

1 - Introdução matemática

Este capítulo baseia-se principalmente nos apêndices do livro de Reif [1].

1 Somas elementares

1.1 A série aritmética

Uma série aritmética é dada pela expressão

$$S_n = a_1 + a_2 + \cdots + a_n, \quad (1)$$

em que o termo n é

$$a_n = a_1 + (n - 1)r. \quad (2)$$

A quantidade r é a *razão* da série aritmética (1). Conhecendo o primeiro termo da série a_1 e a razão r todos os outros termos podem ser calculados. De fato, conhecendo dois termos entre a_1 , a_n e r o terceiro pode ser calculado usando (2).

Vamos calcular agora S_n definido em (1). Primeiro notamos que

$$\begin{aligned} a_1 + a_n &= 2a_1 + (n - 1)r, \\ a_2 + a_{n-1} &= 2a_1 + (n - 1)r, \\ &\dots, \end{aligned}$$

e de maneira geral,

$$a_i + a_{n-(i-1)} = 2a_1 + (n - 1)r. \quad (3)$$

Podemos assim escrever

$$\begin{aligned} S_n &= a_1 + \cdots + a_n, \\ S_n &= a_n + \cdots + a_1, \\ \hline 2S_n &= n(a_1 + a_n). \end{aligned}$$

Obtemos assim uma expressão para S_n ,

$$S_n = \frac{1}{2}n(a_1 + a_n). \quad (4)$$

Substituindo (2) podemos escrever S_n na forma

$$S_n = na_1 + \frac{1}{2}n(n-1)r. \quad (5)$$

1.2 A série geométrica

Uma série geométrica é dada pela expressão

$$S_n = a_1 + a_2 + \cdots + a_n = a_1 + qa_1 + q^2a_1 + \cdots + q^{n-1}a_1, \quad (6)$$

em que o termo n é

$$a_n = q^{n-1}a_1. \quad (7)$$

A quantidade q é a *razão* da série geométrica (6). Conhecendo o primeiro termo da série a_1 e a razão q podemos calcular qualquer outro termo. Conhecendo dois termos entre a_1 , a_n e q o terceiro pode ser calculado usando (7).

Vamos calcular agora S_n definido em (6). Multiplicando (6) por q ,

$$qS_n = qa_1 + q^2a_1 + \cdots + q^{n-1}a_1 + q^n a_1. \quad (8)$$

Subtraindo (8) de (6) obtemos

$$(1 - q)S_n = a_1 - q^n a_1 = a_1(1 - q^n), \quad (9)$$

portanto

$$S_n = a_1 \frac{1 - q^n}{1 - q}. \quad (10)$$

Se $|q| < 1$ e a série geométrica (6) é infinita, isto é $n \rightarrow \infty$, a série converge, pois $q^n \rightarrow 0$. Portanto, para $n \rightarrow \infty$ e $|q| < 1$,

$$S = \frac{a_1}{1 - q}. \quad (11)$$

2 Cálculo da integral $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx$

A integral *indefinida* $\int e^{-x^2} dx$ não pode ser calculada em termos de funções elementares. Definimos por I a integral *definida*

$$I \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx. \quad (12)$$

Podemos calcular I usando o seguinte artifício. Escrevemos I em termos de uma variável de integração diferente,

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} dy. \quad (13)$$

Multiplicando (12) por (13),

$$I^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} dy = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} e^{-y^2} dx dy,$$

ou

$$I^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x^2+y^2)} dx dy. \quad (14)$$

Esta é uma integral sobre todo o plano xy .

