EXTENSION DE UN METODO PARA EL CALCULO APROXIMADO DE INTEGRALES DE FERMI-DIRAC (*)

por WADIM LUBOMIRSKY

RESUMEN: Se extiende a un caso cualquiera un método aproximado presentado en una comunicación anterior a la AFA. Para ello se desarrolla en serie de polinomios de Hermite la derivada de la probabilidad de ocupación de un nivel, siendo el desarrollo convergente para todo el rango de energías; se determinan los coeficientes del desarrollo y se discuten diversos ejemplos.

1. *Desarrollo en serie.*

En una comunicación anterior (1) se presentó un método aproximado de cálculo de integrales de Fermi-Dirac de la forma:

$$I = - \int_{-\frac{W}{kT}}^{\infty} F'(v)\, C(v)\, dv \qquad (1\text{—}1)$$

donde:

$$v = \frac{E - W}{kT} \qquad (1\text{—}2)$$

siendo E la energía de un nivel variable, W la energía del nivel de Fermi, k la constante de Boltzmann y T la temperatura absoluta.

$F'(v)$, la derivada de la probabilidad de ocupación del nivel variable, es

$$F'(v) = \frac{d}{dv}(1 + e^{v})^{-1} = - \frac{e^{v}}{(1 + e^{v})^{2}} = - \frac{1}{(1 + e^{v})\,(1 + e^{-v})} \qquad (1\text{—}3)$$

$C(v)$ es una función cualquiera, que por razones físicas satisface las condiciones:

$$C(v) = \begin{cases} 0 & v < -\dfrac{W}{k\,t} = v_0 \\ C(v) & v_0 \leqslant v \leqslant \dfrac{E_M - W}{k\,t} = v_M \\ C(v_M) & v > v_M \end{cases} \qquad (1\text{—}4)$$

(*) Recibido el 30 de abril de 1962.

(1) LUBOMIRSKY, (36° reunión AFA, Córdoba, setiembre 1960).

donde E_M es la máxima energía presente o accesible en la banda o bandas involucradas en el problema. El valor mínimo posible de la energía se ha tomado como origen de la escala de energías.

La única restricción sobre $C(v)$ es que debe ser integrable, lo que se verifica si es continua como ocurre casi invariablemente.

En el trabajo (1) se obtenían expresiones aproximadas de la integral I considerando diversas aproximaciones posibles para la función $F'(v)$, obtenidas a partir del desarrollo en serie de potencias de v de la función $F(v)$:

$$F(v) = \frac{1}{2}\left(1 - tgh\,\frac{v}{2}\right) =$$

$$= \frac{1}{2}\left[1 - \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1}\, 2\, \frac{(2^{2n}-1)\, B_{2n}}{(2_n)\,!}\; v^{2}{}_{n}{}^{-1}\right] \qquad (1\text{—}5)$$

Una limitación inherente a este método proviene del hecho de que la serie (1—5) tiene un radio de convergencia finito, igual a π.

En el trabajo presente se amplía el método adoptando para $F'(v)$ un desarrollo en serie de polinomios de Hermite que converge para todo v real.

Esto es posible en virtud de satisfacer $F'(v)$ las siguientes condiciones suficientes para un tal desarrollo (2):

$$F'(v) = \text{función monótona en } (-\infty, 0) \text{ y } (0, \infty) \qquad (1\text{—}6)$$

$$F'(v) = \text{función continua en } (-\infty, \infty) \qquad (1\text{—}7)$$

$$|\,F'(v)\,| = \text{función integrable en } (-\infty, \infty)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |F'(v)\,|\,dv = -\int_{-\infty}^{\infty} F'(v)\,dv = -F(v)\Big|_{-\infty}^{\infty} =$$

$$= 0 + 1 = 1 < K_1 \qquad (1\text{—}8)$$

$$|F''(v)\,| \text{ función integrable en } (-\infty, \infty)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\,F''(v)\,|\,dv = -\int_{-\infty}^{0} F''(v)dv + \int_{0}^{\infty} F''(v)dv = -F'(v)\Big|_{\infty}^{0} +$$

$$+ F'(v)\Big|_{0}^{\infty} = \frac{1}{4} - 0 + 0 + \frac{1}{4} = \frac{1}{2} < K_2 \qquad (1\text{—}9)$$

