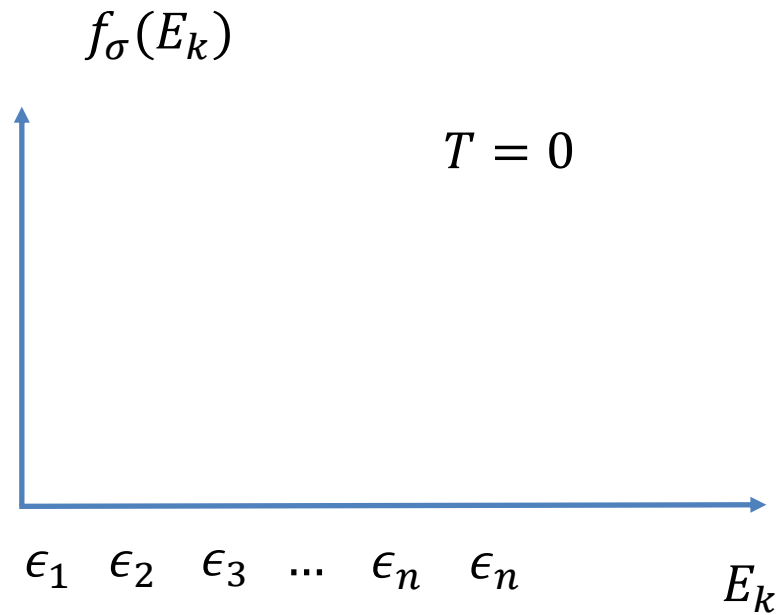
**Modelo de Sommerfeld:
Temperatura finita ($T \ll T_F$)**

Estadística de Fermi-Dirac



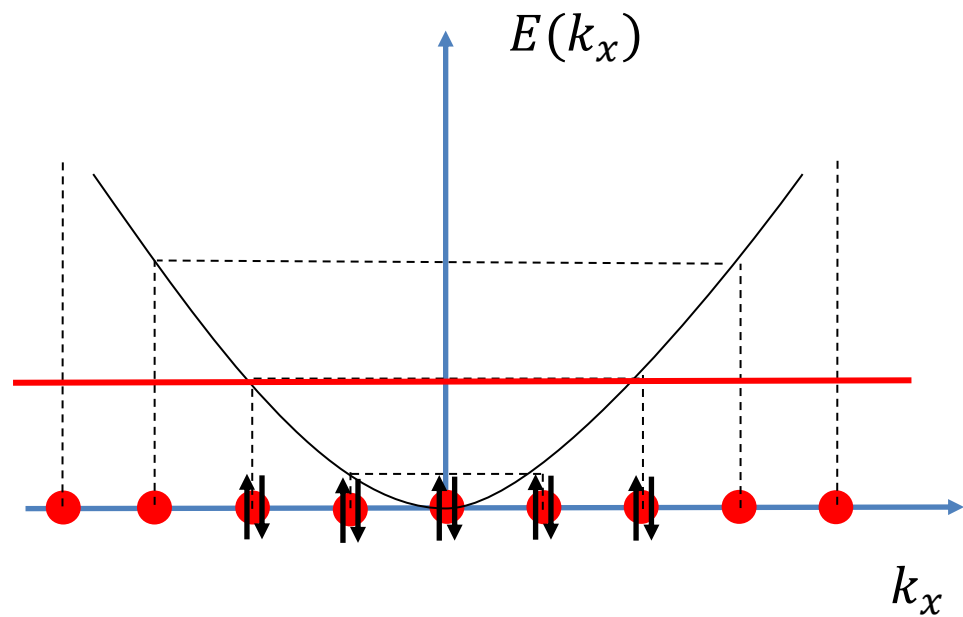
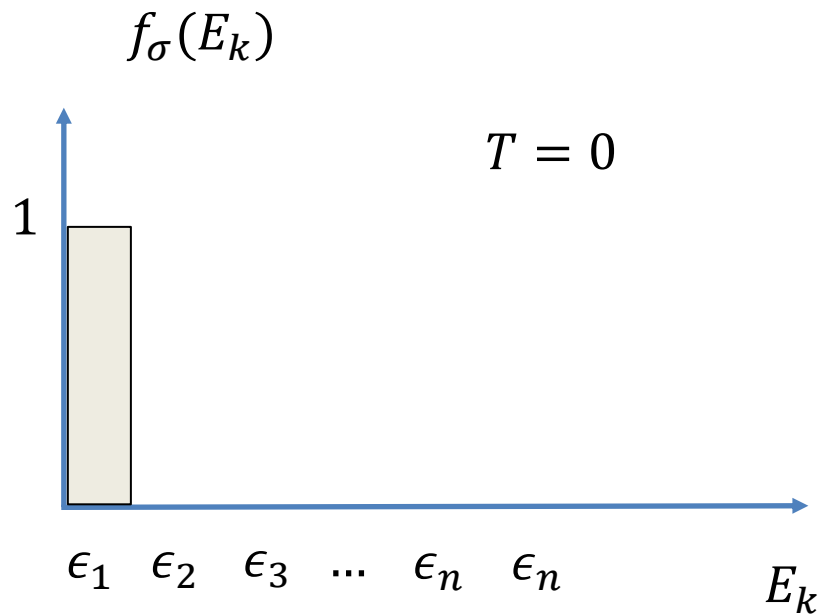
**Modelo de Sommerfeld:
Temperatura finita ($T \ll T_F$)**

