Física Teórica 3 – segundo cuatrimestre de 2023

Guía 6: gas de Fermi ideal*

Fermiones y bosones

Consideremos un sistema de partículas idénticas no interactuantes. Los autoestados de una partícula estarán caracterizados por un índice ℓ y una energía ϵ_{ℓ} . Supondremos que el espectro es discreto. El índice ℓ puede tener varias componentes. Así, para una partícula de espín cero en una caja, tres enteros especifican el estado. Tratándose de partículas idénticas no interactuantes, lo importante es que el estado del sistema queda determinado por la población {n_ℓ} de partículas en cada autoestado de una partícula,

$$\sum_{\text{estados}} = \sum_{\{\mathbf{n}_{\ell}\}}.$$
 (1)

Si las partículas son fermiones, cada n_ℓ puede tomar únicamente los valores cero y uno. En cambio, si las partículas son bosones, cada n_ℓ puede tomar todos los valores enteros entre cero e infinito. La función de partición en el ensamble gran canónico será

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{\mathbf{n}_{\ell}\}} z^{\sum_{\ell} \mathbf{n}_{\ell}} \ e^{-\beta \sum_{\ell} \mathbf{n}_{\ell} \epsilon_{\ell}} = \prod_{\ell} \sum_{\mathbf{n}_{\ell}} \left(z e^{-\beta \epsilon_{\ell}} \right)^{\mathbf{n}_{\ell}}.$$
 (2)

El objeto fundamental no es la función de partición, sino su logaritmo. Eso es muy conveniente, porque al tomar el logaritmo la productoria se transforma en una suma:

$$\log \mathcal{Z} = \sum_{\ell} \log \left[\sum_{n_{\ell}} \left(z e^{-\beta \epsilon_{\ell}} \right)^{n_{\ell}} \right].$$
(3)

Si las partículas son fermiones,

$$\log \mathcal{Z} = \sum_{\ell} \log \left[\sum_{n_{\ell}=0}^{1} \left(z e^{-\beta \, \epsilon_{\ell}} \right)^{n_{\ell}} \right] = \sum_{\ell} \log \left(1 + z e^{-\beta \, \epsilon_{\ell}} \right). \tag{4}$$

Si son bosones,

$$\log \mathcal{Z} = \sum_{\ell} \log \left[\sum_{n_{\ell}=0}^{\infty} \left(z e^{-\beta \, \epsilon_{\ell}} \right)^{n_{\ell}} \right] = -\sum_{\ell} \log \left(1 - z e^{-\beta \, \epsilon_{\ell}} \right).$$
(5)

Estas expresiones son útiles para formular algunos resultados generales. Por ejemplo, el número medio de partículas,

$$N = z \frac{\partial \log \mathcal{Z}}{\partial z},\tag{6}$$

se escribe, según el caso, como

$$N = \sum_{\ell} \frac{1}{1 + z^{-1} e^{\beta \epsilon_{\ell}}}, \qquad N = \sum_{\ell} \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \epsilon_{\ell}} - 1}.$$
(7)

^{*}zanellaj@df.uba.ar

Cada término en estas sumas es el valor medio del número de ocupación del estado l,

$$N = \sum_{\ell} n(\epsilon_{\ell}).$$
(8)

Existen expresiones análogas para la energía. A partir de la relación

$$\mathsf{E} = -\frac{\partial \log \mathcal{Z}}{\partial \beta},\tag{9}$$

encontramos, para fermiones y bosones, respectivamente,

$$\mathsf{E} = \sum_{\ell} \frac{\epsilon_{\ell}}{1 + z^{-1} e^{\beta \epsilon_{\ell}}}, \qquad \mathsf{E} = \sum_{\ell} \frac{\epsilon_{\ell}}{z^{-1} e^{\beta \epsilon_{\ell}} - 1}. \tag{10}$$

La interpretación de estas expresiones es clara cuando se las escribe en términos de los números medios de ocupación. Indistintamente de si son fermiones o bosones,

$$\mathsf{E} = \sum_{\boldsymbol{\ell}} \epsilon_{\boldsymbol{\ell}} \mathfrak{n}(\epsilon_{\boldsymbol{\ell}}). \tag{11}$$

Partículas en una caja

A partir de ahora supondremos que las partículas están en una caja cúbica de lado L y que las condiciones de contorno para la función de onda de los estados de una partícula son periódicas. Cada estado de una partícula puede identificarse con una terna de números enteros, n_x , n_y y n_z , y por la proyección s_z del espín. Definamos el vector

$$\mathbf{n} = \mathbf{n}_{\mathbf{x}}\hat{\mathbf{x}} + \mathbf{n}_{\mathbf{y}}\hat{\mathbf{y}} + \mathbf{n}_{z}\hat{z}, \qquad \mathbf{n}_{\mathbf{i}} \in \mathbb{Z}.$$
(12)

La energía es

$$\epsilon_{\mathbf{n}} = \frac{\mathbf{h}^2 |\mathbf{n}|^2}{2\mathbf{m}\mathbf{L}^2}.\tag{13}$$

En casos más generales, la energía puede depender de la proyección del espín. Luego,

$$\log \mathcal{Z} = \pm \sum_{s_z = -s}^{s} \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} \log \left[1 \pm z \exp\left(-\frac{\beta h^2 |\mathbf{n}|^2}{2mL^2}\right) \right].$$
(14)

El signo positivo es para los fermiones y el negativo para los bosones. La suma sobre s_z sólo aporta un factor g = 2s + 1, donde s es el espín de las partículas,

$$\log \mathcal{Z} = \pm g \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} \log \left[1 \pm z \exp\left(-\frac{\beta h^2 |\mathbf{n}|^2}{2mL^2}\right) \right].$$
(15)

Sin especificar aún si las partículas son fermiones o bosones, podemos obtener una relación entre la presión y la energía. El logaritmo de la función de partición depende de β y del volumen sólo a través de la combinación $\beta V^{-2/3}$. Omitiendo la dependencia en *z*,

$$\log \mathcal{Z} = f(\beta V^{-2/3}). \tag{16}$$

De esta manera, las derivadas del logaritmo de la función de partición respecto de β y del volumen estarán relacionadas. En general, debido a que $\Omega = -kT \log \mathcal{Z}$ y

$$d\Omega = -SdT - PdV - Nd\mu, \tag{17}$$

resulta

$$P = kT \frac{\partial \log \mathcal{Z}}{\partial V} = -\frac{2}{3V^{5/3}} f'(\beta V^{-2/3}).$$
(18)

Pero, por otro lado,

$$\mathsf{E} = -\frac{\partial \log \mathcal{Z}}{\partial \beta} = -\frac{1}{V^{2/3}} \mathsf{f}' \big(\beta V^{-2/3}\big) \,. \tag{19}$$

Comparando las dos expresiones, vemos que

$$\mathsf{P} = \frac{2}{3} \frac{\mathsf{E}}{\mathsf{V}},\tag{20}$$

independientemente de si las partículas son fermiones o bosones. El resultado sólo depende de que las partículas sean no relativistas y de que la dimensión del espacio sea d = 3. Esta relación permite obtener P a partir de E. Debido a que en el caso de E tenemos una fórmula que puede interpretarse en términos probabilísticos, es más cómodo calcular P por este medio que a través de, por ejemplo, la Ec. (18).

