

## Física Teórica 3 – 1er. cuatrimestre de 2012

### Algunos problemas resueltos de la Guía 6

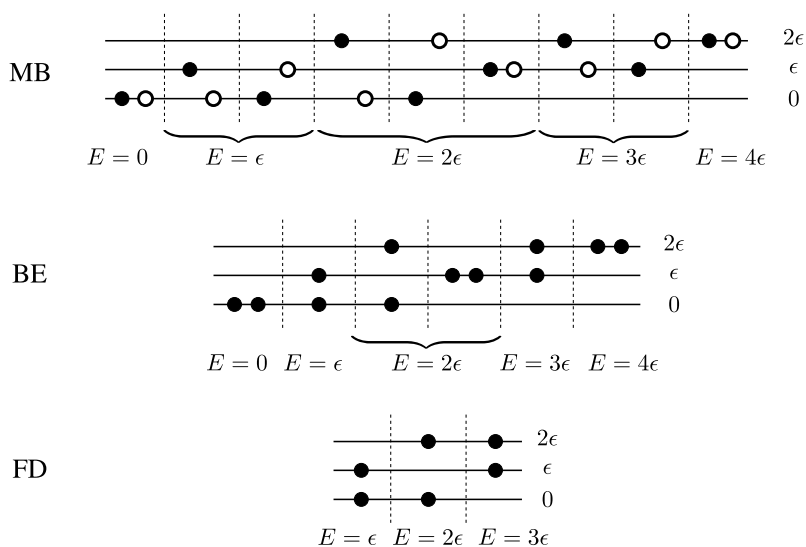
Problema 1 . . . . .	1
Problema 3 . . . . .	2
El paso de sumas a integrales . . . . .	7
Problema 4 . . . . .	9

### Problema 1

Considere un sistema formado por dos partículas que pueden estar en cualquiera de tres estados, con energías  $0, \epsilon$  y  $2\epsilon$ . El sistema está en contacto con un foco térmico a temperatura  $T$ .

- (a) Escriba una expresión para la función de partición  $Z$  si:
- i. las partículas obedecen a la estadística de Maxwell–Boltzmann y son distinguibles.
  - ii. las partículas obedecen a la estadística de Bose–Einstein.
  - iii. las partículas obedecen a la estadística de Fermi–Dirac.
- (b) Grafique la energía media en cada caso y compare.

■ **Solución.** En cada caso los estados del sistema de dos partículas están representados en la siguiente figura:



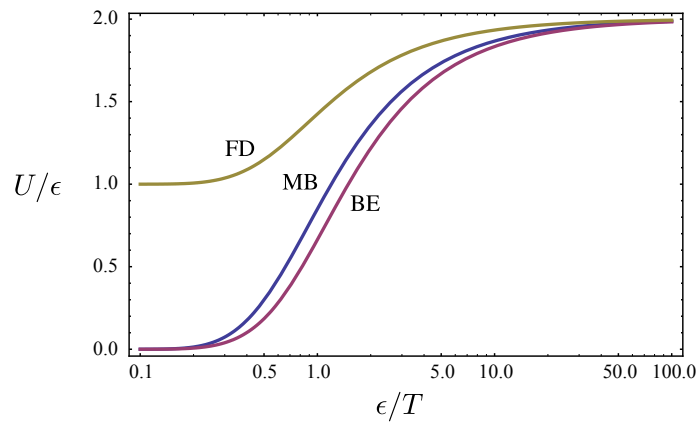
Llamando  $x = e^{-\beta\epsilon}$ , las funciones de partición son entonces:

$$Z_{\text{MB}} = \frac{1}{2!}(1 + 2x + 3x^2 + 2x^3 + x^4), \quad Z_{\text{BE}} = 1 + x + 2x^2 + x^3 + x^4, \quad Z_{\text{FD}} = x + x^2 + x^3.$$

La función de partición para la estadística de Maxwell–Boltzmann incluye por definición un factor  $1/N!$ .