Estatística de Fermi-Dirac



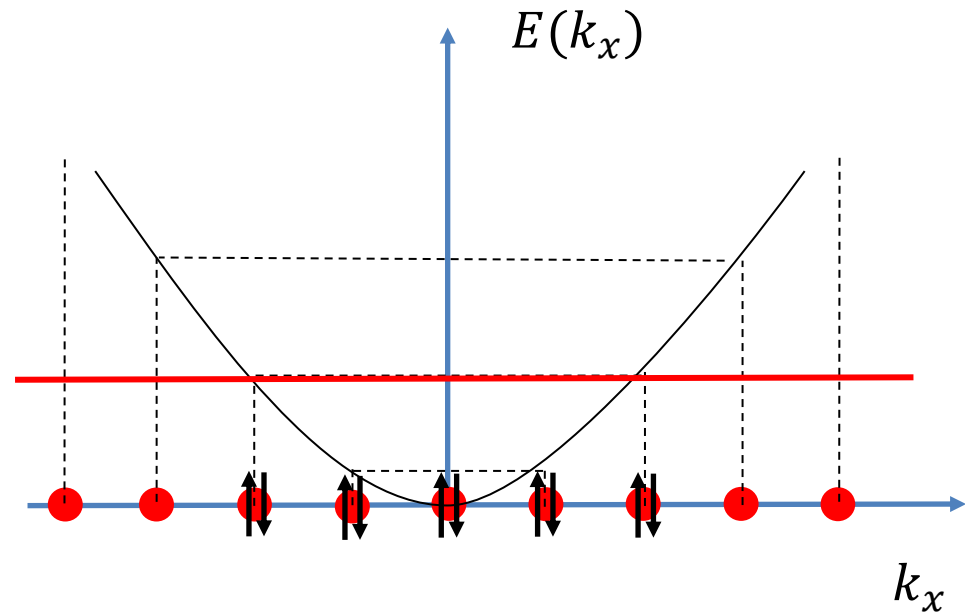
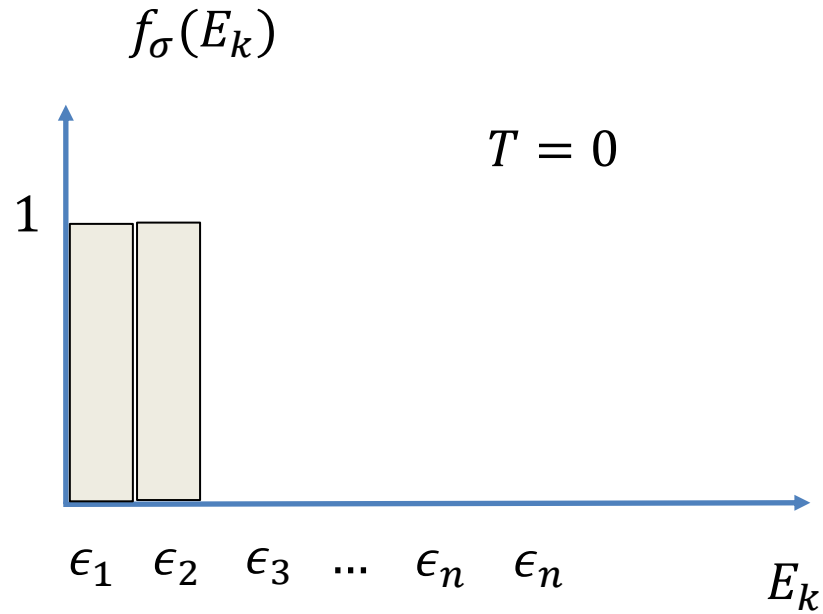
**Modelo de Sommerfeld:
Temperatura finita ($T \ll T_F$)**

Estatística de Fermi-Dirac



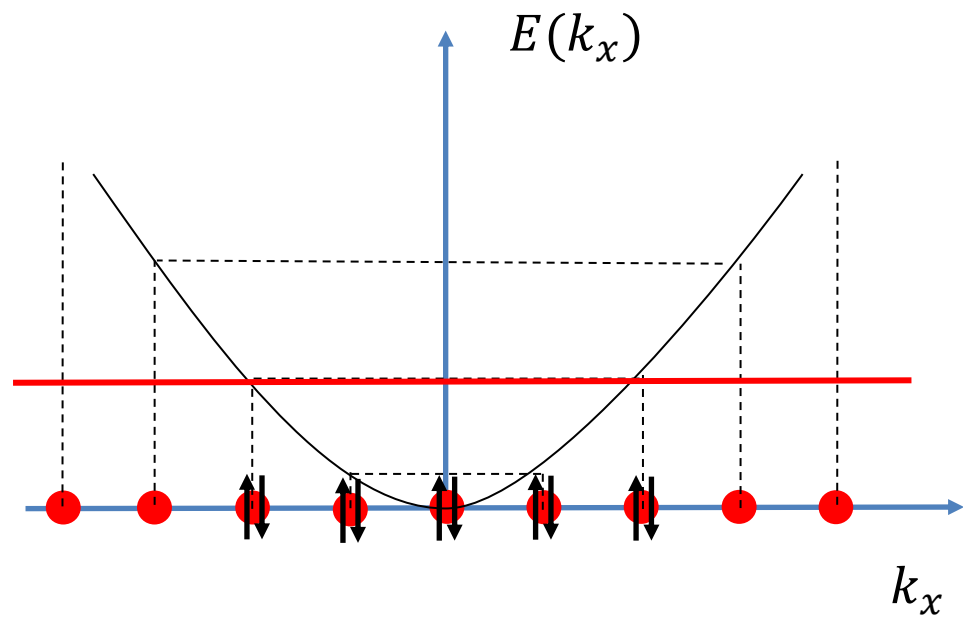
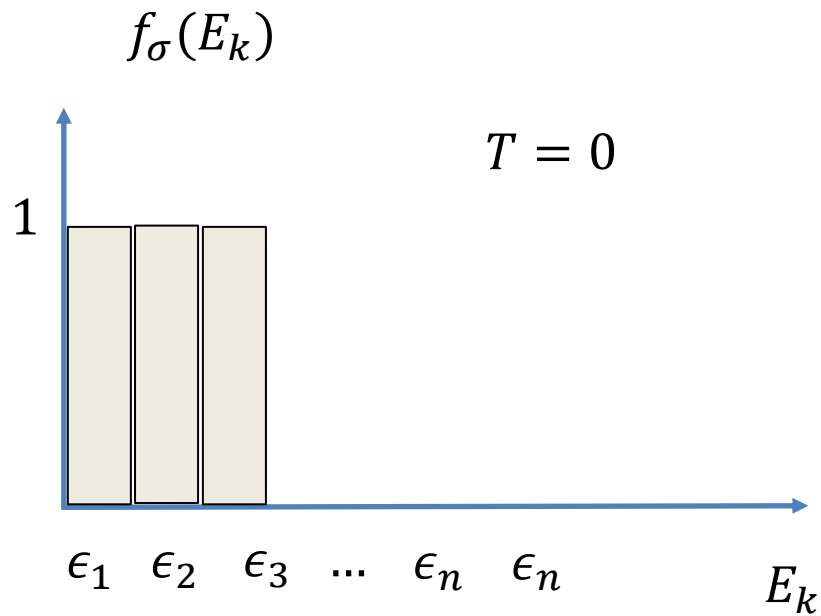
**Modelo de Sommerfeld:
Temperatura finita ($T \ll T_F$)**