---

(2) Madelung, *Die mathematische Hilfsmittel des Physikees* (Dover, 1943)

$$F'(v)\, e^{-\frac{v^2}{2}} v^{\varepsilon} = -\frac{e^{\frac{v^2}{2}} v^{\varepsilon}}{(1+e^{v})\,(1+e^{-v})} \to \pm 0$$

$$\text{para } v \to \pm\infty \text{ y todo } \epsilon > 0 \qquad (1\text{—}10)$$

Por lo tanto se puede escribir:

$$F'(v) = \sum_{n=0}^{\infty} a_{2n} H_{2n}(v) \qquad (1\text{—}11)$$

y este desarrollo converge hacia $F'(v)$ para todo v real.

Los coeficientes a_{2n} están dados por:

$$a_{2n} = \frac{1}{\sqrt{\pi}\, 2^{2n}\,(2n)\,!} \int_{\infty}^{\infty} F'(v)\, H_{2n}(v)\, e^{-v^2}\, dv =$$

$$= -\frac{I\,[H_{2n}(v)]}{\sqrt{\pi}\;\, 2^{2n}\,(2\,n)\,!} \qquad (1\text{—}12)$$

donde se ha introducido el operador integral lineal:

$$I\,[f(x)] = -\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} F'(x)\, f(x)\, d\,x \qquad (1\text{—}13)$$

Utilizando la fórmula de recurrencia a que satisfacen los polinomios de Hermite:

$$H_{n+1}(x) = 2x\, H_n(x) - 2\,n\, H_{n-1}(x) \qquad (1\text{—}14)$$

con el valor inicial $H_0(x) = 1$, se pueden expresar las $I\,[H_{2n}]$ como combinaciones de expresiones que contienen dicho operador (1—13) aplicado a las potencias pares de x. Un ejemplo de tales expresiones se presenta a continuación:

$$\mathrm{I}\,[H_0] = I\,[1] \qquad (1\text{—}15)$$

$$I\,[H_2] = 4\,I\,[x^2] - 2\,I\,[1] \qquad (1\text{—}16)$$

$$I\,[H_4] = 16\,I\,[x^4] - 48\,I\,[x^2] + 12\,I\,[1] \qquad (1\text{—}17)$$

$$I\,[H_6] = 64\,I\,[x^6] - 480\,I\,[x^4] + 720\,I\,[x^2] - 120\,I\,[1] \qquad (1\text{—}18)$$

Integrales de la forma $I\,[x^{2n}]$ son muy fáciles de evaluar numéricamente usando una fórmula de integración semejante a la de Gauss, pero adaptada a la función de peso e^{-x^2}. De Mineur ([3]), se han sacado los puntos y factores de peso correspondientes a una selección de $n = 1,2\ldots9$ puntos en el intervalo $(-\infty, \infty)$, que se muestran en la Tabla 1. Los mismos se utilizan en la siguiente forma:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}\,\mathrm{f}\,(x)\,d\,x = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{u^2}{2}}\, f\left(\frac{u}{\sqrt{2}}\right)\frac{d\,u}{\sqrt{2}} =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{i=1}^{n} M_i\, f\left(\frac{u_i}{\sqrt{2}}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{i=1}^{n} M_i\, f\,(x_i) \qquad (1\text{—}19)$$

donde M_i y u_i son los valores dados por Mineur y $x_i = \frac{u_i}{\sqrt{2}}$ están indicados en la Tabla 1.

En la Tabla 2 se muestran los valores de $I\,[x^{2n}]$ calculados de esta manera. Se observa que la convergencia es muy buena.

2. *Cálculo aproximado de integrales de Fermi-Dirac.*

En la práctica se recurre a expresiones aproximadas de $F'(v)$, obtenidas cortando la serie (1—11) al cabo de un número pequeño de términos. Se presenta el problema de determinar en qué intervalo una suma finita de términos es un "buena aproximación" a la serie (1—11).