El paso al continuo

Introduciendo la longitud de onda térmica,

$$\lambda^2 = \frac{h^2 \beta}{2\pi m},\tag{21}$$

la Ec. (15) puede reescribirse como

$$\log \mathcal{Z} = \pm g \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} \log \left[1 \pm z \exp\left(-\frac{\pi \lambda^2 |\mathbf{n}|^2}{L^2}\right) \right].$$
(22)

Mediante argumentos similares a los del problema 1, cuando L $\gg \lambda$, la suma sobre n puede reemplazarse por una integral en el impulso **p**,

$$\frac{\mathbf{hn}}{\mathbf{L}} \to \mathbf{p}, \qquad \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} \to \frac{\mathbf{V}}{\mathbf{h}^3} \int \mathbf{d}^3 \mathbf{p} \to \frac{4\pi \mathbf{V}}{\mathbf{h}^3} \int_0^\infty \mathbf{dp} \ \mathbf{p}^2. \tag{23}$$

Más adelante veremos que, en realidad, en el caso de los bosones, el paso de la suma a la integral tiene una sutileza. En lo que sigue, consideraremos únicamente el caso de los fermiones. Por ejemplo, para los fermiones, las Ecs. (7) y (10) se leen como

$$N = \frac{4\pi g V}{h^3} \int_0^\infty dp \ p^2 \frac{1}{1 + z^{-1} e^{\beta p^2/2m}},$$

$$E = \frac{4\pi g V}{h^3} \int_0^\infty dp \ p^2 \frac{p^2/2m}{1 + z^{-1} e^{\beta p^2/2m}}.$$
(24)

El límite $T \rightarrow 0$

Conviene estudiar de forma separada el caso T \rightarrow 0. La función

$$n(\epsilon) = \frac{1}{1 + e^{\beta(\epsilon - \mu)}}$$
(25)

tiene el aspecto general mostrado en la figura. Notar que μ puede ser negativo.



La región de transición tiene un ancho de orden kT. A medida que T tiende a cero, la transición es cada vez más pronunciada. En el límite T \rightarrow 0, la función es un escalón, con el salto en $\epsilon = \mu$. El valor de μ cuando T \rightarrow 0 es la energía de Fermi,

$$\lim_{T \to 0} \mu = \epsilon_{\rm F} = \frac{p_{\rm F}^2}{2m}.$$
 (26)

En ese límite, la primera Ec. (24) se lee como

$$N = \frac{4\pi g V}{h^3} \int_0^{p_{\rm F}} dp \ p^2 = \frac{4\pi g V}{3h^3} p_{\rm F}^3 = \frac{4\pi g V}{3h^3} (2m\epsilon_{\rm F})^{3/2}.$$
 (27)

La energía de Fermi depende sólo de la densidad,

$$\epsilon_{\rm F} = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3N}{4\pi gV}\right)^{2/3}.$$
(28)

Así como no es necesario que una partícula tenga velocidad nula para hablar de su masa en reposo, no es necesario que el gas esté a temperatura cero para definir su energía de Fermi. Ahora bien, ocurre con frecuencia que, aun a temperaturas mayores que cero, el gas puede ser tratado como si T fuera cero. La temperatura de Fermi, $kT_F = \epsilon_F$, determina una escala característica. Si T \ll T_F, el sistema puede tratarse, en primera aproximación, como si T fuera efectivamente cero. Si T \gg T_F, el sistema se comportará clásicamente.

Un caso importante es el de los metales. Los electrones de conducción tienen una temperatura de Fermi del orden de los miles de kelvins. De manera que, aun a temperaturas muy superiores a la temperatura ambiente, los electrones de conducción pueden ser tratados como un gas a temperatura cero. Un caso más extremo es el de las enanas blancas. Su temperatura es del orden de los 10⁷ K. La ionización de los átomos crea un gas de electrones cuya temperatura de Fermi es del orden de los 10¹⁰ K. También en este caso el gas de electrones puede ser tratado, en primera aproximación, como un gas ideal a temperatura cero.

No es difícil calcular la energía del gas cuando T \rightarrow 0. La segunda Ec. (24) implica

$$\mathsf{E} = \frac{4\pi g V}{h^3} \int_0^{p_{\rm F}} \mathrm{d}p \ p^2 \ \frac{p^2}{2m} = \frac{4\pi g V}{5h^3} \frac{p_{\rm F}^5}{2m} = \frac{4\pi g V}{5h^3} p_{\rm F}^3 \,\epsilon_{\rm F}.$$
 (29)

Comparando con la Ec. (27), vemos que

$$\mathsf{E} = \frac{3}{5}\mathsf{N}\boldsymbol{\epsilon}_{\mathrm{F}}.$$
(30)

Por otro lado, de acuerdo a la Ec. (20),

$$\mathsf{PV} = \frac{2}{5}\mathsf{N}\boldsymbol{\epsilon}_{\mathrm{F}}.$$
(31)

A temperatura cero, el gas tiene una energía y una presión finitas. La ecuación de Euler,

$$\mathsf{TS} = \mathsf{E} + \mathsf{PV} - \mathsf{N}\boldsymbol{\mu},\tag{32}$$

se lee como

$$\lim_{T \to 0} TS = \frac{3}{5} N \epsilon_{\rm F} + \frac{2}{5} N \epsilon_{\rm F} - N \epsilon_{\rm F} = 0.$$
(33)

El resultado es compatible con el tercer principio de la termodinámica, pero no podemos asegurar que la entropía tienda a cero cuando T \rightarrow 0. Para eso es necesario calcular las correcciones de temperatura finita.