Las energías medias son

$$U_{\text{MB}} = \frac{2x + 6x^2 + 6x^3 + 4x^4}{1 + 2x + 3x^2 + 2x^3 + x^4} \epsilon, \quad U_{\text{BE}} = \frac{x + 4x^2 + 3x^3 + 4x^4}{1 + x + 2x^2 + x^3 + x^4} \epsilon, \quad U_{\text{FD}} = \frac{x + 2x^2 + 3x^3}{x + x^2 + x^3} \epsilon.$$



### Problema 3

Para un gas ideal de  $N$  electrones en un volumen  $V$ :

- Calcular la energía de Fermi.
- Calcular la energía total  $U$  a  $T = 0$ .
- Muestre que para cualquier temperatura se cumple  $U = 3PV/2$ . Usando esta relación y lo hallado en (b), encuentre una expresión para la presión  $P$  a  $T = 0$ .

■ **Solución.** A modo de repaso, deduciremos las ecuaciones fundamentales y luego resolveremos lo que pide el problema. Todo empieza con la función de partición en el ensamble gran canónico para fermiones:

$$Z = \prod_i \sum_{n=0}^1 z^n e^{-n\beta\epsilon_i} = \prod_i (1 + ze^{-\beta\epsilon_i}).$$

La productoria es sobre todos los estados de una sola partícula. En el caso de un gas ideal, esos estados estarán caracterizados por cierto valor del impulso y un dado número de variables asociadas a los grados de libertad internos, como el espín. Supongamos para fijar ideas que hay un único grado de libertad interno, caracterizado por una variable discreta  $s$  que puede tomar  $g$  valores. Entonces

$$Z = \prod_{\mathbf{p}, s} [1 + ze^{-\beta\epsilon_s(\mathbf{p})}].$$

Si la energía no depende de  $s$ , para cada valor de  $\mathbf{p}$  habrá  $g$  factores idénticos,

$$Z = \prod_{\mathbf{p}} [1 + ze^{-\beta\epsilon(\mathbf{p})}]^g.$$

En el caso general el logaritmo de  $Z$  queda en términos de una suma

$$\log Z = \sum_{s=1}^g \sum_{\mathbf{p}} \log [1 + ze^{-\beta\epsilon_s(\mathbf{p})}].$$

Al hacer tender  $V$  a infinito, la suma sobre  $\mathbf{p}$  puede reemplazarse por una integral. Hay varias maneras de plantearlo, pero el resultado termina siendo el que se ha usado ya para gases ideales clásicos,

$$\sum_{\mathbf{p}} \rightarrow V \int \frac{d^3p}{h^3}.$$

Al final del ejercicio agregaremos una breve nota sobre cómo formalizar este paso. Entonces queda

$$\log Z = \frac{V}{h^3} \sum_{s=1}^g \int d^3p \log [1 + ze^{-\beta\epsilon_s(\mathbf{p})}].$$

Si la energía no depende de  $s$ , resulta

$$\log Z = \frac{gV}{h^3} \int d^3p \log [1 + ze^{-\beta\epsilon(\mathbf{p})}]. \quad (1)$$

El número de partículas y la energía se calculan a partir de las derivadas del logaritmo de  $Z$ ,

$$N = z \frac{\partial \log Z}{\partial z} = \frac{V}{h^3} \sum_{s=1}^g \int d^3p \frac{1}{1 + \exp \{\beta [\epsilon_s(\mathbf{p}) - \mu]\}},$$

$$U = -\frac{\partial \log Z}{\partial \beta} = \frac{V}{h^3} \sum_{s=1}^g \int d^3p \frac{\epsilon_s(\mathbf{p})}{1 + \exp \{\beta [\epsilon_s(\mathbf{p}) - \mu]\}}.$$

Por otro lado, si en la Ec. (1) se integra por partes, usando la relación

$$\int d^3p f(\mathbf{p}) = \frac{1}{3} \int d^3p [\nabla \cdot (f\mathbf{p}) - \mathbf{p} \cdot \nabla f],$$

y descartando el término de superficie, resulta

$$\log Z = \frac{\beta V}{3h^3} \sum_{s=1}^g \int d^3p \frac{\mathbf{p} \cdot \nabla \epsilon_s(\mathbf{p})}{1 + \exp \{\beta [\epsilon_s(\mathbf{p}) - \mu]\}}.$$

Un conjunto de resultados interesantes se obtienen si  $\epsilon_s(\mathbf{p}) = \alpha_s p^w$ . Por ejemplo,

$$\log Z = \frac{\beta V}{3h^3} \sum_{s=1}^g \int d^3p \frac{w\epsilon_s(\mathbf{p})}{1 + \exp \{\beta [\epsilon_s(\mathbf{p}) - \mu]\}} = \frac{w\beta U}{3}.$$