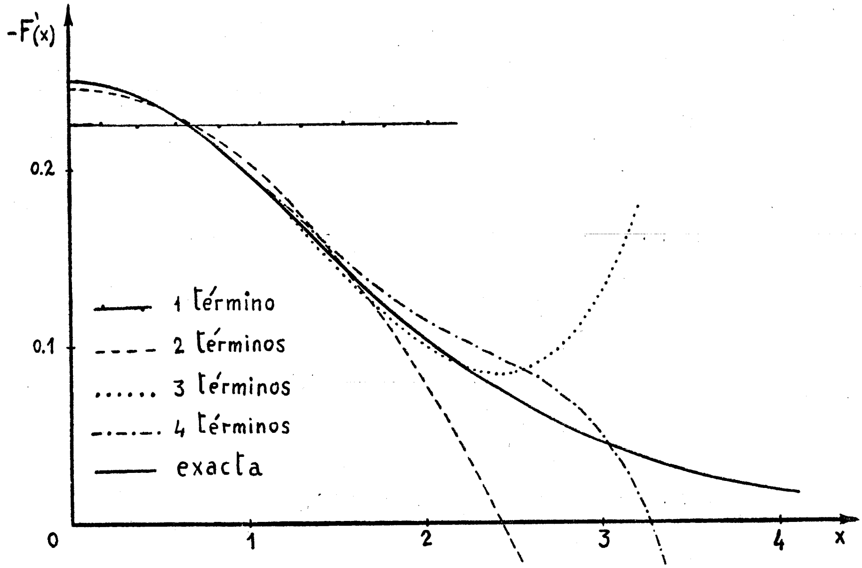
Si se observa la figura adjunta se aprecia que lo más "natural" es tomar una aproximación de orden impar (o sea, con un número par de términos), y que tal expresión "aproxima" a la función $F'(v)$ hasta un valor de x dado por el primer cero del polinomio resultante.

Así se tiene, por ejemplo:

Primera aprox.

$$F'_1\,(x) = -\,0.2245 + 0.01043\,H_2\,(x) =$$
$$= -\,0.2454 + 0.04172\,x^2;\ |\,x\,| \leqslant 2.43 \qquad (2\text{—}1)$$

([3]) Mineur, *Techniques de Calcul Numérique,* Librairie Polytechn. Béranger 1952.



Segunda aprox.

$$F'_2(x) = -0.2245 + 0.01043\,H_2(x) - 0.000294\,H_4(x) + \\ + 0.0000068\,H_6(x) = -0.2497 + 0.05873\,x^2 - \\ - 0.007968\,x^4 + 0.0004352\,x^6 \;;\; |\,x\,| \leqslant 3.27 \qquad (2\text{—}2)$$

Fuera de estos intervalos se debe suponer a $F'(x)$ constantemente nula. El definir una expresión aproximada de $F'(x)$ de esta manera no solamente parece natural, sino que da, además, una aproximación óptima, en un sentido que se va a precisar más adelante.

Para poner a prueba la bondad de tales aproximaciones se pueden aplicar al cálculo de una función $V(x)$ analítica, como se hizo en (1).

Se tiene:

Primera aprox.

$$I = 0.2454 \int_{-2.43}^{2.43} \sum_{m=0}^{\infty} C^{(m)}(0)\, v^m\, dv -$$

$$- 0.4772 \int_{-2.43}^{2.43} \sum_{m=0}^{\infty} C^{(m)}(0)\, v^{m+2}\, d\,v \qquad (2\text{—}3)$$

Segunda aprox.

$$I = 0.2497 \int_{-3.27}^{3.27} \sum_{m=0}^{\infty} C^{(m)}\,(0)\, v^{m}\, dv \;-$$

$$-\, 0.05873 \int_{-3.27}^{3.27} \sum_{m=0}^{\infty} C^{(m)}\,(0)\, v^{m+2}\, d\,v \;+$$

$$+\, 0.007968 \int_{-3.27}^{3.27} \sum_{m=0}^{\infty} C^{(m)}\,(0)\, v^{m+4}\, d\,v \;- \qquad (2\text{—}4)$$

$$-\, 0.0004352 \int_{-3.27}^{3.27} \sum_{m=0}^{\infty} C^{(m)}\,(0)\, v^{m+6}\, d\,v$$