Estatística de Fermi-Dirac



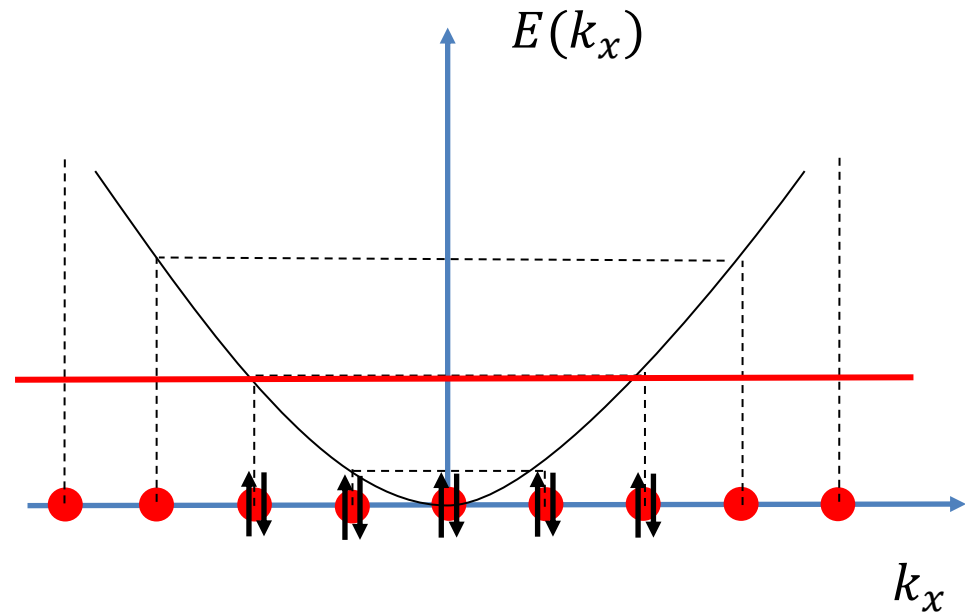
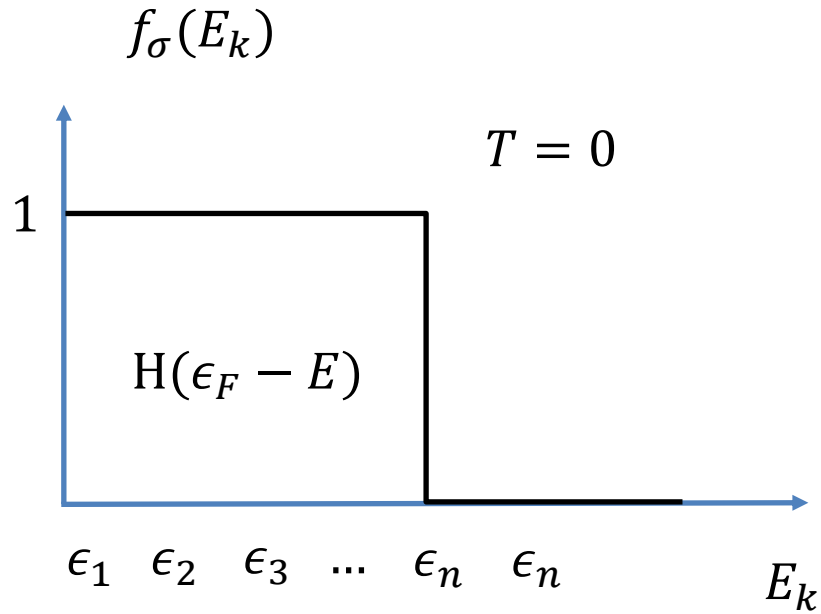
**Modelo de Sommerfeld:
Temperatura finita ($T \ll T_F$)**