Pero puesto que  $\log Z = \beta PV$ , se obtiene

$$PV = \frac{wU}{3}.$$

Así, por ejemplo, para un gas de partículas no relativistas  $\epsilon_s(\mathbf{p}) = p^2/(2m)$  y

$$PV = \frac{2U}{3}.$$

En cambio, para partículas ultrarrelativistas  $\epsilon_s(\mathbf{p}) = cp$  y

$$PV = \frac{U}{3}.$$

Éstas son las mismas relaciones que valen para un gas de partículas clásicas. Es inmediato generalizar a  $d$  dimensiones. Para  $\epsilon_s(\mathbf{p}) = \alpha_s p^w$  queda

$$PV = \frac{wU}{d}, \quad (2)$$

donde

$$U = \frac{V}{h^d} \sum_{s=1}^g \int d^d p \frac{\epsilon_s(\mathbf{p})}{1 + \exp\{\beta[\epsilon_s(\mathbf{p}) - \mu]\}}.$$

Volviendo al problema de la guía. Para hacerlo más interesante dejemos sin especificar la dimensión  $d$  del espacio. La energía de Fermi es el potencial químico a  $T = 0$ . En general, el potencial químico se calcula en términos de  $N/V$  y  $T$  a partir de la ecuación que da el número medio de partículas,

$$N = \frac{gV}{h^d} \int d^d p \frac{1}{1 + \exp\{\beta[\epsilon(\mathbf{p}) - \mu]\}}.$$

Aquí hemos supuesto que la energía no depende de los grados de libertad internos, por eso aparece el factor  $g$ . A temperatura igual a cero, el integrando toma la forma de un escalón,

$$\frac{1}{1 + \exp\{\beta[\epsilon(\mathbf{p}) - \mu]\}} \rightarrow \Theta[\epsilon_F - \epsilon(\mathbf{p})].$$

Si la energía depende sólo del módulo del impulso la integración puede hacerse en esféricas, integrando explícitamente sobre las variables angulares. La integral sobre el módulo de  $\mathbf{p}$  está acotada por la condición

$$\epsilon(p) < \epsilon_F.$$

Se define  $p_F$  como el impulso tal que  $\epsilon(p_F) = \epsilon_F$ . Con esto resulta

$$\frac{N}{V} = \frac{g\Omega_d}{h^d} \int_0^{p_F} dp p^{d-1} = \frac{g\Omega_d}{h^d d} p_F^d. \quad (3)$$

Supongamos en particular que  $\epsilon(p) = \alpha p^w$ , lo que incluye los casos clásico y ultrarrelativista. La relación entre  $p_F$  y  $\epsilon_F$  es simplemente

$$p_F = \left(\frac{\epsilon_F}{\alpha}\right)^{1/w}.$$

Así podemos despejar  $\epsilon_F$  a partir de la Ec. (3):

$$\epsilon_F = \alpha h^w \left( \frac{dN}{g\Omega_d V} \right)^{w/d}.$$

En el caso clásico  $\alpha = (2m)^{-1}$  y  $w = 2$ ; entonces

$$\epsilon_F = \frac{h^2}{2m} \left( \frac{dN}{g\Omega_d V} \right)^{2/d}.$$

En particular, en 2 y 3 dimensiones para partículas de espín 1/2 ( $g = 2$ ) resulta

$$\epsilon_F^{(3D)} = \frac{h^2}{2m} \left( \frac{3N}{8\pi V} \right)^{2/3}, \quad \epsilon_F^{(2D)} = \frac{h^2}{2m} \frac{N}{2\pi V}.$$

Si los fermiones son ultrarrelativistas es  $\epsilon(\mathbf{p}) = cp$ , y resulta

$$\epsilon_F^{(3D)} = ch \left( \frac{3N}{8\pi V} \right)^{1/3}, \quad \epsilon_F^{(2D)} = ch \left( \frac{N}{2\pi V} \right)^{1/2}.$$

De manera similar se calcula la energía a  $T = 0$ ,

$$\frac{U}{V} = \frac{g\Omega_d V}{h^d} \int_0^{p_F} dp p^{d-1} \epsilon(\mathbf{p}) = \frac{g\Omega_d}{h^d} \frac{\alpha p_F^{d+w}}{(d+w)}.$$

