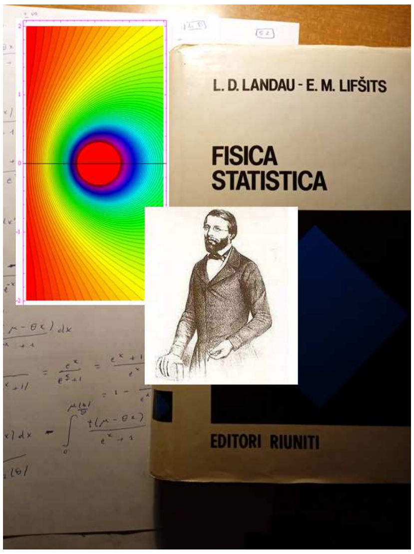
Matematica Open Source – http://www.extrabyte.info
Quaderni di Fisica Teorica – 2022

Matematica Open Source

$$\frac{d}{dx}f(x) \quad \sum_{k=0}^{+\infty} a_k \quad \int f(x)\,dx \quad \oint_{\Gamma} (X\,dx + Y\,dy + Z\,dz)$$

Integrali notevoli in Meccanica statistica quantistica

Marcello Colozzo



Indice

1 Funzione di distribuzione di Fermi - Dirac. Il caso del ≪gas elettronico≫

Per un ≪gas elettronico≫ in equilibrio termodinamico alla temperatura T, la funzione di distribuzione dei livelli energetici di singolo elettrone, è la funzione di Fermi-Dirac:

$$f\left(\varepsilon\right)=\frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\mu(\Theta)}{\Theta}}+1} \tag{1}$$

dove: ε è l'energia di singolo elettrone, $\Theta = k_B T$ la temperatura assoluta in unità energetiche (k_B è la costante di Boltzmann), $\mu\left(\Theta\right)$ è il potenziale chimico del gas. Come è noto, per un sistema di fermioni quest'ultimo è una funzione continua tale che $\mu\left(0\right) > 0$. La distribuzione (1) è normalizzata sul numero totale di elettroni:

$$N_e=\int_0^{+\infty} g\left(\varepsilon\right) f\left(\varepsilon\right) d\varepsilon \tag{2}$$

Qui abbiamo settato a zero il minimo dell'energia, mentre $g\left(\varepsilon\right)$ è la densità degli stati nella scala dell'energia (numero di stati per intervallo unitario di energia o ciò che è lo stesso, $g\left(\varepsilon\right) d\varepsilon$ è il numero infinitesimo di stati di energia tra ε e $\varepsilon + d\varepsilon$).

L'energia interna di tale sistema termodinamico è

$$E=\int_0^{+\infty} \varepsilon g\left(\varepsilon\right) f\left(\varepsilon\right) d\varepsilon \tag{3}$$

2 Integrali generalizzati

Matematicamente siamo in presenza di integrali generalizzati del tipo:

$$I\left(\Theta\right)=\int_0^{+\infty} \frac{\varphi\left(\varepsilon\right) d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu(\Theta)}{\Theta}}+1} \tag{4}$$

essendo $\varphi\left(\varepsilon\right)$ una funzione analitica tale da rendere convergente l'integrale (4). Adimensionalizziamo la variabile di integrazione scrivendo:

$$x=\frac{\varepsilon-\mu\left(\Theta\right)}{\Theta} \Longrightarrow d\varepsilon=\Theta dx, \quad -\frac{\mu\left(\Theta\right)}{\Theta} \leq x<+\infty$$

Segue

$$I(\Theta) = \Theta \int_{-\frac{\mu(\Theta)}{\Theta}}^{+\infty} \frac{\varphi(\mu + \Theta x)\, dx}{e^x + 1} = \underbrace{\Theta \int_{-\frac{\mu(\Theta)}{\Theta}}^{0} \frac{\varphi(\mu + \Theta x)\, dx}{e^x + 1}}_{I_1(\Theta)} + \Theta \int_0^{+\infty} \frac{\varphi(\mu + \Theta x)\, dx}{e^x + 1} \tag{5}$$