Estatística de Fermi-Dirac



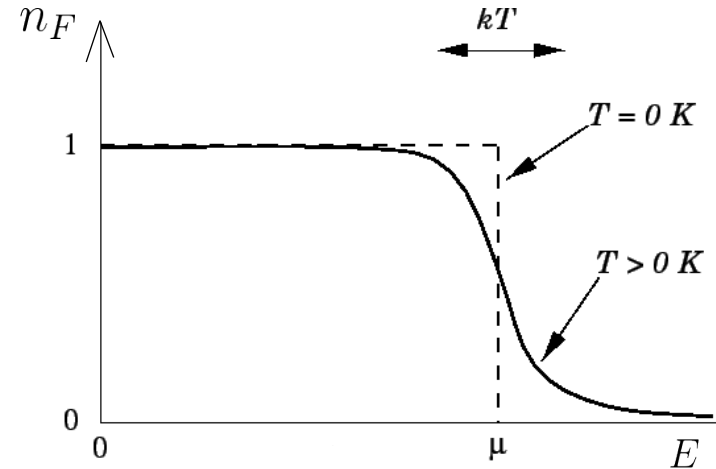
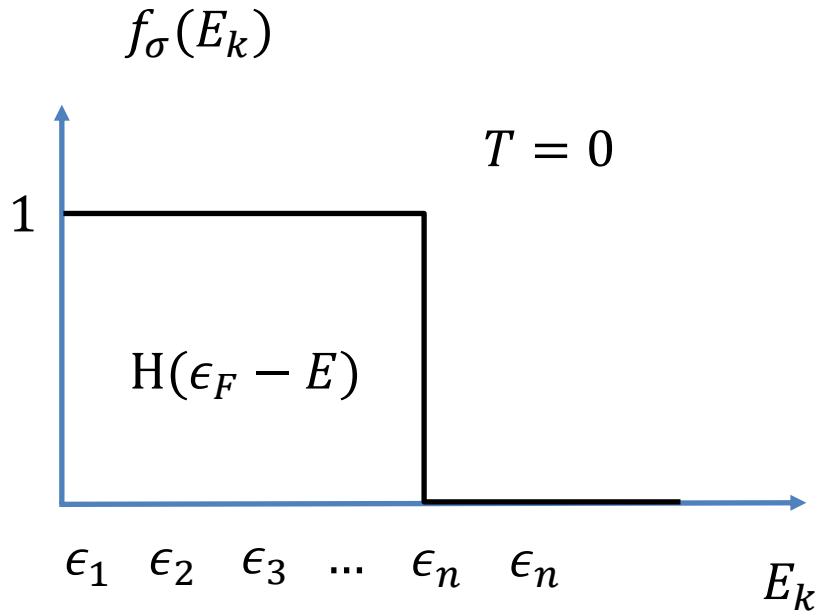
**Modelo de Sommerfeld:
Temperatura finita ($T \ll T_F$)**

Estatística de Fermi-Dirac



**Modelo de Sommerfeld:
Temperatura finita ($T \ll T_F$)**

Estatística de Fermi-Dirac

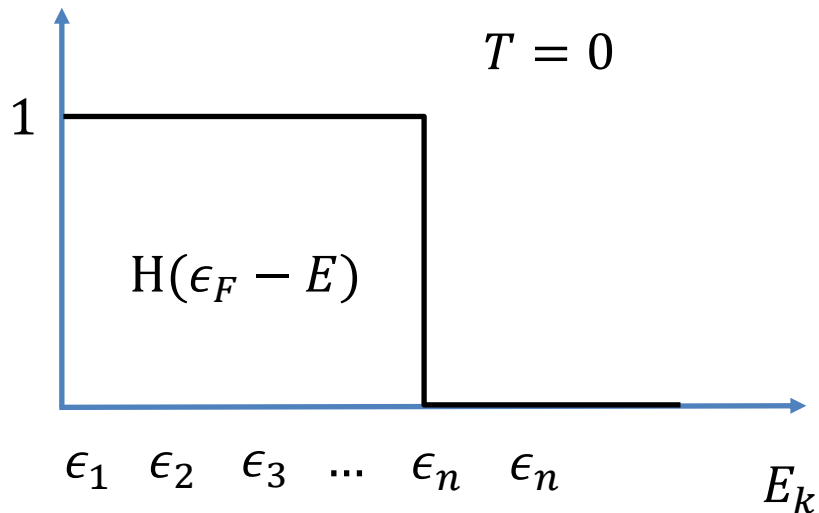


$$T_F = E_F / k_B$$

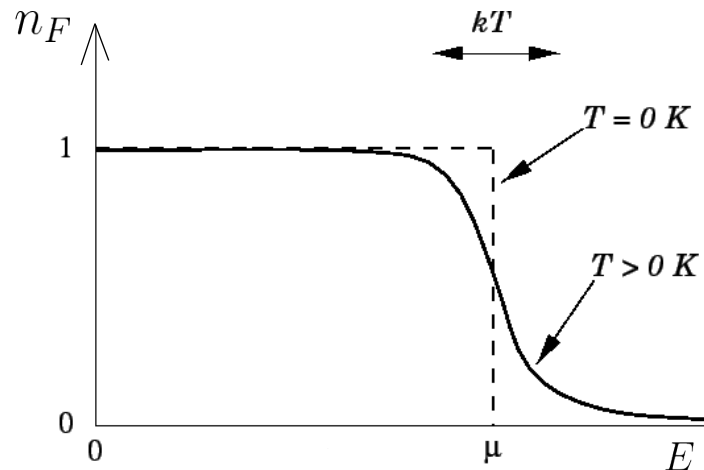
**Modelo de Sommerfeld:
Temperatura finita ($T \ll T_F$)**

Estatística de Fermi-Dirac

$f_\sigma(E_k)$



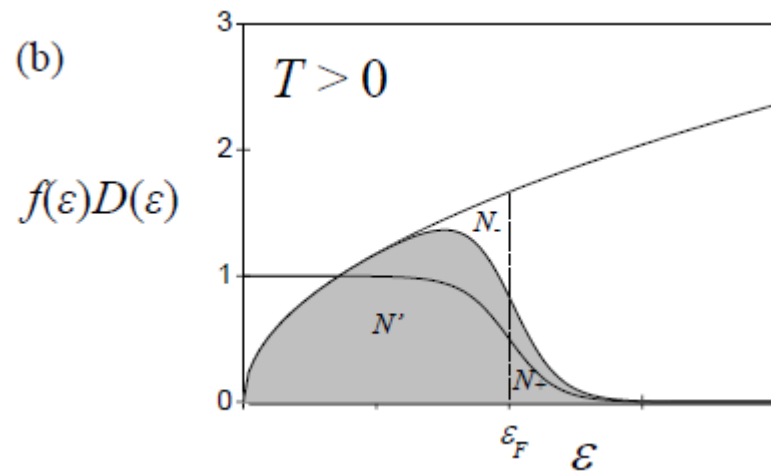
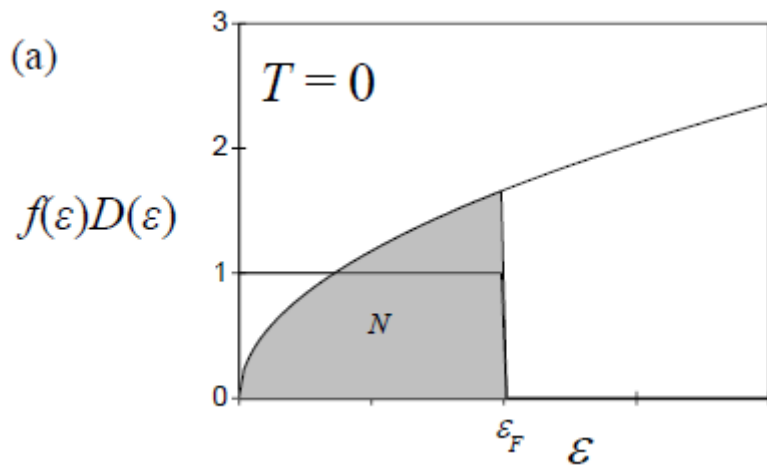
$$n_E \equiv f_\sigma(E) = \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} + 1}$$