El caso general y las funciones de Fermi-Dirac

En el tratamiento de los gases ideales cuánticos, tiene especial importancia la familia de funciones polilogarítmicas. Ya vimos que

$$N = \frac{4\pi g V}{h^3} \int_0^\infty dp \ p^2 \frac{1}{1 + z^{-1} e^{\beta \epsilon}},$$

$$E = \frac{4\pi g V}{h^3} \int_0^\infty dp \ p^2 \frac{\epsilon}{1 + z^{-1} e^{\beta \epsilon}},$$
(34)

con $\varepsilon = p^2/2m$. Mediante el cambio de variables $\beta \varepsilon \to x$, queda

$$N = \frac{gV}{\lambda^3} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx \, \frac{x^{1/2}}{1 + z^{-1} e^x},$$

$$E = \frac{gV}{\lambda^3} kT \, \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx \, \frac{x^{3/2}}{1 + z^{-1} e^x}.$$
(35)

En cada caso, aparece una integral de la forma

$$I_{\nu}(z) = \int_{0}^{\infty} dx \, \frac{x^{\nu-1}}{1+z^{-1}e^{x}}.$$
(36)

Estas funciones pueden desarrollarse en serie de potencias de z,

$$I_{\nu}(z) = \int_{0}^{\infty} dx \ x^{\nu-1} \frac{ze^{-x}}{1+ze^{-x}} = \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{l+1} z^{l} \int_{0}^{\infty} dx \ x^{\nu-1} e^{-lx}.$$
 (37)

Con el cambio de variables $lx \rightarrow x$, se ve que la última integral es $l^{-\nu}\Gamma(\nu)$. Luego,

$$I_{\nu}(z) = \Gamma(\nu) \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{l+1} \frac{z^{l}}{l^{\nu}}.$$
(38)

Para eliminar el factor $\Gamma(\nu)$, lo usual es definir las funciones de Fermi–Dirac, $f_{\nu}(z)$, como

$$f_{\nu}(z) = \frac{I_{\nu}(z)}{\Gamma(\nu)} = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_{0}^{\infty} dx \, \frac{x^{\nu-1}}{1+z^{-1}e^{x}}.$$
(39)

De manera que el desarrollo en potencias de z de estas funciones es

$$f_{\nu}(z) = \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{l+1} \frac{z^{l}}{l^{\nu}}.$$
(40)

Una propiedad importante de las funciones f_v es que sus derivadas pueden expresarse en términos de las mismas funciones. Derivando la expresión anterior respecto de *z*, obtenemos

$$f_{\nu}'(z) = \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{l+1} \frac{z^{l-1}}{l^{\nu-1}} = \frac{f_{\nu-1}(z)}{z}.$$
(41)

Las funciones f_{ν} están estrechamente relacionadas con las funciones polilogarítmicas. Estas funciones se definen en términos de su desarrollo en serie de potencias,

$$\operatorname{Li}_{\nu}(z) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^{l}}{l^{\nu}}.$$
(42)

De modo que las funciones de Fermi se escriben como

$$f_{\nu}(z) = -\operatorname{Li}_{\nu}(-z). \tag{43}$$

Esta relación es útil si están usando algún programa de cálculo simbólico. Probablemente el programa no conozca las funciones de Fermi–Dirac, pero sí las funciones polilogarítmicas. Existe un extenso catálogo de propiedades de las funciones $\text{Li}_{v}(z)$.

En términos de las funciones de Fermi–Dirac, las expresiones para N y E de la Ec. (35) se reescriben de una forma muy compacta,

$$N = \frac{gV}{\lambda^3} f_{3/2}(z), \qquad E = \frac{3}{2} \frac{gV}{\lambda^3} kT f_{5/2}(z).$$
(44)

Casi invariablemente uno llega a este tipo de expresiones simples en términos de las funciones f_v y de algún parámetro característico del problema. Si ven que las cosas se complican demasiado, es probable que estén cometiendo algún error.

La siguiente figura muestra los gráficos de las funciones $f_{3/2}$, f_2 y $f_{5/2}$.



Al menos en el semieje real positivo, no ocurre nada tremendamente interesante. El comportamiento para $z \ll 1$ se lee de la Ec. (40),

$$f_{\nu}(z) \simeq z. \tag{45}$$

Más adelante veremos que para $z \gg 1$, las funciones de Fermi–Dirac se comportan como

$$f_{\nu}(z) \simeq \frac{(\log z)^{\nu}}{\Gamma(\nu+1)}.$$
(46)

Dividiendo entre sí las Ecs. (44), resulta

$$\mathsf{E} = \frac{3}{2} \mathsf{N}\mathsf{k}\mathsf{T} \ \frac{\mathsf{f}_{5/2}(z)}{\mathsf{f}_{3/2}(z)}. \tag{47}$$

La ecuación de estado se obtiene a partir de la relación (20),

$$PV = \frac{2}{3}E = NkT \frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}(z)}.$$
(48)

Aunque no tengamos una forma de despejar z en función de T y de la densidad, siempre podemos graficar PV en función de T de manera paramétrica, calculando T y PV como funciones de z. A partir de la primera Ec. (44), tenemos

$$kT = \frac{h^2}{2\pi m} \left[\frac{N}{gV f_{3/2}(z)} \right]^{2/3}.$$
 (49)

Es preferible reescribir esto en términos de la energía de Fermi, a través de la Ec. (28),

$$\mathbf{kT} = \left[\frac{4}{3\sqrt{\pi}\,\mathbf{f}_{3/2}(z)}\right]^{2/3}\,\mathbf{\epsilon}_{\mathrm{F}}.\tag{50}$$

La figura de la página siguiente muestra el gráfico de $PV/(N\varepsilon_F)$ en función de kT/ε_F . A temperaturas mucho menores que la temperatura de Fermi, se obtiene el límite

$$\frac{\mathsf{PV}}{\mathsf{N}\varepsilon_{\mathrm{F}}} = \frac{2}{5}.$$
(51)



Como veremos más adelante, a temperaturas mucho mayores que la temperatura de Fermi, se recupera el resultado clásico, PV = NkT.

También es interesante graficar el potencial químico como función de la temperatura. No podemos hacer esto directamente, porque necesitaríamos la inversa de la función $f_{3/2}$. Pero sí podemos hacer el gráfico de manera paramétrica, calculando al mismo tiempo T y μ como funciones de *z*. La siguiente figura muestra $|\mu|/\epsilon_F$ en función de kT/ϵ_F .



La escala logarítmica es apropiada, pero algo confusa. En el recuadro se muestra la región cercana al cambio de signo de μ , en escala lineal. Podría tenerse la impresión de que el potencial químico se anula justo cuando $kT = \epsilon_F$. La impresión es engañosa; en realidad no es así. Queda como ejercicio que calculen la temperatura para la cual $\mu = 0$. Verán que es un valor cercano a T_F, pero no exactamente igual.