Calcoliamo a parte

$$I_1(\Theta) = \int_{-\frac{\mu(\Theta)}{\Theta}}^{0} \frac{\varphi(\mu + \Theta x)\, dx}{e^x + 1} \tag{6}$$

Eseguiamo la sostituzione:

$$x' = -x \Longrightarrow dx = -dx', \quad -\frac{\mu(\Theta)}{\Theta} \leq x = -x' \leq 0 \Longrightarrow \frac{\mu(\Theta)}{\Theta} \geq x' \geq 0$$

Quindi

$$I_1(\Theta) = -\int_{\frac{\mu(\Theta)}{\Theta}}^{0} \frac{\varphi(\mu - \Theta x')\, dx'}{e^{-x'} + 1} = \int_0^{\frac{\mu(\Theta)}{\Theta}} \frac{\varphi(\mu - \Theta x')\, dx'}{e^{-x'} + 1} \underset{x' = \text{variabile muta}}{=} \int_0^{\frac{\mu(\Theta)}{\Theta}} \frac{\varphi(\mu - \Theta x)\, dx}{e^{-x} + 1} \tag{7}$$

Inoltre

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

onde

$$I_1(\Theta) = \int_0^{\frac{\mu(\Theta)}{\Theta}} \frac{\varphi(\mu - \Theta x)\, dx}{e^{-x} + 1} = \underbrace{\int_0^{\frac{\mu(\Theta)}{\Theta}} \varphi(\mu - \Theta x)\, dx}_{I_2(\Theta)} - \int_0^{\frac{\mu(\Theta)}{\Theta}} \frac{\varphi(\mu - \Theta x)\, dx}{e^x + 1} \tag{8}$$

Nell'integrale $I_2(\Theta)$ eseguiamo il cambio di variabile:

$$x' = -x \Longrightarrow I_2(\Theta) = \int_{-\frac{\mu(\Theta)}{\Theta}}^{0} \varphi(\mu + \Theta x')\, dx' = \int_{-\frac{\mu(\Theta)}{\Theta}}^{0} \varphi(\mu + \Theta x)\, dx \tag{9}$$

Ripristinando la variabile $\varepsilon = \mu + \Theta x$

$$dx = \frac{1}{\Theta} d\varepsilon, \quad -\frac{\mu(\Theta)}{\Theta} \leq x = \frac{\varepsilon - \mu(\Theta)}{\Theta} \leq 0 \Longrightarrow 0 \leq \varepsilon \leq \mu(\Theta)$$

per cui

$$I_2(\Theta) = \frac{1}{\Theta} \int_0^{\mu(\Theta)} \varphi(\varepsilon)\, d\varepsilon \tag{10}$$

Sostituendo la (10) nella (8)

$$I_1(\Theta) = \frac{1}{\Theta} \int_0^{\mu(\Theta)} \varphi(\varepsilon)\, d\varepsilon - \int_0^{\frac{\mu(\Theta)}{\Theta}} \frac{\varphi(\mu - \Theta x)\, dx}{e^x + 1} \tag{11}$$

che sostituita nella (5)

$$\int_0^{+\infty} \frac{\varphi(\varepsilon)\, d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon - \mu(\Theta)}{\Theta}} + 1} = \int_0^{\mu(\Theta)} \varphi(\varepsilon)\, d\varepsilon + \Theta \int_0^{+\infty} \frac{\varphi(\mu + \Theta x)\, dx}{e^x + 1} - \Theta \int_0^{\frac{\mu(\Theta)}{\Theta}} \frac{\varphi(\mu - \Theta x)\, dx}{e^x + 1} \tag{12}$$

Abbiamo così spezzato l'integrale a primo membro nella somma di tre contributi, di cui due sono integrali ordinari.