Dividiendo esta ecuación por la Ec. (3) se obtiene un resultado sencillo para la energía por partícula en términos de la energía de Fermi,

$$\frac{U}{N} = \frac{d\alpha p_F^w}{d+w} = \frac{d}{d+w} \epsilon_F.$$

En particular, en 3 dimensiones para el gas no relativista resulta

$$\frac{U}{N} = \frac{3}{5} \epsilon_F.$$

En tanto que para el gas de fermiones ultrarrelativistas queda

$$\frac{U}{N} = \frac{3}{4} \epsilon_F.$$

Mediante la Ec. (2) se puede calcular la presión a  $T = 0$  a partir de la energía,

$$PV = \frac{w}{d+w} N \epsilon_F.$$

Cuando la energía es función únicamente del módulo del impulso (y acaso de los grados de libertad internos) es usual escribir las integrales anteriores cambiando la variable de integración  $p$  por  $\epsilon$ . En particular, cuando uno calcula las cosas en  $T = 0$ , esta sustitución deja todos los resultados ya expresados en términos de la energía de Fermi. Sin embargo no siempre resulta ventajoso hacer el cambio de variables, a veces es

menos trabajo seguir haciendo todo en términos del impulso. Uno está interesado en calcular integrales de la forma

$$I = \frac{gV}{h^d} \int d^d p F[\epsilon(p)], \quad (4)$$

donde  $F$  depende de  $p$  a través de la energía. En esta integral  $gV d^d p/h^d$  es igual al número de estados de una sola partícula en el elemento de volumen  $d^d p$ . Aquí estamos suponiendo que la energía no depende de los grados de libertad internos, de ahí que aparezca el factor  $g$ . Puesto que  $F$  depende sólo de la energía, el objetivo es transformar la integral anterior a algo de la forma

$$I = \int d\epsilon D(\epsilon) F(\epsilon),$$

donde ahora  $D(\epsilon)d\epsilon$  representa el número de estados de una sola partícula contenidos en el intervalo de energías  $d\epsilon$ .

La integración angular en (4) se puede hacer de manera inmediata,

$$I = \frac{g\Omega_d V}{h^d} \int_0^\infty dp p^{d-1} F[\epsilon(p)].$$

Supongamos, como antes, que  $\epsilon(p) = \alpha p^w$ , entonces

$$p^{d-1} dp = \frac{1}{d} dp^d = \frac{1}{w\alpha^{\frac{d}{w}}} \epsilon^{\frac{d}{w}-1} d\epsilon.$$

Luego,

$$I = \frac{g\Omega_d V}{w\alpha^{\frac{d}{w}} h^d} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{\frac{d}{w}-1} F(\epsilon) = \int_0^\infty d\epsilon D(\epsilon) F(\epsilon),$$

donde

$$D(\epsilon) = \frac{g\Omega_d V}{w\alpha^{\frac{d}{w}} h^d} \epsilon^{\frac{d}{w}-1}.$$

Por ejemplo, en  $d = 3$  y con  $\epsilon = p^2/2m$ , es

$$D(\epsilon) = \frac{2gV\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \epsilon^{1/2}.$$

Así, por ejemplo, uno puede calcular el número medio de partículas y la energía a  $T = 0$  como

$$\frac{N}{V} = \frac{2g\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \epsilon^{1/2} = \frac{8}{3}\pi(2m)^{3/2} \epsilon_F^{3/2},$$

$$\frac{U}{V} = \frac{2g\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \epsilon^{3/2} = \frac{8}{5}\pi(2m)^{3/2} \epsilon_F^{5/2}.$$

El cociente entre ambas densidades da, igual que antes,

$$\frac{U}{N} = \frac{3}{5} \epsilon_F.$$

Para temperaturas distintas de cero quedan las siguientes integrales

$$\frac{N}{V} = \frac{2g\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{1/2}}{1 + z^{-1}e^{\beta\epsilon}},$$

$$\frac{U}{V} = \frac{2g\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{3/2}}{1 + z^{-1}e^{\beta\epsilon}}.$$