El calor específico

Debido a que no conocemos directamente E como función de la temperatura, el cálculo del calor específico tiene algunas particularidades. Lo que sabemos es que

$$\mathsf{E} = \frac{3}{2} \mathsf{N}\mathsf{k}\mathsf{T} \, \frac{\mathsf{f}_{5/2}(z)}{\mathsf{f}_{3/2}(z)}.$$
 (52)

El calor específico a volumen constante está dado por

$$\frac{c}{k} = \frac{1}{Nk} \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{V,N}.$$
(53)

Al derivar la expresión (52), tendremos que derivar la fugacidad,

$$\frac{c}{k} = \frac{3}{2} \left[\frac{f_{5/2}}{f_{3/2}} + T \left(\frac{f_{5/2}'}{f_{3/2}} - \frac{f_{5/2}f_{3/2}'}{f_{3/2}^2} \right) \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right)_{V,N} \right].$$
(54)

Usando la propiedad (41),

$$\frac{c}{k} = \frac{3}{2} \left[\frac{f_{5/2}}{f_{3/2}} + \frac{T}{z} \left(1 - \frac{f_{5/2} f_{1/2}}{f_{3/2}^2} \right) \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right)_{V,N} \right].$$
(55)

Para calcular la derivada de z respecto de T, diferenciemos a V y N constantes la relación

$$N = \frac{gV}{\lambda^3} f_{3/2}(z).$$
(56)

Resulta

$$0 = \frac{3}{2} \frac{gV}{T\lambda^3} f_{3/2}(z) dT + \frac{gV}{z\lambda^3} f_{1/2}(z) dz \quad \Rightarrow \quad \frac{T}{z} \left(\frac{\partial z}{\partial T}\right)_{V,N} = -\frac{3}{2} \frac{f_{3/2}(z)}{f_{1/2}(z)}.$$
 (57)

Reemplazando este resultado en la Ec. (55), queda

$$\frac{c}{k} = \frac{15}{4} \frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}(z)} - \frac{9}{4} \frac{f_{3/2}(z)}{f_{1/2}(z)}.$$
(58)

Aunque está escrito en términos de *z*, el calor específico como función de T puede graficarse paramétricamente, tal como hicimos para la presión y el potencial químico.



Cuando $kT \gg \epsilon_F$, el calor específico tiende a su valor clásico $\frac{3}{2}k$. En cambio, cuando $kT \ll \epsilon_F$, como demostraremos más adelante, el calor específico tiende a cero de manera lineal con la temperatura.

El límite clásico y la primera corrección cuántica

El límite clásico se obtiene cuando $z \ll 1$. En ese límite, todas las funciones f_v pueden aproximarse por su primer término en el desarrollo en potencias de *z* de la Ec. (40),

$$f_{\nu}(z) \simeq z. \tag{59}$$

Reemplazando en la primera Ec. (44) y en la Ec. (47), recuperamos, a menos del factor g, los resultados del gas ideal clásico,

$$N \simeq \frac{gzV}{\lambda^3}, \qquad E \simeq \frac{3}{2}NkT.$$
 (60)

Es importante notar que el límite clásico requiere $z \ll 1$, lo que implica un potencial químico negativo y números de ocupación muy bajos para $\epsilon \ge 0$, como muestra la figura.



La primeras correcciones cuánticas a las expresiones (60) se obtienen conservando un término más en el desarrollo de las funciones f_{γ} ,

$$f_{3/2}(z) \simeq z - \frac{z^2}{2^{3/2}},$$

$$f_{5/2}(z) \simeq z - \frac{z^2}{2^{5/2}}.$$
(61)

Entonces, resulta

$$N \simeq \frac{gzV}{\lambda^3} \left(1 - \frac{z}{2^{3/2}} \right),$$

$$E \simeq \frac{3}{2} NkT \left(1 - \frac{z}{2^{5/2}} \right) \left(1 - \frac{z}{2^{3/2}} \right)^{-1} \simeq \frac{3}{2} NkT \left(1 + \frac{z}{2^{5/2}} \right).$$
(62)

El objetivo es eliminar z en la última ecuación. La primera ecuación puede reescribirse como una ecuación de punto fijo,

$$z \simeq \frac{N\lambda^3}{gV} \left(1 - \frac{z}{2^{3/2}}\right)^{-1}.$$
 (63)

Este tipo de ecuaciones puede resolverse recursivamente. La aproximación de orden cero es

$$z \simeq \frac{N\lambda^3}{gV}.$$
(64)

Reemplazando la solución de orden cero en la ecuación original queda

$$z \simeq \frac{N\lambda^3}{gV} \left(1 - \frac{1}{2^{3/2}} \frac{N\lambda^3}{gV}\right)^{-1} \simeq \frac{N\lambda^3}{gV} \left(1 + \frac{1}{2^{3/2}} \frac{N\lambda^3}{gV}\right).$$
(65)

En la segunda Ec. (62), es suficiente con reemplazar z por su aproximación de orden cero,

$$\mathsf{E} \simeq \frac{3}{2}\mathsf{N}\mathsf{k}\mathsf{T}\left(1 + \frac{1}{2^{5/2}}\frac{\mathsf{N}\lambda^3}{\mathsf{g}\mathsf{V}}\right). \tag{66}$$

En especial, la ecuación de estado, teniendo en cuenta la primera corrección cuántica, es

$$\mathsf{PV} = \frac{2}{3}\mathsf{E} \simeq \mathsf{NkT}\left(1 + \frac{1}{2^{5/2}}\frac{\mathsf{N}\lambda^3}{\mathsf{gV}}\right). \tag{67}$$

En el <u>problema 3</u>, cuando estudiamos los gases cuánticos en el ensamble canónico, llegamos a este mismo resultado, salvo por el factor g. Esto se debe a que en aquel problema no tuvimos en cuenta ningún grado de libertad interno. La degeneración de espín tiene el efecto de disminuir la presión. Uno podría pensar que esto se debe a que más de un fermión puede ocupar un estado con un impulso determinado. Entonces, el impulso medio de las partículas es menor cuanto mayor es g. Pero, ¿por qué ocurre lo contrario en los gases de bosones, para los cuales al aumentar g, aumenta la presión?

Existe otra manera de escribir las expresiones anteriores que muestra explícitamente la escala de energía característica. A partir de la Ec. (28), tenemos

$$\frac{N\lambda^3}{gV} = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left(\frac{\varepsilon_F}{kT}\right)^{3/2}.$$
(68)

Por ejemplo, la Ec. (67) se lee como

$$PV \simeq NkT \left[1 + \frac{1}{3\sqrt{2\pi}} \left(\frac{\epsilon_{\rm F}}{kT}\right)^{3/2} \right].$$
(69)

El gas de Fermi a bajas temperaturas

Los tres resultados principales que tenemos son

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

$$E = \frac{3}{2} NkT \frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}(z)},$$
(70)
$$\frac{c}{k} = \frac{15}{4} \frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}(z)} - \frac{9}{4} \frac{f_{3/2}(z)}{f_{1/2}(z)}.$$

Sabemos que cuando T \rightarrow 0, el potencial químico tiende a un valor finito, $\mu \rightarrow \varepsilon_F$. Esto implica que la fugacidad tiende a infinito,

$$\beta \mu \to \infty \Rightarrow e^{\beta \mu} \to \infty.$$
 (71)

Entonces, para estudiar el comportamiento a bajas temperaturas, necesitamos aproximar las funciones $f_v(e^{\xi})$ para $\xi \gg 1$. El método de aproximación es interesante en sí mismo, de modo que le dedicaremos la siguiente sección.