3 Sviluppo asintotico

Nella (12) fissiamo l'attenzione sull'integrale

$$F\left(\frac{\mu(\Theta)}{\Theta}\right) = \int_0^{\frac{\mu(\Theta)}{\Theta}} \frac{\varphi(\mu - \Theta x)\, dx}{e^x + 1} \tag{13}$$

Nelle applicazioni[1] si è interessati al comportamento del gas elettronico in condizioni di *forte degenerazione, cioè per* $\mu(0) \gg \Theta$ nel senso che la temperatura a cui si trova il gas è molto più bassa (al limite, zero) del potenziale chimico allo zero assoluto (livello di Fermi). Ciò precisato, osservando che

$$\lim_{\Theta \to 0^+} \frac{\mu(\Theta)}{\Theta}$$

segue che lo studio della forte degenerazione si esplica attraverso lo studio del comportamento asintotico della funzione (13), cioè

$$F\left(\frac{\mu(\Theta)}{\Theta}\right) \underset{\Theta \ll \mu(\Theta)}{\longrightarrow} \int_0^{+\infty} \frac{\varphi(\mu - \Theta x)\, dx}{e^x + 1} \tag{14}$$

Tale operazione di passaggio al limite si giustifica grazie dall'accelerazione della convergenza innescata dall'esponenziale a denominatore dell'integrando

$$\int_0^{+\infty} \frac{\varphi(\mu - \Theta x)\, dx}{e^x + 1} = \int_0^{+\infty} \frac{e^{-x}\varphi(\mu - \Theta x)\, dx}{1 + e^{-x}}$$

In quest'ordine di approssimazione si ha

$$I(\Theta \ll \mu(0)) = \int_0^{\mu(\Theta)} \varphi(\varepsilon)\, d\varepsilon + \Theta\left[\int_0^{+\infty} \frac{\varphi(\mu + \Theta x) - \varphi(\mu - \Theta x)}{e^x + 1} dx\right] \tag{15}$$

L'ipotesi dell'analiticità della funzione φ ci consente di sviluppare $\varphi(\mu + \Theta x) - \varphi(\mu - \Theta x)$ in serie di Taylor secondo le potenze di x:

$$\varphi(\mu + \Theta x) - \varphi(\mu - \Theta x) = \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{1}{k!}\left[\frac{d^k}{dx^k}\left(\varphi(\mu + \Theta x) - \varphi(\mu - \Theta x)\right)\right]_{x=0} x^k \tag{16}$$

Calcolando le derivate:

$$\frac{d^k}{dx^k}\left(\varphi(\mu + \Theta x) - \varphi(\mu - \Theta x)\right) = \Theta^k\left[\varphi^{(k)}(\mu + \Theta x) - (-1)^k \varphi^{(k)}(\mu - \Theta x)\right]$$

Ne segue

$$\left[\frac{d^k}{dx^k}\left(\varphi(\mu + \Theta x) - \varphi(\mu - \Theta x)\right)\right]_{x=0} = \begin{cases} 2\Theta^k \varphi^{(k)}(\mu), & \text{per } n \text{ dispari} \\ 0, & \text{per } n \text{ pari} \end{cases}$$

La (16) si riscrive

$$\varphi(\mu + \Theta x) - \varphi(\mu - \Theta x) = 2\sum_{k=1}^{+\infty} \frac{\Theta^{2k-1}\varphi^{(2k-1)}(\mu)}{(2k-1)!} x^{2k-1} \tag{17}$$

che sostituito nella (15) porge:

$$I(\Theta \ll \mu(0)) = \int_0^{\mu(\Theta)} \varphi(\varepsilon)\, d\varepsilon + 2\Theta\sum_{k=1}^{+\infty} \frac{\Theta^{2k-1}\varphi^{(2k-1)}(\mu)}{(2k-1)!} \int_0^{+\infty} \frac{x^{2k-1}}{e^x + 1} dx \tag{18}$$

[1] Ad esempio, il «gas» di elettroni di conduzione di un metallo.