Integrales similares aparecen con frecuencia, así que se definen de un modo convencional como

$$f_\nu(z) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty \frac{x^{\nu-1}}{1 + z^{-1}e^x}. \quad (5)$$

Entonces, por ejemplo,

$$\frac{N}{V} = \frac{2g\pi\Gamma(\frac{3}{2})(2mkT)^{3/2}}{h^3} f_{3/2}(z),$$

$$\frac{U}{V} = \frac{2g\pi\Gamma(\frac{3}{2})(2mkT)^{3/2}}{h^3} kT f_{5/2}(z).$$

En términos de la longitud de onda térmica

$$\lambda = \left( \frac{h^2}{2\pi mkT} \right)^{1/2},$$

y usando que  $\Gamma(\frac{1}{2}) = \pi^{1/2}$ , resulta

$$\frac{N}{V} = \frac{g}{\lambda^3} f_{3/2}(z),$$

$$\frac{U}{V} = \frac{3}{2} \frac{g}{\lambda^3} kT f_{5/2}(z).$$

A partir de la relación  $U = \frac{3}{2}PV$ , combinando las dos ecuaciones anteriores se obtiene

$$PV = NkT \frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}(z)}.$$

### El paso de sumas a integrales

El asunto es ver cómo pasar de sumas a integrales  $\sum_{\mathbf{p}} \rightarrow V \int \frac{d^3p}{h^3}$ . Formalmente uno debería escribir el espectro discreto de energías y ver qué sucede al tomar  $V \rightarrow \infty$ . Para una partícula en una caja cúbica, el espectro depende de las condiciones de contorno. La ecuación de onda es

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + E\psi = 0.$$

Si las condiciones de borde son que la función de onda se anule en las paredes de la caja conviene hacer que un vértice de la caja coincida con el origen y que cada lado se extienda sobre uno de los ejes entre 0 y  $L$ . Entonces las soluciones son de la forma

$$\psi_{n_x, n_y, n_z}(\mathbf{r}) \propto \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L}\right) \sin\left(\frac{n_z \pi z}{L}\right),$$

con

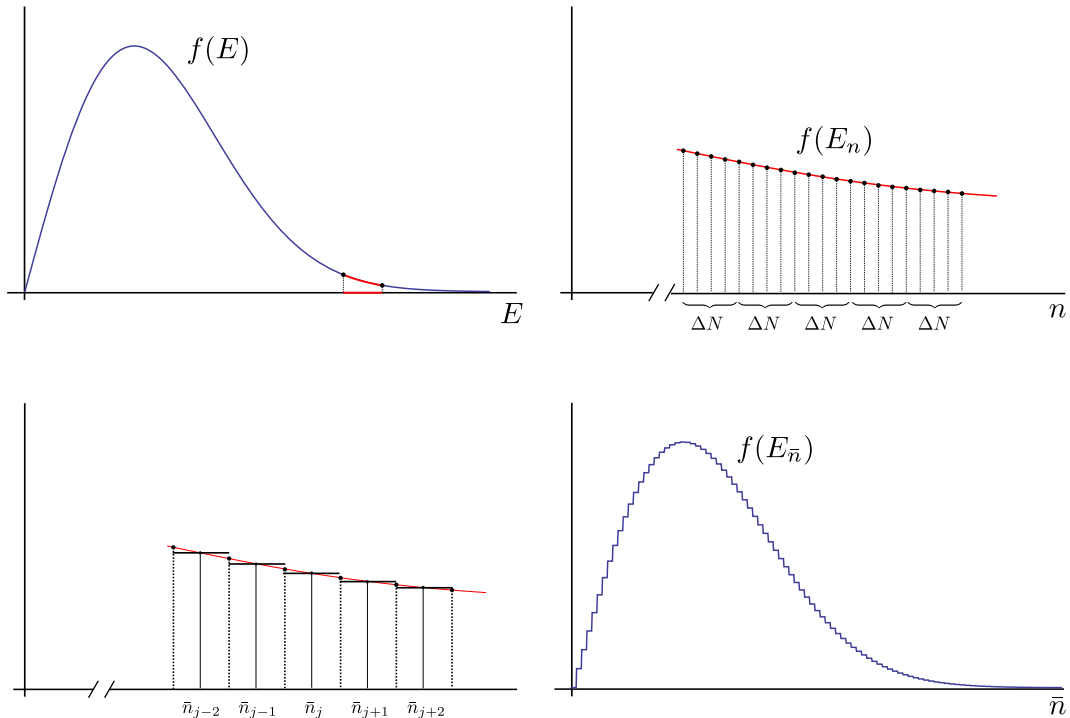
$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{h^2}{8mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2), \quad n_i = 1, 2, \dots$$