El lema de Sommerfeld

De acuerdo a la definición (39),

$$f_{\nu}(e^{\xi}) = \frac{I_{\nu}(e^{\xi})}{\Gamma(\nu)}, \qquad (72)$$

donde

$$I_{\nu}(e^{\xi}) = \int_{0}^{\infty} dx \, \frac{x^{\nu-1}}{1+e^{x-\xi}}.$$
(73)

Sólo consideraremos el caso $\nu > 0$. La función

$$\frac{1}{1+e^{\mathbf{x}-\xi}}\tag{74}$$

tiene forma de escalón. Para $x \leq \xi$, vale aproximadamente 1; para $x \geq \xi$, vale aproximadamente cero. La región de transición tiene un ancho de orden 1. Si ξ es mucho mayor que 1, no se cometerá un error demasiado grande reemplazando la función (74) por un escalón infinitamente pronunciado en $x = \xi$. Esa aproximación corresponde al límite T \rightarrow 0. Si hiciéramos tal aproximación, quedaría

$$I_{\nu}(e^{\xi}) \simeq \int_{0}^{\xi} dx \ x^{\nu-1} = \frac{\xi^{\nu}}{\nu}.$$
(75)

Pueden verificar que esto conduce a las expresiones (27) y (29) encontradas en el límite $T \rightarrow 0$. Lo que buscamos obtener ahora son las primeras correcciones para temperaturas $T \ll T_F$. Como ya sabemos cuál debe ser el resultado para $T \rightarrow 0$, trataremos de aislarlo en la expresión (73). Para eso, dividamos el intervalo de integración en una región *dentro* del escalón y una región *fuera* del escalón,

$$I_{\nu}(e^{\xi}) = \int_{0}^{\xi} dx \, \frac{x^{\nu-1}}{1+e^{x-\xi}} + \int_{\xi}^{\infty} dx \, \frac{x^{\nu-1}}{1+e^{x-\xi}}.$$
 (76)

Dentro del escalón, la función $(1 + e^{x-\xi})^{-1}$ es igual a uno menos una corrección. Aislemos entonces el término dominante:

$$\frac{1}{1+e^{x-\xi}} = 1 - \left(1 - \frac{1}{1+e^{x-\xi}}\right) = 1 - \frac{1}{1+e^{-(x-\xi)}}.$$
(77)

Luego,

$$I_{\nu}(e^{\xi}) = \int_{0}^{\xi} dx \ x^{\nu-1} \left[1 - \frac{1}{1 + e^{-(x-\xi)}} \right] + \int_{\xi}^{\infty} dx \ \frac{x^{\nu-1}}{1 + e^{x-\xi}}$$
$$= \frac{\xi^{\nu}}{\nu} - \int_{0}^{\xi} dx \ \frac{x^{\nu-1}}{1 + e^{-(x-\xi)}} + \int_{\xi}^{\infty} dx \ \frac{x^{\nu-1}}{1 + e^{x-\xi}}.$$
(78)

El objetivo inicial está cumplido: el primer término es el que corresponde a T \rightarrow 0. Ahora bien, la función que aparece en la primera integral,

$$\frac{1}{1+e^{-(x-\xi)}},$$
 (79)

es el reverso de la función (74). Para $x \leq \xi$, la función (79) es aproximadamente igual a cero, mientras que para $x \gtrsim \xi$, es aproximadamente igual a 1. Más aún, para $x \ll \xi$, la función (79) es de orden $e^{-\xi}$, de modo que tiene poca importancia si el límite inferior de la primera integral en la Ec. (78) se reemplaza por menos infinito. En lugar de hacer el reemplazo directamente, para no introducir todavía ninguna aproximación, separemos esa integral en dos partes,

$$R = \int_{0}^{\xi} dx \, \frac{x^{\nu-1}}{1+e^{-(x-\xi)}} = \int_{-\infty}^{\xi} dx \, \frac{x^{\nu-1}}{1+e^{-(x-\xi)}} - \int_{-\infty}^{0} dx \, \frac{x^{\nu-1}}{1+e^{-(x-\xi)}}.$$
 (80)

En la primera integral, podemos hacer los cambios de variables $x \to x + \xi$, $x \to -x$, y en la segunda, $x \to -x$. Con esto resulta

$$R = \int_{0}^{\infty} dx \, \frac{(\xi - x)^{\nu - 1}}{1 + e^{x}} - \int_{0}^{\infty} dx \, \frac{(-x)^{\nu - 1}}{1 + e^{x + \xi}}.$$
(81)

La última integral requiere un poco de cuidado, porque ν no es necesariamente un número entero. Adoptando la convención de que la fase de -1 es i π , escribamos

$$(-x)^{\nu-1} = e^{(\nu-1)\log(-x)} = e^{(\nu-1)(\log x + i\pi)} = x^{\nu-1}e^{i(\nu-1)\pi}.$$
(82)

Así,

$$R = \int_0^\infty dx \, \frac{(\xi - x)^{\nu - 1}}{1 + e^x} - e^{i(\nu - 1)\pi} \int_0^\infty dx \, \frac{x^{\nu - 1}}{1 + e^{x + \xi}}.$$
(83)

La última integral es $I_v(e^{-\xi})$. Esta integral da correcciones exponencialmente pequeñas, debido a que el salto en el escalón ocurre en $x = -\xi$, muy a la izquierda del límite inferior de integración.

Reuniendo todos estos resultados, lo que tenemos hasta aquí es

$$I_{\nu}(e^{\xi}) = \frac{\xi^{\nu}}{\nu} + \int_{\xi}^{\infty} dx \, \frac{x^{\nu-1}}{1+e^{x-\xi}} - \int_{0}^{\infty} dx \, \frac{(\xi-x)^{\nu-1}}{1+e^{x}} + e^{i(\nu-1)\pi} \, I_{\nu}(e^{-\xi}) \,. \tag{84}$$

Haciendo el cambio de variables $x \rightarrow x + \xi$ en la primera integral, queda

$$I_{\nu}(e^{\xi}) = \frac{\xi^{\nu}}{\nu} + \int_{0}^{\infty} dx \; \frac{(\xi + x)^{\nu - 1} - (\xi - x)^{\nu - 1}}{1 + e^{x}} + e^{i(\nu - 1)\pi} \, I_{\nu}(e^{-\xi}) \,. \tag{85}$$

Esta expresión es exacta. Gráficamente, tenemos algo como lo que muestra la figura. El escalón en la integral tiene el salto en x = 0. El área sombreada es la región relevante para la integración. La curva en línea de trazos prevé que la parte imaginaria de $(\xi - x)^{\nu-1}$ será distinta de cero para $x > \xi$ si ν no es entero. El resultado de la expresión (85) tiene que ser un número real. Si ν no es entero, la integral tendrá una parte imaginaria distinta de cero, que cancelará la parte imaginaria del término $e^{i(\nu-1)\pi} I_{\nu}(e^{-\xi})$.