$$T_F = E_F / k_B$$

**Modelo de Sommerfeld:
Temperatura finita ($T \ll T_F$)**

Densidade de estados ($T \neq 0$)



**Modelo de Sommerfeld:
Temperatura finita ($T \ll T_F$)**

Capacidade Térmica Eletrônica

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}$$

Modelo de Sommerfeld:
Temperatura finita ($T \ll T_F$)

Capacidade Térmica Eletrônica

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}$$

$$E = E_0 + \textit{thermal contributions}$$

$$E = E_0 + E_T$$

Modelo de Sommerfeld:
Temperatura finita ($T \ll T_F$)

Capacidade Térmica Eletrônica

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}$$

$$E = E_0 + \textit{thermal contributions}$$

$$E = E_0 + E_T$$

$$E_T = \#electrons \times \epsilon_T$$

Modelo de Sommerfeld:
Temperatura finita ($T \ll T_F$)

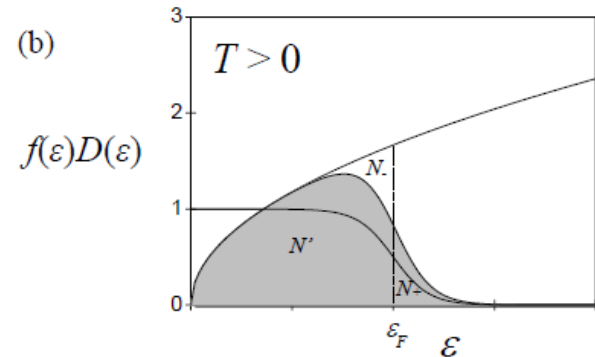
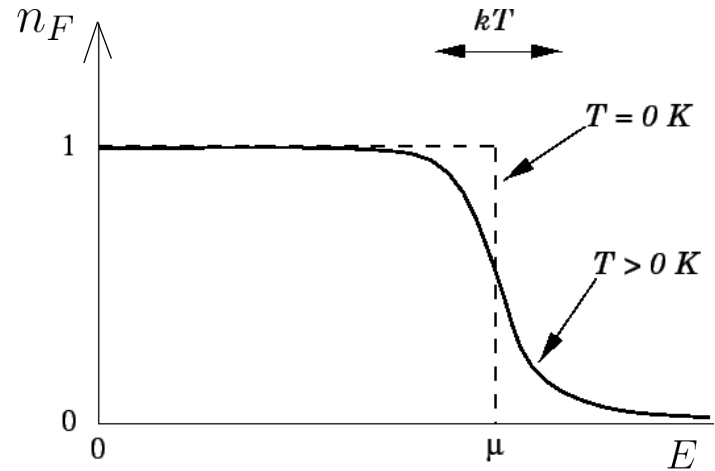
Capacidade Térmica Eletrônica

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}$$

$$E = E_0 + \text{thermal contributions}$$

$$E = E_0 + E_T$$

$$E_T = \# \text{electrons} \times \epsilon_T$$



Modelo de Sommerfeld:
 Temperatura finita ($T \ll T_F$)

Capacidade Térmica Eletrônica

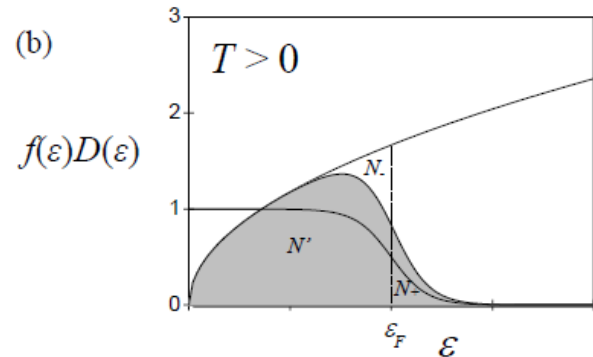
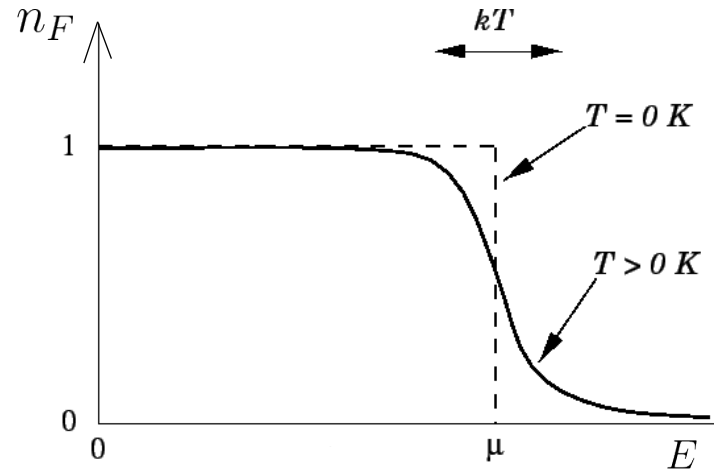
$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}$$

$$E = E_0 + \text{thermal contributions}$$

$$E = E_0 + E_T$$

$$E_T = \# \text{electrons} \times \epsilon_T$$

$$D(E_F) \times k_B T$$



Modelo de Sommerfeld:
 Temperatura finita ($T \ll T_F$)