Al calcular el  $\log Z$  uno debería escribir una suma sobre estos estados. En general, para una función cualquiera de la energía tendríamos que escribir algo de la forma

$$S(f) = \sum_{n_x, n_y, n_z=1}^{\infty} f(E_{n_x, n_y, n_z})$$

A medida que  $L$  aumenta, la diferencia entre dos energías consecutivas disminuye como  $1/L^2$ . Así, los  $n_i$  pueden variar dentro de un rango cada vez más grande sin que la energía cambie apreciablemente. Uno puede agrupar los  $n_i$  como muestra la figura, considerar que en cada intervalo la energía toma un valor aproximadamente constante  $E_{\bar{n}_x, \bar{n}_y, \bar{n}_z}$ , sumar todos juntos los  $n_i$  en cada intervalo y simplemente incluir un factor  $\Delta N = \Delta n_x \Delta n_y \Delta n_z$  para tener en cuenta que hay ese número de términos en la suma original asociados a ese rango de valores de los  $n_i$ ,

$$S(f) \approx \sum_{\bar{n}_x, \bar{n}_y, \bar{n}_z} f(E_{\bar{n}_x, \bar{n}_y, \bar{n}_z}) \Delta N.$$





Ahora se define la variable

$$\mathbf{p} = \frac{h}{2L} (n_x \hat{x} + n_y \hat{y} + n_z \hat{z}),$$

en términos de la cual la energía es

$$E_{p_x, p_y, p_z} = \frac{p^2}{2m}.$$

Se ve entonces que

$$\Delta N = \frac{8V}{h^3} \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z.$$

Luego

$$S(f) \approx \frac{8V}{h^3} \sum_{\bar{p}_x, \bar{p}_y, \bar{p}_z} f(E_{\bar{p}_x, \bar{p}_y, \bar{p}_z}) \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z.$$

Aunque los  $n_i$  varían a saltos de una unidad, cada variable  $p_i$  toma valores que se agrupan de manera cada vez más densa a medida que aumenta  $L$ , de manera que llega un punto en que  $\Delta p_i$  es tan pequeño que la suma puede aproximarse por una integral con tanta precisión como se desee. En definitiva, cuando  $L \rightarrow \infty$ ,

$$S(f) = \frac{8V}{h^3} \int_0^\infty dp_x \int_0^\infty dp_y \int_0^\infty dp_z f(E).$$

Aquí los límites de integración son los que corresponden al intervalo original de variación de los  $n_i$ , que incluía sólo los enteros mayores que cero. Para dar a esta expresión su forma habitual, uno puede notar que las tres integrales pueden extenderse hasta menos infinito y que por paridad entonces debe incluirse un factor  $\frac{1}{2}$  por cada una de ellas. Finalmente, resulta:

$$S(f) = \frac{V}{h^3} \int d^3p f(E).$$

Un análisis similar puede hacerse si las condiciones en el borde de la caja se eligen periódicas en lugar de homogéneas. El análisis es un poco más complicado, debido a que se tienen dos familias de soluciones, cosenos y senos, pero en esencia son los mismos pasos.

Esto muestra cómo pasar de una suma a una integral en el caso de partículas clásicas con energía  $p^2/2m$ . La regla puede extenderse a partículas relativistas y energías que dependen de la posición. En general es

$$\sum_{\text{estados}} \rightarrow \int \frac{d^3q d^3p}{h^3}.$$

## Problema 4

Sea un gas de electrones en dos dimensiones sobre un área  $A$ .

- (a) Halle una expresión para  $PV/kT$  en función de la temperatura y el potencial químico.

(b) Halle la energía de Fermi en términos del número medio de partículas a temperatura cero.

(c) Muestre que el potencial químico viene dado, como función de la temperatura, por:

$$\mu(T) = \epsilon_F \left\{ 1 + \frac{1}{\beta \epsilon_F} \ln (1 - e^{-\beta \epsilon_F}) \right\}.$$

(d) Calcule el calor específico si el gas está altamente degenerado y muestre que es proporcional a  $T$ .