La integral en la Ec. (85) es de la forma

$$U = \int_0^\infty \mathrm{d}x \; \frac{g(x)}{1 + e^x}.\tag{86}$$

Como el escalón da más peso a la región cercana al origen, la idea es desarrollar g(x) en serie de Taylor alrededor de x = 0 e integrar término a término. Conviene escribir el desarrollo con el índice desplazado en una unidad:

$$\mathcal{I} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{g^{(n-1)}(0)}{(n-1)!} \int_0^\infty dx \ \frac{x^{n-1}}{1+e^x} = \sum_{n=1}^{\infty} g^{(n-1)}(0) f_n(1).$$
(87)

La función f_n es la función de Fermi–Dirac que definimos al principio. Según la Ec. (40),

$$f_{n}(1) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^{l+1}}{l^{n}}.$$
(88)

Podemos mostrar que esta serie está relacionada con la función zeta de Riemann. Separando los términos con l par e impar,

$$f_{n}(1) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{(2l+1)^{n}} - \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{(2l)^{n}} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{(2l+1)^{n}} - \frac{1}{2^{n}} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^{n}}.$$
(89)

Sumando y restando el último término para volver a formar la suma $\sum l^{-n}$, tenemos

$$f_{n}(1) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^{n}} - \frac{2}{2^{n}} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^{n}} = \left(1 - \frac{1}{2^{n-1}}\right) \zeta(n),$$
(90)

donde

$$\zeta(\mathfrak{n}) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^{\mathfrak{n}}}$$
(91)

es la función zeta de Riemann. En ningún momento usamos que n es un número entero, así que la Ec. (90) vale en general. Quizá el resultado memorable sea

$$\int_{0}^{\infty} \mathrm{d}x \, \frac{x^{\nu-1}}{1+e^{x}} = \left(1 - \frac{1}{2^{\nu-1}}\right) \Gamma(\nu) \zeta(\nu). \tag{92}$$

Volviendo hasta la Ec. (86), queda

$$\mathcal{I} = \int_{0}^{\infty} dx \; \frac{g(x)}{1 + e^{x}} = \sum_{n=0}^{\infty} \left(1 - \frac{1}{2^{n}} \right) \zeta(n+1) \; g^{(n)}(0). \tag{93}$$

La idea es aplicar esto a la integral que aparece en la Ec. (85),

$$\int_{0}^{\infty} dx \, \frac{(\xi + x)^{\nu - 1} - (\xi - x)^{\nu - 1}}{1 + e^{x}}.$$
(94)

Pero hay un problema: si ν no es entero, el desarrollo de Taylor alrededor de x = 0 de la función $(\xi - x)^{\nu-1}$ converge sólo para $|x| \leq \xi$, porque la función tiene un corte de ramificación en el eje real para $x \geq \xi$. En el caso de ν entero, tendremos un resultado exacto, pero en otro caso sólo obtendremos una expresión aproximada. Según la Ec. (85),

$$I_{\nu}(e^{\xi}) = \frac{\xi^{\nu}}{\nu} + \int_{0}^{\infty} dx \, \frac{(\xi + x)^{\nu - 1} - (\xi - x)^{\nu - 1}}{1 + e^{x}} + e^{i(\nu - 1)\pi} \, I_{\nu}(e^{-\xi}) \,. \tag{95}$$

Si aplicamos el resultado de la Ec. (93), desarrollando en serie de Taylor la función

$$g(\mathbf{x}) = (\xi + \mathbf{x})^{\nu - 1} - (\xi - \mathbf{x})^{\nu - 1},$$
(96)

si v no es entero, al final del cálculo encontraremos que $I_v(e^{\xi})$ tiene una parte imaginaria distinta de cero, aportada por el término $e^{i(\nu-1)\pi} I_v(e^{-\xi})$ en la Ec. (95). Este resultado proviene del hecho de que al hacer el desarrollo de Taylor, no tenemos acceso a la región de integración en donde la propia g(x) es imaginaria. Podemos esconder esta dificultad tomando la parte real de la Ec. (95) antes de hacer el desarrollo de Taylor de g(x). Como $I_v(e^{\xi})$ es real, tomar su parte real no tiene ninguna consecuencia:

$$I_{\nu}(e^{\xi}) = \frac{\xi^{\nu}}{\nu} + \operatorname{Re} \int_{0}^{\infty} dx \, \frac{(\xi + x)^{\nu - 1} - (\xi - x)^{\nu - 1}}{1 + e^{x}} + \cos\left[(\nu - 1)\pi\right] I_{\nu}(e^{-\xi}) \,. \tag{97}$$

Esta ecuación sigue siendo exacta. Recién ahora aplicamos la Ec. (93). Para v no entero, el resultado será sólo aproximado, pero ya no tendremos el problema de una parte imaginaria distinta de cero.

En el desarrollo de Taylor de la función g(x) de la Ec. (96), aparecerán sólo potencias impares de x,

$$(\xi + x)^{\nu - 1} - (\xi - x)^{\nu - 1} = 2\sum_{n=0}^{\infty} {\nu - 1 \choose 2n+1} \xi^{\nu - 1 - (2n+1)} x^{2n+1}.$$
 (98)

Es decir, $g^{(2n)}(0) = 0$ y

$$g^{(2n+1)}(0) = 2(2n+1)! \binom{\nu-1}{2n+1} \xi^{\nu-1-(2n+1)}.$$
(99)

Entonces, la Ec. (93) implica

$$\int_{0}^{\infty} dx \, \frac{(\xi+x)^{\nu-1} - (\xi-x)^{\nu-1}}{1+e^{x}}$$

$$\simeq 2 \sum_{n=0}^{\infty} \left(1 - \frac{1}{2^{2n+1}}\right) \zeta(2n+2)(2n+1)! \binom{\nu-1}{2n+1} \xi^{\nu-1-(2n+1)} \qquad (100)$$

$$= 2 \sum_{n=1}^{\infty} \left(1 - \frac{1}{2^{2n-1}}\right) \zeta(2n)(2n-1)! \binom{\nu-1}{2n-1} \xi^{\nu-2n}.$$

Aquí estamos obligados a usar el signo de aproximación, porque ν puede ser no entero. Sabemos que la integral en la primera línea de la ecuación, en general, tendrá una parte imaginaria distinta de cero. Al hacer el desarrollo de Taylor perdemos esa información, y obtenemos un resultado que siempre es real.

Volviendo a la Ec. (95) y usando que $f_{\nu} = I_{\nu}/\Gamma(\nu)$, encontramos, finalmente,

$$f_{\nu}(e^{\xi}) \simeq \frac{\xi^{\nu}}{\Gamma(\nu+1)} + 2\sum_{n=1}^{\infty} \left(1 - \frac{1}{2^{2n-1}}\right) \frac{\zeta(2n)}{(\nu-2n)!} \xi^{\nu-2n} + \cos\left[(\nu-1)\pi\right] f_{\nu}(e^{-\xi}) \,. \tag{101}$$

Este desarrollo se conoce como lema de Sommerfeld. Si v es entero, el resultado es exacto. En otro caso, se trata de un desarrollo asintótico. Los desarrollos asintóticos no son necesariamente convergentes. Si se fija el valor de ξ y se calculan las sucesivas sumas parciales del desarrollo, al principio el error disminuye, pero llega un punto en que si se agregan más términos, el error aumenta sin límite. Esto no le quita utilidad. Los desarrollos asintóticos suelen ser la norma, no la excepción. La aproximación de Stirling, por ejemplo, es el primer término de un desarrollo asintótico.