Vamos expressar a integral acima em coordenadas polares r e θ . Então $x^2 + y^2 = r^2$, e o elemento de área é $r dr d\theta$ (fig. 1.1). Para cobrir o plano inteiro, as variáveis r e θ devem cobrir os intervalos $0 < r < \infty$ e $0 < \theta < 2\pi$. Desta forma a equação acima fica na forma

$$I^2 = \int_0^{+\infty} \int_0^{2\pi} e^{-r^2} r dr d\theta = 2\pi \int_0^{+\infty} e^{-r^2} r dr, \quad (15)$$

pois a integral em θ é imediata. O fator r torna a integral trivial. Obtemos

$$I^2 = 2\pi \int_0^{+\infty} \left(-\frac{1}{2}\right) d(e^{-r^2}) = -\pi[e^{-r^2}]_0^{\infty} = -\pi(0 - 1) = \pi, \quad (16)$$

ou

$$I = \sqrt{\pi}. \quad (17)$$

Portanto,

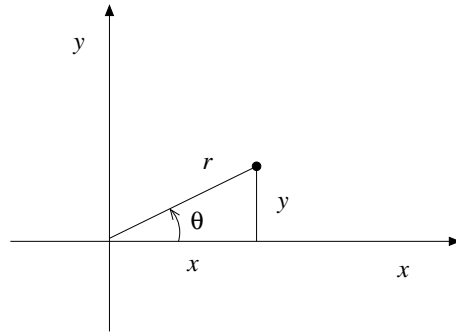
$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}. \quad (18)$$

Notemos que e^{-x^2} é uma função par de x , logo,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx = 2 \int_0^{+\infty} e^{-x^2} dx,$$

e temos

$$\int_0^{+\infty} e^{-x^2} dx = \frac{1}{2}\sqrt{\pi}. \quad (19)$$



[!ht]
 Figura 1.1. Coordenadas polares r, θ no plano.

3 Cálculo da integral $\int_0^{+\infty} e^{-x} x^n dx$

Para $n = 0$ obtemos

$$\int_0^{+\infty} e^{-x} dx = -[e^{-x}]_0^{+\infty} = -[0 - 1] = 1. \quad (20)$$

Para n qualquer podemos fazer uma integração por partes,

$$\begin{aligned} \int_0^{+\infty} e^{-x} x^n dx &= - \int_0^{+\infty} x^n d(e^{-x}), \\ &= -[x^n e^{-x}]_0^{+\infty} + n \int_0^{+\infty} x^{n-1} e^{-x} dx. \end{aligned}$$

O primeiro termo é nulo, logo obtemos a relação de recorrência

$$\int_0^{+\infty} e^{-x} x^n dx = n \int_0^{+\infty} e^{-x} x^{n-1} dx. \quad (21)$$

Se n é um inteiro positivo podemos aplicar a equação acima repetidamente até obtermos

$$\int_0^{+\infty} e^{-x} x^n dx = n(n-1)(n-2) \dots (2)(1),$$

ou

$$\int_0^{+\infty} e^{-x} x^n dx = n!. \quad (22)$$

De fato a integral é também bem definida se n é não inteiro e $n > -1$. Definimos em geral a “função gama” pela relação

$$\Gamma(n) \equiv \int_0^{+\infty} e^{-x} x^{n-1} dx, \quad n > 0. \quad (23)$$

Pela equação (22) segue que, se n é um inteiro positivo ($n \geq 1$),

$$\Gamma(n) = (n-1)!. \quad (24)$$

A equação (21) implica a relação geral ($n \geq 2$)

$$\Gamma(n) = (n-1)\Gamma(n-1). \quad (25)$$

Para $n = 1$ obtemos de (20) ou de (24)

$$\Gamma(1) = 1. \quad (26)$$

Notemos que, de (25) e (26), temos $\Gamma(2) = \Gamma(1) = 1$. Notemos também que

$$\Gamma(1/2) = \int_0^{+\infty} e^{-x} x^{-1/2} dx = 2 \int_0^{+\infty} e^{-y^2} dy,$$

em que fizemos $x = y^2$. Portanto, usando (19),

$$\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}. \quad (27)$$

Portanto,

$$\int_0^{+\infty} e^{-x} x^n dx = n! = \Gamma(n+1), \quad n > -1, \quad (28)$$

e ($a > 0$)

$$\int_0^{+\infty} e^{-ax} x^n dx = \frac{1}{a^{n+1}} \Gamma(n+1). \quad (29)$$

4 Cálculo de integrais da forma $\int_0^{+\infty} e^{-ax^2} x^n dx$

Começamos pelas integrais definidas. Definimos ($a > 0$)