■ **Solución.** (a) Para el primer punto basta con calcular la función de partición,

$$\beta PV = \log Z = \frac{gA}{h^2} \int d^2p \log [1 + ze^{-\beta \epsilon(p)}].$$

La energía es  $\epsilon(p) = p^2/(2m)$ . Esto ya lo hemos calculado de manera general en el problema anterior. Repetimos aquí los pasos fundamentales: primero se escribe la integral en polares y luego se integra por partes respecto del módulo del impulso,

$$\log Z = \frac{gA}{h^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty dp p \log [1 + ze^{-\beta \epsilon(p)}] = \frac{2\pi gA\beta}{h^2} \int_0^\infty dp \frac{p^3}{2m} \frac{ze^{-\beta \epsilon(p)}}{1 + ze^{-\beta \epsilon(p)}}.$$

Es posible formar el diferencial de  $\epsilon$  y cambiar a esa variable. Reordenando un poco los términos queda

$$\log Z = \frac{2\pi gAm\beta}{h^2} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon}{1 + z^{-1}e^{\beta \epsilon}}.$$

Por último, definiendo  $x = \beta \epsilon$ , la dependencia en la temperatura puede hacerse más explícita

$$\log Z = \frac{2\pi gAm kT}{h^2} \int_0^\infty dx \frac{x}{1 + z^{-1}e^x}. \quad (6)$$

Con esto ya puede escribirse la respuesta al primer punto del problema:

$$\beta PV = \frac{2\pi gAmkT}{h^2} \int_0^\infty dx \frac{x}{1 + z^{-1}e^x} = \frac{2\pi gAmkT}{h^2} f_2(z).$$

Las funciones  $f_\nu$  quedaron definidas en la Ec. (5).

(b) A temperatura cero

$$\frac{N}{A} = \frac{2\pi g}{h^2} \int_0^{p_F} dp p = \frac{2\pi g p_F^2}{2h^2} = \frac{2\pi g m \epsilon_F}{h^2} \Rightarrow \epsilon_F = \frac{h^2}{2\pi g m} \frac{N}{A}.$$

(c) Para calcular el potencial químico se parte de la ecuación que da el número de partículas

$$\frac{N}{A} = \frac{g}{h^2} \int d^2p \frac{1}{1 + z^{-1}e^{-\beta \epsilon(p)}}.$$

La integral puede hacerse de manera explícita en un par de pasos,

$$\begin{aligned} \frac{N}{A} &= \frac{2\pi gm}{h^2} \int_0^\infty d\left(\frac{p^2}{2m}\right) \frac{1}{1+z^{-1}e^{-\beta\epsilon(p)}} = \frac{2\pi gm}{h^2} \int_0^\infty \frac{d\epsilon}{1+z^{-1}e^{\beta\epsilon}} \\ &= \frac{NkTz}{A\epsilon_F} \int_0^1 \frac{d(e^{-\beta\epsilon})}{1+ze^{-\beta\epsilon}} = \frac{NkT}{A\epsilon_F} \log(1+z). \end{aligned}$$

Entonces

$$\epsilon_F = kT \log(1 + e^{\beta\mu}).$$

Invirtiendo,

$$\mu = kT \log(e^{\beta\epsilon_F} - 1). \quad (7)$$

Puesto que interesa ver qué tanto se aparta  $\mu$  de la energía de Fermi conviene reescribir la ecuación anterior como

$$\mu = \epsilon_F + kT \log(1 - e^{-\beta\epsilon_F}).$$

A temperaturas mucho menores que la energía de Fermi, la exponencial dentro del logaritmo es un número muy pequeño, por lo tanto resulta

$$\mu \approx \epsilon_F - kT e^{-\beta\epsilon_F}.$$

Es decir, a bajas temperaturas las correcciones al potencial químico respecto de la energía de Fermi son exponencialmente pequeñas. En contraste, en tres dimensiones las correcciones al potencial químico van como  $T^2$ .