Capacidade Térmica Eletrônica

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}$$

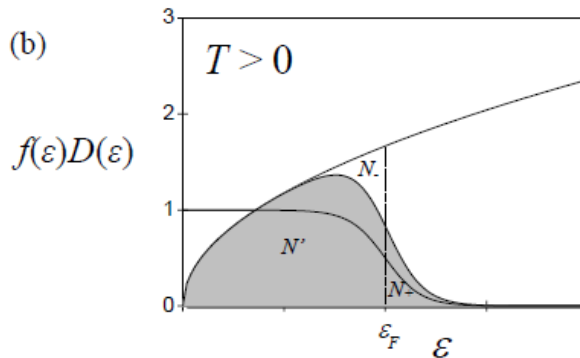
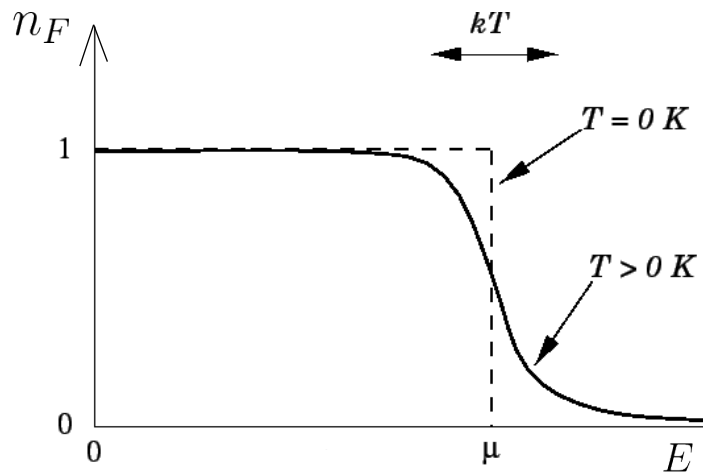
$$E = E_0 + \text{thermal contributions}$$

$$E = E_0 + E_T$$

$$E_T = \# \text{electrons} \times \epsilon_T$$

$$D(E_F) \times k_B T$$

$$k_B T$$



**Modelo de Sommerfeld:
Temperatura finita ($T \ll T_F$)**

Capacidade Térmica Eletrônica

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}$$

$$E = E_0 + \text{thermal contributions}$$

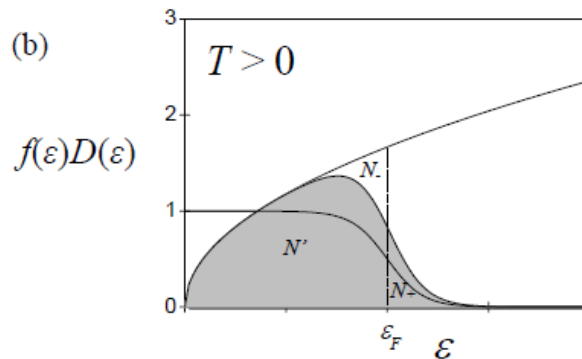
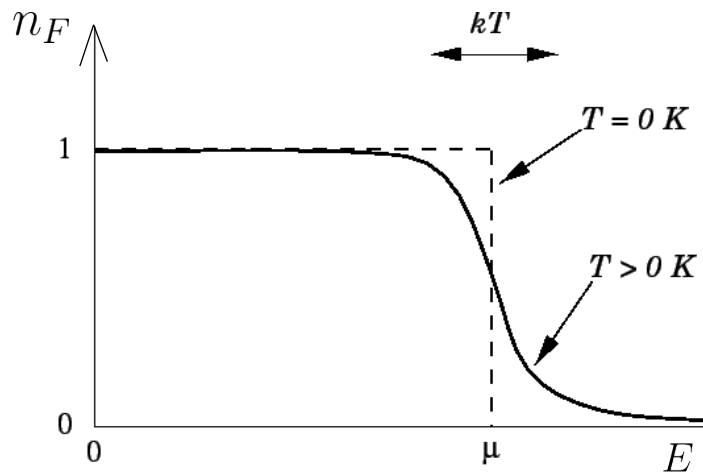
$$E = E_0 + E_T$$

$$E_T = \# \text{electrons} \times \epsilon_T$$

$$D(E_F) \times k_B T$$

$$k_B T$$

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = 2D(\epsilon_F)k_B^2 T = 3Nk_B \left(\frac{T}{T_F} \right)$$



Modelo de Sommerfeld:
Temperatura finita ($T \ll T_F$)

Capacidade Térmica Eletrônica

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}$$

$$E = E_0 + \text{thermal contributions}$$

$$E = E_0 + E_T$$

$$E_T = \# \text{electrons} \times \epsilon_T$$

$$D(E_F) \times k_B T$$

$$k_B T$$

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = 2D(\epsilon_F)k_B^2 T = 3Nk_B \left(\frac{T}{T_F} \right)$$

Notem que

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = 3Nk_B \left(\frac{T}{T_F} \right) \ll \frac{3}{2} Nk_B$$

O valor exato é:

$$C_{ele} = \frac{\pi^2}{3} D(\epsilon_F) k_B^2 T$$

Modelo de Sommerfeld:
Temperatura finita ($T \ll T_F$)

Capacidade Térmica Eletrônica

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}$$

$$E = E_0 + \text{thermal contributions}$$

$$E = E_0 + E_T$$

$$E_T = \# \text{electrons} \times \epsilon_T$$

$$D(E_F) \times k_B T$$

$$k_B T$$

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = 2D(\epsilon_F)k_B^2 T = 3Nk_B \left(\frac{T}{T_F} \right)$$

Notem que

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = 3Nk_B \left(\frac{T}{T_F} \right) \ll \frac{3}{2} Nk_B$$