$$I(n) \equiv \int_0^{+\infty} e^{-ax^2} x^n dx \quad , n \geq 0. \quad (30)$$

Fazendo a troca de variáveis $x \equiv a^{-1/2}y$ obtemos

$$I(n) = a^{-(n+1)/2} \int_0^{+\infty} e^{-y^2} y^n dy. \quad (31)$$

Para $n = 0$ temos

$$I(0) = a^{-1/2} \int_0^{+\infty} e^{-y^2} dy = a^{-1/2} \frac{\sqrt{\pi}}{2}, \quad (32)$$

em que usamos (19). Para $n = 1$ temos

$$I(1) = a^{-1} \int_0^{+\infty} e^{-y^2} y dy. \quad (33)$$

Podemos calcular a integral acima. Fazendo $u \equiv y^2$ temos

$$I(1) = \frac{1}{2} a^{-1} \int_0^{+\infty} e^{-u} du = -\frac{1}{2} a^{-1} [e^{-u}]_0^{+\infty} = -\frac{1}{2} a^{-1} [0 - 1] = \frac{1}{2} a^{-1}. \quad (34)$$

Notemos que todas as integrais $I(n)$ com n inteiro e $n > 1$ podem ser reduzidas às integrais $I(0)$ ou $I(1)$ derivando em relação ao parâmetro a . De fato,

$$\frac{\partial}{\partial a} \left(\int_0^{+\infty} e^{-ax^2} x^{n-2} dx \right) = - \int_0^{+\infty} e^{-ax^2} x^n dx,$$

logo,

$$I(n) = -\frac{\partial}{\partial a} I(n-2). \quad (35)$$

A equação acima é uma relação de recorrência que pode ser usada quantas vezes for necessário. Por exemplo,

$$I(2) = -\frac{\partial}{\partial a} I(0) = -\frac{\partial}{\partial a} \left(a^{-1/2} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \right) = \frac{\sqrt{\pi}}{4} a^{-3/2}.$$

Alternativamente, podemos fazer $u \equiv ax^2$ em (30), obtendo

$$I(n) = \frac{1}{2} a^{-(n+1)/2} \int_0^{+\infty} e^{-u} u^{(n-1)/2} du .$$

Pela definição (23) da função gama temos

$$I(n) \equiv \int_0^{+\infty} e^{-ax^2} x^n dx = \frac{1}{2} a^{-(n+1)/2} \Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right) . \quad (36)$$

Usando (25) e os valores de $\Gamma(1)$ e $\Gamma(1/2)$ dados em (26) e (27), podemos aplicar (36) para construir uma pequena tabela de integrais. Temos

$$\begin{aligned} I(0) &= \frac{1}{2} \sqrt{\pi} a^{-1/2} \\ I(1) &= \frac{1}{2} a^{-1} \\ I(2) &= \frac{1}{4} \sqrt{\pi} a^{-3/2} \\ I(3) &= \frac{1}{2} a^{-2} \\ I(4) &= \frac{3}{8} \sqrt{\pi} a^{-5/2} \\ I(5) &= a^{-3} . \end{aligned} \quad (37)$$

Podemos verificar que

$$\frac{\partial}{\partial a} \int_0^{\infty} e^{-ax^2} x^{n-2} dx = - \int_0^{\infty} e^{-ax^2} x^n dx , \quad n \geq 2 , \quad (38)$$

portanto é válida a relação de recorrência (problema 9)

$$I(n) = - \frac{\partial}{\partial a} I(n-2) , \quad n \geq 2 . \quad (39)$$

Vamos tratar agora das integrais indefinidas. Definimos

$$I(n) \equiv \int e^{-ax^2} x^n dx \quad , n \geq 0 . \quad (40)$$

Para $n = 0$ não temos a integral indefinida, mas podemos obter expressões para

$$I(n, x) = I_n(x) \equiv \int_0^x e^{-au^2} u^n du \quad , n \geq 0 . \quad (41)$$