Notemos que si ν es entero, la serie en la Ec. (101) tiene un número finito de términos: eventualmente $\nu - 2n$ se hace negativo y $|(\nu - 2n)!| \rightarrow \infty$. Este resultado es bastante obvio si recordamos que la serie se origina en el desarrollo de Taylor de la función

$$(\xi + x)^{\nu - 1} - (\xi - x)^{\nu - 1}.$$
(102)

Como sólo estamos considerando el caso v > 0, si v es entero, esta función es un polinomio en x y, por lo tanto, su desarrollo de Taylor tiene un número finito de términos no nulos.

Usualmente, la expresión (101) se presenta truncando la serie en el segundo término y omitiendo la contribución del término proporcional a $f_v(e^{-\xi})$. Hay buenas razones para omitir el término proporcional a $f_v(e^{-\xi})$, pero hay que hacerlo con cuidado. Si $\xi \gg 1$, podemos usar el desarrollo de las funciones $f_v(z)$ para $z \ll 1$, y escribir

$$f_{\nu}(e^{-\xi}) \simeq e^{-\xi}.$$
 (103)

En la expresión (101), este término decae mucho más rápidamente que los términos de la serie, lo que justifica su omisión; a menos, claro, que todos los términos de la serie sean nulos. Eso pasa, por ejemplo, cuando se quiere aplicar el desarrollo (101) para calcular las correcciones de temperatura finita al potencial químico en dos dimensiones. Si no se está prevenido y se omite el término proporcional a $f_v(e^{-\xi})$, el resultado es fuente de mucho desconcierto. En dos dimensiones,

$$N = \frac{2\pi g\mathcal{A}}{h^2} \int_0^\infty dp \ \frac{p}{1 + z^{-1} e^{\beta \epsilon}} = \frac{2\pi g\mathcal{A}m}{h^2 \beta} \int_0^\infty dx \ \frac{1}{1 + z^{-1} e^x} = \frac{g\mathcal{A}}{\lambda^2} f_1(z).$$
(104)

Cuando $\nu = 1$, todos los términos en la serie que aparece en la Ec. (101) son nulos. Entonces, resulta

$$f_1(e^{\xi}) = \xi + f_1(e^{-\xi}).$$
(105)

Aquí vale la igualdad, porque v es entero. Reemplazando en la Ec. (104) con $\xi = \beta \mu$, queda

$$N = \frac{g\mathcal{A}}{\lambda^2} \Big[\beta \mu + f_1 \left(e^{-\beta \mu} \right) \Big] = \frac{2\pi g\mathcal{A}m}{\hbar^2} \Big[\mu + kT f_1 \left(e^{-\beta \mu} \right) \Big].$$
(106)

Si hubiéramos omitido el último término, habríamos perdido toda la dependencia del potencial químico con la temperatura. En la próxima sección, veremos que en tres dimensiones eso no ocurre.

De todas formas, la función $f_1(z)$ es especial, porque puede escribirse en términos de funciones elementales, de modo que no es necesario recurrir a ningún desarrollo:

$$f_1(z) = \int_0^\infty dx \ \frac{1}{1+z^{-1}e^x} = \int_0^\infty dx \ \frac{ze^{-x}}{1+ze^{-x}} = \int_0^z dy \ \frac{1}{1+y} = \log(1+z).$$
(107)

Luego,

$$f_1(e^{\xi}) = \log(1 + e^{\xi}) = \xi + \log(1 + e^{-\xi}) = \xi + f_1(e^{-\xi}), \qquad (108)$$

que coincide con el resultado (105).

El caso de f₁ es excepcional. En general, es suficiente con escribir la Ec. (101) truncando la serie en n = 2 y omitiendo la corrección exponencialmente pequeña del último término,

$$f_{\nu}(e^{\xi}) \simeq \frac{\xi^{\nu}}{\Gamma(\nu+1)} + \frac{\zeta(2)}{(\nu-2)!}\xi^{\nu-2} + \frac{7}{4}\frac{\zeta(4)}{(\nu-4)!}\xi^{\nu-4}.$$
 (109)

La función zeta de Riemann evaluada en los enteros pares asume valores expresables como fracciones racionales de π^n ; por ejemplo,

$$\zeta(2) = \frac{\pi^2}{6}, \qquad \zeta(4) = \frac{\pi^4}{90}, \qquad \zeta(6) = \frac{\pi^6}{945}.$$
 (110)

Con esto, la Ec. (109) se reescribe como

$$f_{\nu}(e^{\xi}) \simeq \frac{\xi^{\nu}}{\Gamma(\nu+1)} \left[1 + \nu(\nu-1) \frac{\pi^2}{6} \xi^{-2} + \nu(\nu-1)(\nu-2)(\nu-3) \frac{7\pi^4}{360} \xi^{-4} \right].$$
(111)

En ninguno de los problemas de la guía es necesario conservar más allá de la primera corrección. Si hay una fórmula para anotarse para el parcial es

$$f_{\nu}(e^{\xi}) \simeq \frac{\xi^{\nu}}{\Gamma(\nu+1)} \left[1 + \nu(\nu-1)\frac{\pi^2}{6} \xi^{-2} \right],$$
 (112)

con la salvedad que hicimos antes para $\nu = 1$. En tal caso, $f_1(z) = \log(1 + z)$ y no es necesario hacer ningún desarrollo.

Quedará más claro lo que queremos decir al hablar de desarrollos asintóticos si graficamos las funciones f_v y sus aproximaciones. La siguiente figura muestra $f_{3/2}(e^{\xi})$ y la expansión de Sommerfeld conservando en la serie un número creciente de términos n.



Recordemos que la expansión de Sommerfeld es aplicable en la región en la que $\xi \gg 1$. La línea de trazos corresponde a la aproximación de orden cero, es decir, al primer término en la expresión (101). Es claro que la curva con n = 1 representa una mejor aproximación. Pero, contrariamente a lo que uno podría esperar, a medida que se agregan más términos, para ξ fijo, el error no disminuye necesariamente. Uno esperaría que el orden de las curvas fuera el inverso, que al agregar más términos se extendiera la región en la que la aproximación es válida. Pero ocurre justamente lo contrario. Cuantos más términos se agregan, más restringido es su rango de validez. La siguiente figura muestra el error relativo para valores fijos de ξ como función del número de términos conservados en el desarrollo.