O valor exato é:

$$C_{ele} = \frac{\pi^2}{3} D(\epsilon_F) k_B^2 T$$

Isso explica a dependência linear no calor específico de metais

$$C_{exp} = \gamma T + AT^3$$

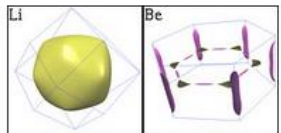
**Modelo de Sommerfeld:
Temperatura finita ($T \ll T_F$)**

$$C_{\text{exp}} = \gamma T + AT^3$$

Table 2.3

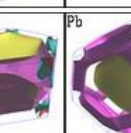
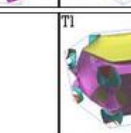
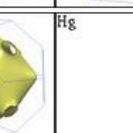
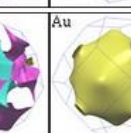
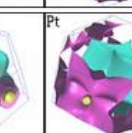
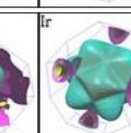
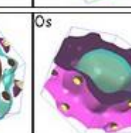
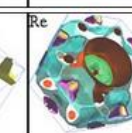
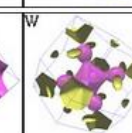
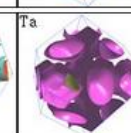
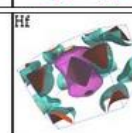
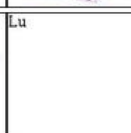
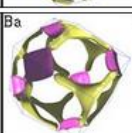
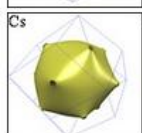
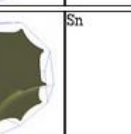
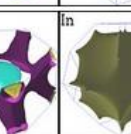
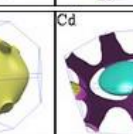
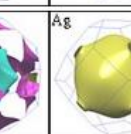
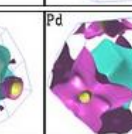
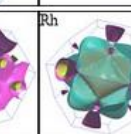
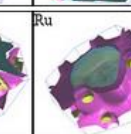
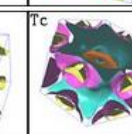
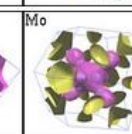
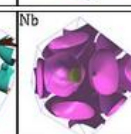
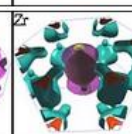
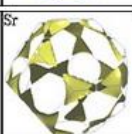
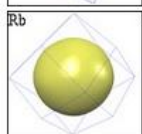
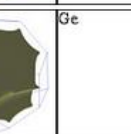
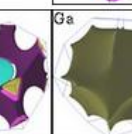
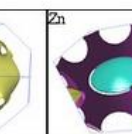
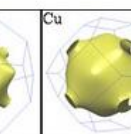
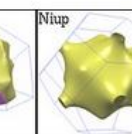
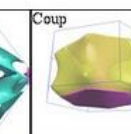
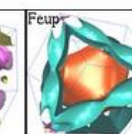
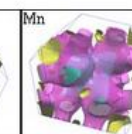
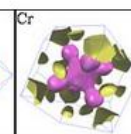
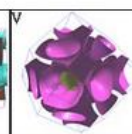
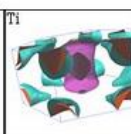
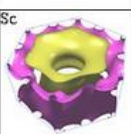
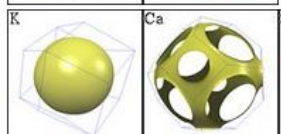
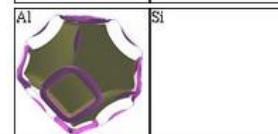
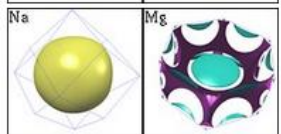
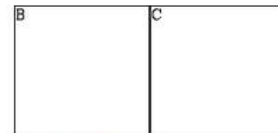
SOME ROUGH EXPERIMENTAL VALUES FOR THE COEFFICIENT OF THE LINEAR TERM IN T OF THE MOLAR SPECIFIC HEATS OF METALS, AND THE VALUES GIVEN BY SIMPLE FREE ELECTRON THEORY

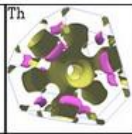
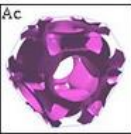
ELEMENT	FREE ELECTRON γ (in 10^{-4} cal-mole $^{-1}$ -K $^{-2}$)	MEASURED γ	RATIO ^a (m^*/m)
Li	1.8	4.2	2.3
Na	2.6	3.5	1.3
K	4.0	4.7	1.2
Rb	4.6	5.8	1.3
Cs	5.3	7.7	1.5
Cu	1.2	1.6	1.3
Ag	1.5	1.6	1.1
Au	1.5	1.6	1.1
Be	1.2	0.5	0.42
Mg	2.4	3.2	1.3
Ca	3.6	6.5	1.8
Sr	4.3	8.7	2.0
Ba	4.7	6.5	1.4
Nb	1.6	20	12
Fe	1.5	12	8.0
Mn	1.5	40	27
Zn	1.8	1.4	0.78
Cd	2.3	1.7	0.74
Hg	2.4	5.0	2.1
Al	2.2	3.0	1.4
Ga	2.4	1.5	0.62
In	2.9	4.3	1.5
Tl	3.1	3.5	1.1
Sn	3.3	4.4	1.3
Pb	3.6	7.0	1.9
Bi	4.3	0.2	0.047
Sb	3.9	1.5	0.38

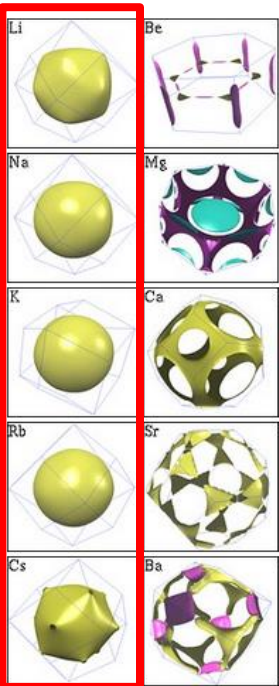


The Fermi Surface Database

(click icons)