Para $n = 0$,

$$I_0(x) \equiv \int_0^x e^{-au^2} du.$$

Usando a função erro [16], que na próxima seção veremos em mais detalhes,

$$Erf(x) \equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-u^2} du, \quad (42)$$

temos

$$I_0(x) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a}} Erf(\sqrt{ax}). \quad (43)$$

Para $n = 1$ temos

$$I_1(x) \equiv \int_0^x e^{-au^2} u du = \frac{1}{2a} (1 - e^{-ax^2}). \quad (44)$$

Podemos calcular I_2 integrando por partes,

$$I_2(x) \equiv \int_0^x e^{-au^2} u^2 du = -\frac{x}{2a} e^{-ax^2} + \frac{1}{2a} \int_0^x e^{-au^2} du. \quad (45)$$

Usando novamente a função erro,

$$I_2(x) = -\frac{x}{2a} e^{-ax^2} + \frac{\sqrt{\pi}}{4a^{3/2}} Erf(\sqrt{ax}). \quad (46)$$

Podemos calcular I_3 também usando integração por partes,

$$I_3(x) \equiv \int_0^x e^{-au^2} u^3 du = -\frac{x^2}{2a} e^{-ax^2} + \frac{1}{a} \int_0^x e^{-au^2} u du. \quad (47)$$

Calculando a integral obtemos

$$I_3(x) = -\frac{e^{-ax^2}}{2a^2} (1 + ax^2) + \frac{1}{2a^2}. \quad (48)$$

As integrais I_4, I_5, \dots , podem ser calculadas analogamente (problema 8),

$$\begin{aligned} I_4(x) &= -\frac{x e^{-ax^2}}{4a^2} (3 + 2ax^2) + \frac{3\sqrt{\pi}}{8a^{5/2}} Erf(\sqrt{ax}), \\ I_5(x) &= -\frac{e^{-ax^2}}{2a^3} (2 + 2ax^2 + a^2 x^4) + \frac{1}{a^3}. \end{aligned} \quad (49)$$

Notemos que $I_n(x)$ se reduz a $I(n)$ se $x \rightarrow \infty$. Também temos aqui a relação de recorrência (problema 9)

$$I_n(x) = -\frac{\partial}{\partial a} I_{n-2}(x), \quad n \geq 2. \quad (50)$$

5 A função erro

Já vimos que a integral indefinida

$$\int e^{-x^2} dx$$

não pode ser calculada em termos de funções elementares, mas

$$\int_0^\infty e^{-x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}.$$

Definimos a função erro por

$$Erf(y) \equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^y e^{-x^2} dx. \quad (51)$$

A função erro é normalizada, de modo que

$$\lim_{y \rightarrow \infty} Erf(y) = 1.$$

A figura 1.2 mostra o gráfico da função erro.

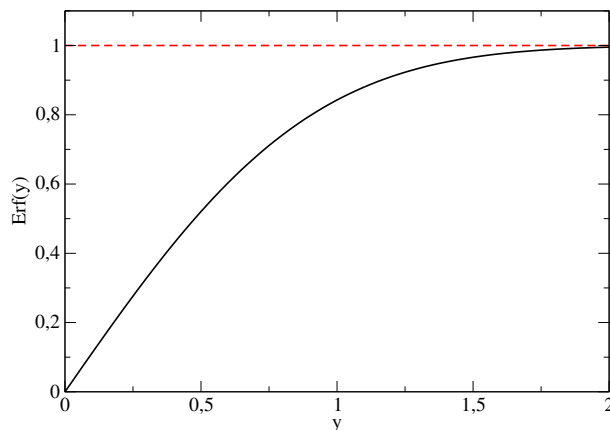


Figura 1.2. Gráfico da função erro.

Podemos obter expansões em série da função erro para y pequeno e y grande. Para y pequeno podemos usar

$$e^{-x^2} = 1 - x^2 + \frac{x^4}{2} - \dots,$$

obtendo

$$\begin{aligned} \operatorname{Erf}(y) &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^y \left(1 - x^2 + \frac{x^4}{2} - \dots \right) dx, \\ &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(y - \frac{y^3}{3} + \frac{y^5}{10} - \dots \right), \end{aligned} \quad (52)$$

expressão útil se y é pequeno.