4 La funzione zeta di Riemann

Nello sviluppo in serie (18) compiono gli integrali

$$\int_0^{+\infty} \frac{x^{2k-1}}{e^x+1} dx, \qquad k = 1, 2, ... \tag{19}$$

Poniamo in generale

$$J(\lambda) = \int_0^{+\infty} \frac{x^{\lambda-1}}{e^x+1} dx, \qquad (\lambda > 0) \tag{20}$$

Scriviamo

$$\frac{1}{e^x+1} = \frac{e^{-x}}{1+e^{-x}} = e^{-x} \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n e^{-(nx)}$$

L'ultimo passaggio si giustifica con la posizione $t = e^{-x} < 1$ per $x > 0$, onde

$$\frac{1}{1+t} = \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n t^n$$

Segue

$$\begin{aligned}
\int_0^{+\infty} \frac{x^{\lambda-1}dx}{e^x+1} &= \int_0^{+\infty} x^{\lambda-1} e^{-x} \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n e^{-(nx)} dx \\
&= \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n \int_0^{+\infty} x^{\lambda-1} e^{-(n+1)x} dx \\
&\underset{y=(n+1)x}{=} \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n \frac{1}{(n+1)^\lambda} \underbrace{\int_0^{+\infty} y^{\lambda-1} e^{-y} dy}_{\Gamma(\lambda)}
\end{aligned}$$

mentre nell'altro termine riconosciamo la serie alternata

$$\sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n \frac{1}{(n+1)^\lambda} = \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{n-1}}{n^\lambda} = \left(1 - 2^{1-\lambda}\right) \zeta(\lambda)$$

dove $\zeta(\lambda)$ è l'estensione olomorfa della funzione zeta calcolata sull'asse reale positivo del piano complesso. Quindi

$$\int_0^{+\infty} \frac{x^{\lambda-1}dx}{e^x+1} = \left(1 - 2^{1-\lambda}\right) \Gamma(\lambda) \zeta(\lambda) \tag{21}$$

Osservazione 1 *In maniera simile si dimostra*

$$\int_0^{+\infty} \frac{x^{\lambda-1}dx}{e^x-1} = \Gamma(\lambda) \zeta(\lambda), \qquad (\lambda > 1)$$

5 Non convergenza dello sviluppo asintotico

Per quanto precede, gli integrali (19) si esprimono attraverso la funzione gamma e la funzione zeta

$$\int_0^{+\infty} \frac{x^{2k-1}}{e^x+1}dx = \left(1-2^{1-2k}\right)\Gamma\left(2k\right)\zeta\left(\lambda\right) \underset{\Gamma(2k)=(2k-1)!}{=} (2k-1)!\left(1-2^{1-2k}\right)\zeta\left(2k\right) \tag{22}$$

Sostituendo nella (18)

$$\int_0^{+\infty} \frac{\varphi\left(\varepsilon\right)d\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon-\mu(\Theta)}{\Theta}}+1} \underset{\Theta\ll\mu(\Theta)}{=} \int_0^{\mu(\Theta)} \varphi\left(\varepsilon\right)d\varepsilon + 2\Theta\sum_{k=1}^{+\infty}\Theta^{2k-1}\varphi^{(2k-1)}\left(\mu\right)\left(1-2^{1-2k}\right)\zeta\left(2k\right) \tag{23}$$

Si noti che tale sviluppo asintotico non converge. Ciò può essere visto dalla (18) giacché è facile persuadersi che

$$\lim_{k\to+\infty}\int_0^{+\infty}\frac{x^{2k-1}}{e^x+1} = +\infty$$

Riferimenti bibliografici

[1] Landau L.D. *Fisica Statistica*. Editori Riuniti