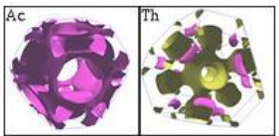
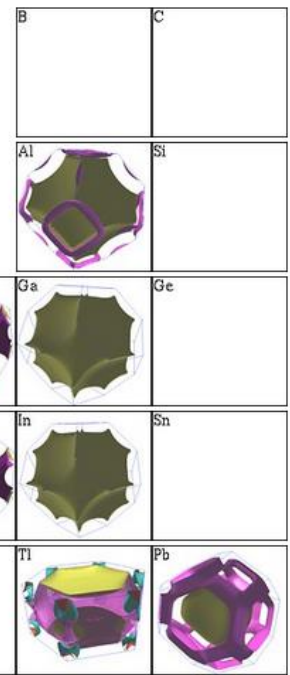




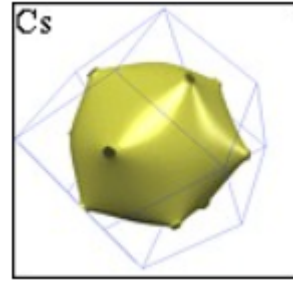
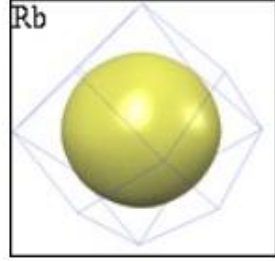
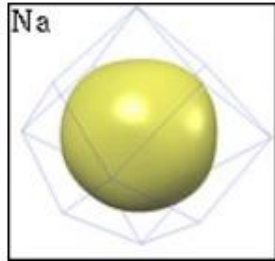
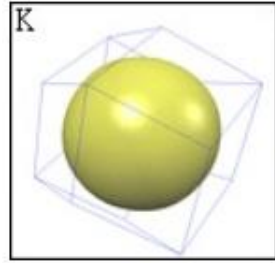
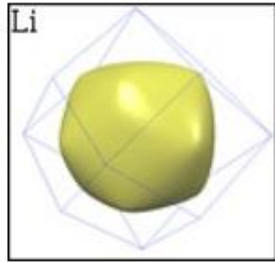


The Fermi Surface Database

(click icons)



<http://www.phys.ufl.edu/fermisurface/>



Pergunta: Por que a FS do Cs é ligeiramente diferente dos demais metais alcalinos?

**Modelo de Sommerfeld:
Temperatura finita ($T \ll T_F$)**

$$C_{\text{exp}} = \gamma T + AT^3$$

$\gamma \propto \left(\frac{m^*}{m}\right) \equiv$ Massa efetiva do portador

Table 2.3

SOME ROUGH EXPERIMENTAL VALUES FOR THE COEFFICIENT OF THE LINEAR TERM IN T OF THE MOLAR SPECIFIC HEATS OF METALS, AND THE VALUES GIVEN BY SIMPLE FREE ELECTRON THEORY

ELEMENT	FREE ELECTRON γ (in 10^{-4} cal-mole $^{-1}$ -K $^{-2}$)	MEASURED γ	RATIO ^a (m^*/m)
Li	1.8	4.2	2.3
Na	2.6	3.5	1.3
K	4.0	4.7	1.2
Rb	4.6	5.8	1.3
Cs	5.3	7.7	1.5
Cu	1.2	1.6	1.3
Ag	1.5	1.6	1.1
Au	1.5	1.6	1.1
Be	1.2	0.5	0.42
Mg	2.4	3.2	1.3
Ca	3.6	6.5	1.8
Sr	4.3	8.7	2.0
Ba	4.7	6.5	1.4
Nb	1.6	20	12
Fe	1.5	12	8.0
Mn	1.5	40	27
Zn	1.8	1.4	0.78
Cd	2.3	1.7	0.74
Hg	2.4	5.0	2.1
Al	2.2	3.0	1.4
Ga	2.4	1.5	0.62
In	2.9	4.3	1.5
Tl	3.1	3.5	1.1
Sn	3.3	4.4	1.3
Pb	3.6	7.0	1.9
Bi	4.3	0.2	0.047
Sb	3.9	1.5	0.38

**Modelo de Sommerfeld:
Temperatura finita ($T \ll T_F$)**

$$C_{\text{exp}} = \gamma T + AT^3$$

$$\gamma \propto \left(\frac{m^*}{m}\right) \equiv \text{Massa efetiva do portador}$$

Note que $\gamma \gg 1$ para alguns compostos!!
Em geral, compostos a base de lantanídeos e actinídeos apresentam ($\gamma \gg 1$) e, por isso, são chamados de *férmions pesados*.

Table 2.3
SOME ROUGH EXPERIMENTAL VALUES FOR THE COEFFICIENT OF THE LINEAR TERM IN T OF THE MOLAR SPECIFIC HEATS OF METALS, AND THE VALUES GIVEN BY SIMPLE FREE ELECTRON THEORY

ELEMENT	FREE ELECTRON γ (in 10^{-4} cal-mole $^{-1}$ -K $^{-2}$)	MEASURED γ	RATIO ^a (m^*/m)
Li	1.8	4.2	2.3
Na	2.6	3.5	1.3
K	4.0	4.7	1.2
Rb	4.6	5.8	1.3
Cs	5.3	7.7	1.5
Cu	1.2	1.6	1.3
Ag	1.5	1.6	1.1
Au	1.5	1.6	1.1
Be	1.2	0.5	0.42
Mg	2.4	3.2	1.3
Ca	3.6	6.5	1.8
Sr	4.3	8.7	2.0
Ba	4.7	6.5	1.4
Nb	1.6	20	12
Fe	1.5	12	8.0
Mn	1.5	40	27
Zn	1.8	1.4	0.78
Cd	2.3	1.7	0.74
Hg	2.4	5.0	2.1
Al	2.2	3.0	1.4
Ga	2.4	1.5	0.62
In	2.9	4.3	1.5
Tl	3.1	3.5	1.1
Sn	3.3	4.4	1.3
Pb	3.6	7.0	1.9
Bi	4.3	0.2	0.047
Sb	3.9	1.5	0.38