Para y grande temos

$$\operatorname{Erf}(y) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\int_0^\infty e^{-x^2} dx - \int_y^\infty e^{-x^2} dx \right) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_y^\infty e^{-x^2} dx. \quad (53)$$

Usando integração por partes,

$$\begin{aligned} \int_y^\infty e^{-x^2} dx &= -\frac{1}{2} \int_y^\infty d(e^{-x^2}) \frac{1}{x}, \\ &= \frac{1}{2y} e^{-y^2} - \frac{1}{2} \int_y^\infty e^{-x^2} \frac{1}{x^2} dx, \\ &= \frac{1}{2y} e^{-y^2} - \frac{1}{2} \int_y^\infty \frac{d(e^{-x^2})}{-2x^3}, \\ &= \frac{1}{2y} e^{-y^2} - \frac{1}{4y^3} e^{-y^2} + \frac{3}{4} \int_y^\infty \frac{e^{-x^2}}{x^4} dx. \end{aligned} \quad (54)$$

Prosseguindo com esse processo obtemos

$$\operatorname{Erf}(y) = 1 - \frac{e^{-y^2}}{\sqrt{\pi}y} \left(1 - \frac{1}{2y^2} + \dots \right), \quad y \gg 1. \quad (55)$$

6 A fórmula de Stirling

Temos, por definição,

$$n! = 1.2 \dots (n-1).n,$$

logo

$$\begin{aligned}\ln n! &= \ln 1 + \ln 2 + \cdots + \ln n, \\ &= \sum_{i=1}^n \ln i \cong \int_1^n \ln x \, dx = [x \ln x - x]_1^n, \\ &\cong n \ln n - n.\end{aligned}$$

Podemos obter uma aproximação melhor para $n!$. Vimos que

$$n! = \int_0^{\infty} x^n e^{-x} dx.$$

O integrando, $f = x^n e^{-x}$, possui um máximo em $x = n$. Expandindo $\ln f$ em torno de $x = n$,

$$\ln f = n \ln n - n - \frac{\xi^2}{2n},$$

com $\xi = x - n$. Portanto,

$$f = n^n e^{-n} e^{-\xi^2/2n}, \quad \xi \ll n.$$

Substituindo na integral,

$$n! = \int_0^{+\infty} x^n e^{-x} dx = \int_{-n}^{+\infty} n^n e^{-n} e^{-\xi^2/2n} d\xi,$$

ou, como $-n \rightarrow -\infty$,

$$n! = \int_{-\infty}^{+\infty} n^n e^{-n} e^{-\xi^2/2n} d\xi.$$

Calculando a integral,

$$n! = n^n e^{-n} \sqrt{2n\pi}, \quad n \gg 1,$$

logo

$$\ln n! = n \ln n - n + \frac{1}{2} \ln(2\pi n), \quad n \gg 1. \quad (56)$$

7 A função delta de Dirac

A função delta de Dirac é definida por

$$\begin{cases} \delta(x - x_0) = 0, & x \neq 0, \\ \delta(x - x_0) \rightarrow \infty, & x \rightarrow x_0, \end{cases} \quad (57)$$

com

$$\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} \delta(x - x_0) dx = 1. \quad (58)$$

Com essas propriedades temos, para uma função qualquer $f(x)$,

$$\int_A^B f(x) \delta(x - x_0) dx = f(x_0) \int_A^B \delta(x - x_0) dx, \quad (59)$$

portanto,

$$\int_A^B f(x) \delta(x - x_0) dx = \begin{cases} f(x_0), & A < x_0 < B, \\ 0, & \text{outro intervalo.} \end{cases} \quad (60)$$

Algumas representações analíticas de $\delta(x)$ ($\gamma \rightarrow 0$):

$$1) \delta(x) = \begin{cases} \frac{1}{\gamma}, & -\gamma/2 < x < \gamma/2, \\ 0, & \text{outro intervalo;} \end{cases} \quad (61)$$

$$2) \delta(x) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma}{x^2 + \gamma^2}; \quad (62)$$

$$3) \delta(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-x^2/2\gamma^2}}{\gamma}. \quad (63)$$