Cuanto menor es ξ , más rápidamente diverge el desarrollo (101) a medida que se agregan más términos. Cuando más grande es ξ , el error mínimo disminuye y es posible conseguir una mejor aproximación incluyendo más términos del desarrollo. Pero, de todas maneras, eventualmente el error comienza a aumentar y el desarrollo diverge. Recuerdo que la siguiente nota al pie en el libro de Landau y Lifshitz me produjo una profunda impresión:

⁺ This amounts to neglecting exponentially small terms. It must be remembered that the expansion (58.1) derived below is an asymptotic, not a convergent, series.

Si ν es entero, obtenemos un comportamiento por completo diferente. Las figura de abajo muestra lo que pasa para $\nu = 6$.



La expansión de Sommerfeld cuando v es entero tiene un número finito de términos, así que mal podría divergir. Al agregar más términos, el error disminuye uniformemente y es posible aproximar g_{ν} para valores cada vez menores de ξ . Como la expresión (101) es exacta, es fuente de algunas relaciones interesantes entre $f_{\nu}(e^{\xi})$ y $f_{\nu}(e^{-\xi})$. Por ejemplo,

$$f_2(e^{\xi}) + f_2(e^{-\xi}) = \frac{\xi^2}{2} + \frac{\pi^2}{6}.$$
 (113)

La primera corrección de temperatura finita

Podemos aplicar los resultados anteriores a las expresiones generales para el número de partículas y la energía

N =
$$\frac{gV}{\lambda^3} f_{3/2}(z)$$
, E = $\frac{3}{2}$ NkT $\frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}(z)}$. (114)

Para el número de partículas, a partir de la Ec. (112), obtenemos

$$N \simeq \frac{4gV}{3\sqrt{\pi}\lambda^3} \left(\beta\mu\right)^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{kT}{\mu}\right)^2\right] = \frac{4\pi gV}{3h^3} (2m)^{3/2} \mu^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{kT}{\mu}\right)^2\right].$$
(115)

Esta ecuación debe pensarse como una ecuación para el potencial químico. La idea no es resolverla exactamente, sino encontrar la primera corrección al potencial químico en potencias del parámetro kT/ε_F . El camino más práctico es usar aproximaciones sucesivas. El objetivo es escribir la ecuación anterior en la forma

$$\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mathsf{F}}(\boldsymbol{\mu}). \tag{116}$$

Cuando T \rightarrow 0, sabemos que $\mu \rightarrow \varepsilon_{\rm F}$. Eso sería la aproximación de orden cero,

$$\mu_0 = \epsilon_{\rm F}.\tag{117}$$

Reemplazando en la Ec. (116), obtenemos la aproximación de orden uno,

$$\mu_1 = F(\mu_0) = F(\epsilon_F). \tag{118}$$

Este procedimiento puede continuarse indefinidamente:

$$\mu_{2} = F(\mu_{1}) = F(F(\epsilon_{F})),$$

$$\mu_{3} = F(\mu_{2}) = F(F(F(\epsilon_{F}))),$$
(119)

etc.

En nuestro caso, no tiene sentido ir más allá de la primera iteración, porque la Ec. (115) ya es una aproximación.

Para aplicar este método, reescribamos la Ec. (115) como

$$\mu \simeq \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3N}{4\pi gV}\right)^{2/3} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{kT}{\mu}\right)^2\right]^{-2/3} \simeq \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3N}{4\pi gV}\right)^{2/3} \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\mu}\right)^2\right].$$
 (120)

Sabemos que el resultado de orden cero debe ser la energía de Fermi, como lo confirma la Ec. (28):

$$\mu \simeq \epsilon_{\rm F} \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\mu} \right)^2 \right]. \tag{121}$$

El punto de partida en la solución recursiva es $\mu_0 = \epsilon_F$. La primera iteración da

$$\mu \simeq \epsilon_{\rm F} \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\epsilon_{\rm F}} \right)^2 \right].$$
 (122)

Este es el resultado buscado. No tiene sentido iterar más veces, porque la Ec. (121) es válida hasta orden T².

Veamos ahora lo que pasa con la energía,

$$\mathsf{E} = \frac{3}{2} \mathsf{N}\mathsf{k}\mathsf{T} \, \frac{\mathsf{f}_{5/2}(z)}{\mathsf{f}_{3/2}(z)}.$$
 (123)

Aplicando la Ec. (112), resulta

$$\frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}(z)} \simeq \frac{2}{5}\beta\mu \left[1 + \frac{5\pi^2}{8}\left(\frac{kT}{\mu}\right)^2\right] \left[1 + \frac{\pi^2}{8}\left(\frac{kT}{\mu}\right)^2\right]^{-1} \simeq \frac{2}{5}\beta\mu \left[1 + \frac{\pi^2}{2}\left(\frac{kT}{\mu}\right)^2\right].$$
 (124)

En el último término dentro del corchete, podemos reemplazar μ por ϵ_F . Además, usando el resultado (122),

$$\frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}(z)} \simeq \frac{2}{5}\beta\epsilon_{\rm F} \left[1 - \frac{\pi^2}{12}\left(\frac{k{\rm T}}{\epsilon_{\rm F}}\right)^2\right] \left[1 + \frac{\pi^2}{2}\left(\frac{k{\rm T}}{\epsilon_{\rm F}}\right)^2\right] \simeq \frac{2}{5}\beta\epsilon_{\rm F} \left[1 + \frac{5\pi^2}{12}\left(\frac{k{\rm T}}{\epsilon_{\rm F}}\right)^2\right].$$
(125)

Reemplazando esta expresión en la Ec. (123),

$$\mathsf{E} \simeq \frac{3}{5} \mathsf{N} \, \boldsymbol{\epsilon}_{\mathrm{F}} \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{\mathrm{kT}}{\boldsymbol{\epsilon}_{\mathrm{F}}} \right)^2 \right]. \tag{126}$$

A orden cero, recuperamos el resultado (30). Pero ahora podemos calcular también la primera corrección al calor específico,

$$\frac{c}{k} = \frac{1}{Nk} \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{V,N} \simeq \frac{\pi^2}{2} \frac{kT}{\epsilon_F}.$$
(127)

Este es el resultado que anticipamos cuando graficamos el calor específico en la pág. 9.

Es más sencillo calcular la expresión aproximada de la energía y luego, a partir de ahí, calcular la expresión aproximada del calor específico, que calcular directamente la expresión aproximada del calor específico a partir de su expresión exacta,

$$\frac{c}{k} = \frac{15}{4} \frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}(z)} - \frac{9}{4} \frac{f_{3/2}(z)}{f_{1/2}(z)},$$
(128)

aunque tampoco es para hacer escándalo. Eso queda como ejercicio para ustedes. También les queda como ejercicio verificar que

$$\frac{S}{k} \simeq \frac{\pi^2}{2} \frac{kT}{\varepsilon_{\rm F}},\tag{129}$$

de manera que se cumple el tercer principio de la termodinámica.