(d) Calcularemos el calor específico a área constante,

$$C_A = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_{A,N}.$$

La energía puede obtenerse a partir de  $Z$ , tal como quedó escrita en la Ec. (6),

$$U = -\frac{\partial \log Z}{\partial \beta} = \frac{2\pi gAm (kT)^2}{h^2} \int_0^\infty dx \frac{x}{1+z^{-1}e^x} = \frac{2\pi gAm (kT)^2}{h^2} f_2(z) = \frac{N(kT)^2}{\epsilon_F} f_2(z). \quad (8)$$

Luego

$$C_A = \frac{2U}{T} + \frac{U}{f_2(z)} f_2'(z) \left( \frac{\partial z}{\partial T} \right)_{A,N}.$$

De acuerdo a la Ec. (7)

$$z = e^{\beta\epsilon_F} - 1,$$

y por lo tanto

$$\left(\frac{\partial z}{\partial T}\right)_{A,N} = -\frac{\epsilon_F e^{\beta\epsilon_F}}{kT^2} = -\frac{1}{T}(1+z)\log(1+z).$$

La energía de Fermi es función de la densidad  $N/A$ , de modo que no es necesario derivarla. Por otro lado, no es difícil demostrar que  $f'_\nu = z^{-1}f_{\nu-1}$ , y además

$$f_1(z) = \int_0^\infty \frac{dx}{1+z^{-1}e^x} = \log(1+z).$$

Reuniendo todo resulta

$$\begin{aligned} \frac{C_A}{Nk} &= \frac{U}{NkT} \left\{ 2 - \frac{(1+z)}{kT} \frac{[\log(1+z)]^2}{zf_2(z)} \right\} = \frac{kT}{\epsilon_F} \left\{ 2f_2(z) - \frac{(1+z)}{kT} \frac{[\log(1+z)]^2}{z} \right\} \\ &= \frac{2f_2(z)}{\log(1+z)} - \frac{(1+z)}{z} \log(1+z). \end{aligned}$$

Se trata de analizar ahora el comportamiento de esta función cuando  $T \rightarrow 0$ , es decir, cuando  $z \rightarrow \infty$ . Las funciones  $f_\nu(e^\xi)$  admiten un desarrollo asintótico para  $\xi \rightarrow \infty$ , de la forma

$$f_\nu(e^\xi) = \frac{\xi^\nu}{\Gamma(\nu+1)} + \frac{(\nu-1)\pi^2}{\Gamma(\nu)} \frac{\xi^{\nu-2}}{6} + \mathcal{O}(\xi^{\nu-4}).$$

Aplicando este resultado en la expresión para el calor específico y desarrollando el resto de las funciones que ahí aparecen queda

$$\frac{C_A}{Nk} \approx \frac{\pi^2 kT}{3 \mu}.$$

Al escribir esta ecuación se han despreciado varios términos de orden  $e^{-\beta\mu}$ . El propio potencial químico difiere de  $\epsilon_F$  en una cantidad exponencialmente pequeña. Por lo tanto

$$\frac{C_A}{Nk} \approx \frac{\pi^2 kT}{3 \epsilon_F}.$$

A este mismo resultado puede llegarse de manera más rápida a partir de la Ec. (8), desarrollando la energía para  $T \rightarrow 0$  antes de hacer el cálculo del calor específico. Así, uno encuentra

$$\frac{U}{Nk} \approx \frac{kT^2}{\epsilon_F} \left[ \frac{(\beta\mu)^2}{2} + \frac{\pi^2}{6} \right] = \frac{\epsilon_F}{2k} + \frac{kT^2\pi^2}{6\epsilon_F}.$$

Entonces resulta

$$\frac{C_A}{Nk} \approx \frac{\pi^2 kT}{3\epsilon_F}.$$

No es tremendamente complicado calcular las correcciones exponenciales. Hasta orden  $e^{-2\beta\epsilon_F}$  es

$$\frac{C_A}{Nk} \approx \frac{\pi^2 kT}{3\epsilon_F} - e^{-\beta\epsilon_F} \left( \frac{\epsilon_F}{kT} + 2 + \frac{2kT}{\epsilon_F} \right) - e^{-2\beta\epsilon_F} \left( \frac{\epsilon_F}{kT} + 1 + \frac{kT}{2\epsilon_F} \right).$$

La figura muestra el resultado exacto (en rojo) y las aproximaciones anteriores, con un número creciente de términos. Notar que para altas temperaturas el calor específico tiende a  $Nk$ , de acuerdo al principio de equipartición.