A representação mais conveniente e importante, contudo, é uma envolvendo uma integral. Partimos do resultado

$$\int_{-\pi}^{\pi} e^{in\phi} d\phi = \begin{cases} 2\pi, & n = 0, \\ \frac{e^{in\phi}}{in} \Big|_{-\pi}^{\pi} = 0, & n \neq 0, \end{cases}$$

com o qual podemos escrever

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{in\phi} d\phi = \delta_{n,0}, \quad (64)$$

em que o lado esquerdo é o “símbolo delta de Kronecker”,

$$\delta_{n,m} = \begin{cases} 1, & \text{sen} = m, \\ 0, & \text{sen} \neq m. \end{cases} \quad (65)$$

É o análogo para variáveis discretas da função delta de Dirac $\delta(x - x_0)$ para variáveis contínuas.

Para fazer a conexão entre variáveis discretas e contínuas explícita, escolhemos um número grande L tal que

$$x \equiv \frac{2\pi n}{L}, \quad (66)$$

de modo que essencialmente todos os valores possíveis da variável contínua x são obtidos à medida que n assume todos os valores inteiros possíveis. A relação acima associa a cada inteiro n o intervalo de x dado por

$$\frac{2\pi}{L} \left(n - \frac{1}{2} \right) < x < \frac{2\pi}{L} \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

de magnitude

$$\Delta x = \frac{2\pi}{L}, \quad (67)$$

que se torna infinitesimalmente pequeno no limite $L \rightarrow \infty$.

De acordo com a definição da delta de Kronecker temos então

$$\delta_{n,0} = \begin{cases} 1, & \text{se } -\frac{1}{2}\Delta x < x < \frac{1}{2}\Delta x, \\ 0, & \text{outro intervalo.} \end{cases} \quad (68)$$

Pela eq.(61) podemos escrever

$$\delta(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\delta_{n,0}}{\Delta x}, \quad (69)$$

portanto,

$$\begin{aligned} \delta(x) &= \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi\Delta x} \int_{-\pi}^{\pi} e^{in\phi} d\phi, \\ &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \frac{L}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{(iLx/2\pi)\phi} d\phi. \end{aligned}$$

Fazemos agora a troca de variáveis

$$k \equiv \frac{L}{2\pi}\phi,$$

de modo que

$$d\phi \equiv \frac{2\pi}{L}dk,$$

e

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk. \quad (70)$$

Esta é representação integral para a função delta de Dirac. De maneira mais geral podemos escrever

$$\delta_{n,m} = \delta_{m,n} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{i\phi(n-m)} d\phi, \quad (71)$$

$$\delta(x - x_0) = \delta(x_0 - x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-x_0)} dk. \quad (72)$$

8 A desigualdade $\ln x \leq x - 1$

Vamos comparar $\ln x$ com x para valores positivos de x . Consideremos a função

$$f(x) \equiv x - \ln x. \quad (73)$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{Para } x \rightarrow 0, \quad \ln x \rightarrow -\infty, \quad \text{logo } f(x) \rightarrow \infty. \\ \text{Para } x \rightarrow \infty, \quad \ln x \ll x, \quad \text{logo } f(x) \rightarrow \infty. \end{array} \right\}$$

Notemos que

$$\frac{df}{dx} = 1 - \frac{1}{x} = 0, \text{ para } x = 1,$$

quando $f = 1$. Além disso,

$$\frac{d^2f}{dx^2} = \frac{1}{x^2} = 1 > 0, \text{ para } x = 1,$$

logo o extremo é um ponto de mínimo. O gráfico da função $f(x)$ é mostrado na figura 1.3.