Las sumatorias respecto de m se pueden permutar con las integrales y calcular estas últimas, sacando los coeficientes $C(m)$ (0) fuera de las integrales. Agrupando términos queda:

Primera aprox.

$$I = 2\, C\, (0) \left[0.2454 \;\text{a} - 0.04172 \frac{a^3}{3} \right]$$

$$+\, 2\, C''\, (0) \left[0.2454 \frac{a^3}{3} - 0.04172 \frac{a^5}{5} \right] + \ldots \; (a = 2.43) \qquad (2\text{—}5)$$

Segunda aprox.

$$I = 2\,\text{C}\,(0) \left[0.2497 \;\text{a} - 0.5873 \frac{a^3}{3} + 0.007968 \frac{a^5}{5} - \right.$$

$$\left. -\, 0.0004352 \frac{a^7}{7} \right] + 2\, C''\, (0) \left[0.2497 \frac{a^3}{3} - 0.05873 \frac{a^5}{5} + \right.$$

$$\left. +\, 0.007968 \frac{a^7}{7} - 0.0004352 \frac{a^9}{9} \right] + \ldots \; (a = 3.27) \qquad (2\text{—}6)$$

donde se ha indicado con a el valor del límite superior de integración, correspondiente a cada caso.

Cada una de estas aproximaciones es óptima en el sentido de que el coeficiente de cada $C^{(m)}$ (0) es estacionario respecto de una variación arbitraria de a justamente para los valores elegidos, es decir, el primer cero de la expresión aproximada de $F'(x)$ elegida, en cada caso. Esto además explica por qué solamente sirven las aproximaciones de $F'(x)$ que tienen un número par de términos, que son las únicas que tienen ceros reales.

En la Tabla 3 se muestran los coeficientes de $C(0)$ y de $C''(0)$ calculados con las (2—5) y (2—6) y se comparan con los valores exactos y con los obtenidos, en primera y segunda aproximación, por el método del desarrollo en serie de potencias presentado en (1).

Se observa que, ahora resulta correcto el orden de magnitud del término de segundo orden $C''(0)$.

TABLA Nº 1

	U_i	X_i	M_i
$n = 1$	0	0	2.5066
$n = 2$	± 1	± 0.7071	1.5233
$n = 3$	± 1.732 0	± 1.225 0	0.4178 1.6711
$n = 4$	± 2.334 ± 0.742	± 1.650 ± 0.525	0.1150 1.1383
$n = 5$	± 2.857 ± 1.356 0	± 2.020 ± 0.959 0	0.02822 0.5567 1.3369
$n = 6$	± 3.324 ± 1.889 ± 0.617	± 2.350 ± 1.336 ± 0.436	0.006406 0.2221 1.0248
$n = 7$	± 3.750 ± 2.367 ± 1.154 0	± 2.652 ± 1.674 ± 0.826 0	0.001374 0.07710 0.6019 1.1459
$n = 8$	± 4.145 ± 2.802 ± 1.637 ± 0.539	± 2.931 ± 1.981 ± 1.157 ± 0.381	0.000282 0.02415 0.2939 0.9350
$n = 9$	± 4.513 ± 3.205 ± 2.079 ± 1.023 0	± 3.191 ± 2.266 ± 1.469 ± 0.723 0	0.000056 0.006991 0.2251 0.6119 1.0186

TABLA Nº 2

	$I[1]$	$I[x^2]$	$I[x^4]$	$I[x^6]$
$n=1$	0.4431	0	0	0
$n=2$	0.4766	0.2383	0.1191	0.0595
$n=3$	0.3991	0.1556	0.2335	0.3504
$n=4$	0.3980	0.1635	0.1915	0.4514
$n=5$	0.3981	0.1618	0.2021	0.4029
$n=6$	0.3981	0.1621	0.1993	0.4180
$n=7$	0.3982	0.1620	0.2000	0.4141
$n=8$	0.3982	0.1620	0.1997	0.4144
$n=9$	0.3981	0.1619	0.1998	0.4147
	0.398	0.162	0.200	0.415

TABLA Nº 3

	$C(o)$	$C''(o)$
exacto	1	1.643
pot. 1	1	0.667
pot. 2	1	0.987
Herm. 1	0.794	0.934
Herm. 2	1.355	2.008