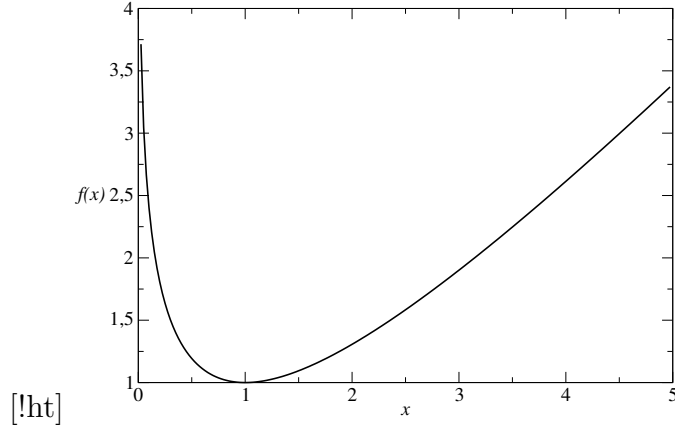


Figura 1.3. Gráfico da função $f(x) = x - \ln x$.

Como a função possui apenas um extremo,

$$f(x) \geq f(1) = 1, \quad (74)$$

ou

$$\ln x \leq x - 1. \quad (75)$$

9 Cálculo de $I_m \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^x}{(e^x+1)^2} x^m dx$

Ao estudarmos sistemas de Fermi veremos a integral,

$$I_m \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^x}{(e^x + 1)^2} x^m dx. \quad (76)$$

Notemos primeiro que,

$$\frac{e^x}{(e^x + 1)^2} = \frac{e^x}{(e^x + 1)(e^x + 1)} = \frac{1}{(e^x + 1)(1 + e^{-x})},$$

é uma função par de x . Se m é ímpar em ..., então $I_m = 0$,

$$I_m = 0, \quad m = 2k + 1, \quad k = 1, 2, \dots \quad (77)$$

Precisamos calcular I_m apenas para m par. Para $m = 0$,

$$I_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^x}{(e^x + 1)^2} dx = -\frac{1}{e^x + 1} \Big|_{-\infty}^{+\infty} = 1. \quad (78)$$

Como precisamos calcular I_m para m par, escrevemos,

$$I_m = 2 \int_0^{+\infty} \frac{e^x}{(e^x + 1)^2} x^m dx, \quad m = 2, 4, 6, \dots$$

Integrando por partes,

$$I_m = -\frac{2x^m}{e^x + 1} \Big|_0^{+\infty} + 2m \int_0^{+\infty} \frac{x^{m-1}}{e^x + 1} dx.$$

O primeiro termo se anula, e podemos substituir no segundo a relação,

$$\frac{1}{1 + e^{-x}} = \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j e^{-jx}.$$

Assim,

$$I_m = 2m \int_0^{+\infty} \frac{x^{m-1}}{e^x + 1} dx = 2m \int_0^{+\infty} x^{m-1} \frac{e^{-x}}{1 + e^{-x}} dx,$$

$$I_m = 2m \int_0^{+\infty} x^{m-1} e^{-x} \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j e^{-jx} dx,$$

$$I_m = 2m \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j \int_0^{+\infty} x^{m-1} e^{-x(j+1)} dx,$$

$$I_m = 2m \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^{j-1} \int_0^{+\infty} x^{m-1} e^{-jx} dx,$$

em que apenas mudamos o início da soma para $j = 1$. Transformando variáveis na integral, $y = jx$,

$$\begin{aligned} \int_0^{+\infty} x^{m-1} e^{-jx} dx &= \int_0^{+\infty} \left(\frac{y}{j}\right)^{m-1} e^{-y} \frac{dy}{j}, \\ &= j^{-m} \int_0^{+\infty} y^{m-1} e^{-y} dy, \\ &= j^{-m} \Gamma(m) = j^{-m} (m-1)!, \end{aligned}$$

pois m é inteiro. Assim,

$$I_m = 2m! \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^{j-1} j^{-m}.$$

Definindo a série,

$$\eta(m) \equiv \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^{j-1} j^{-m}, \quad (79)$$

temos então, para m par,

$$I_m \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^x}{(e^x + 1)^2} x^m dx = 2m! \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^{j-1} j^{-m} = 2m! \eta(m). \quad (80)$$

Podemos reescrever a série η em termos da função zeta de Riemann,

$$\zeta(x) \equiv \frac{1}{1^x} + \frac{1}{2^x} + \frac{1}{3^x} + \dots = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j^x}. \quad (81)$$

Temos,

$$\eta(m) = \frac{1}{1^m} - \frac{1}{2^m} + \frac{1}{3^m} - \frac{1}{4^m} + \frac{1}{5^m} + \dots$$

Somando e subtraindo a série com denominador de base par e rearranjando, obtemos a função zeta de Riemann menos duas vezes a série com base par,

$$\eta(m) = \zeta(m) - 2 \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{(2j)^m},$$

$$\eta(m) = \zeta(m) - 2 \frac{1}{2^m} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j^m},$$

$$\eta(m) = \zeta(m) - \frac{1}{2^{m-1}} \zeta(m),$$

$$\eta(m) = \left[1 - \frac{1}{2^{m-1}} \right] \zeta(m).$$

Podemos então escrever,

$$I_m = 2m! \eta(m) = 2m! \left[1 - \frac{1}{2^{m-1}} \right] \zeta(m). \quad (82)$$

O problema de calcular I_m fica então reduzido ao cálculo da série η ou ζ .

Cálculo da série η ou ζ usando séries de Fourier

A série de Fourier para uma função $f(x)$ no intervalo $-\pi \leq x \leq +\pi$ é [4,18,19,15],

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos nx + b_n \operatorname{sennx}) ,$$

com,

$$a_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} f(x) \cos nx dx ,$$

$$b_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} f(x) \operatorname{sennx} dx .$$

Vamos calcular a série de Fourier para a função x^2 . Temos,

$$a_0 = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} f(x) dx = \frac{2\pi^2}{3} .$$

Como x^2 é uma função par,

$$a_n = \frac{2}{\pi} \int_0^{+\pi} f(x) \cos nx dx ,$$

$$b_n = 0 .$$

Calculando a_n para $n = 1, 2, 3, \dots$,

$$a_n = \frac{2}{\pi} \int_0^{+\pi} x^2 \cos nx dx .$$

Usando a integral indefinida,

$$\int x^2 \cos ax dx = \frac{2x}{a^2} \cos ax + \left(\frac{x^2}{a} - \frac{2}{a^3} \right) \operatorname{senax} ,$$

temos,

$$\begin{aligned} \int_0^{+\pi} x^2 \cos nx dx &= \left[\frac{2x}{n^2} \cos nx + \left(\frac{x^2}{n} - \frac{2}{n^3} \right) \operatorname{sennx} \right]_0^{+\pi} , \\ &= \frac{2\pi}{n^2} \cos n\pi + \left(\frac{\pi^2}{n} - \frac{2}{n^3} \right) \operatorname{senn}\pi , \\ &= \frac{2\pi}{n^2} (-1)^n . \end{aligned}$$

Portanto,

$$a_n = \frac{4}{n^2} (-1)^n ,$$

e a série de Fourier para $f(x) = x^2$ é,

$$x^2 = \frac{\pi^2}{3} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4}{n^2} (-1)^n \cos nx.$$

Fazendo $x = \pi$,

$$\pi^2 = \frac{\pi^2}{3} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4}{n^2} (-1)^n \cos n\pi,$$

$$\frac{2\pi^2}{3} = 4 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2},$$

$$\frac{\pi^2}{3} = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2},$$

ou,

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{6}. \quad (83)$$

A soma acima é sobre todos os números naturais, e também é igual à $\zeta(2)$. Escrevendo os termos para números pares e ímpares separadamente temos,

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{6},$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n)^2} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)^2} = \frac{\pi^2}{6}.$$

Vemos que o primeiro termo é 1/4 da soma total. Assim,

$$\frac{1}{4} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)^2} = \frac{\pi^2}{6},$$

$$\frac{1}{4} \frac{\pi^2}{6} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)^2} = \frac{\pi^2}{6},$$

e,

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)^2} = \frac{3\pi^2}{4 \cdot 6} = \frac{\pi^2}{8}, \quad (84)$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n)^2} = \frac{1}{4} \frac{\pi^2}{6} = \frac{\pi^2}{24}. \quad (85)$$

Podemos agora calcular η para $m = 2$,

$$\begin{aligned}\eta(2) &\equiv \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^{j-1} j^{-2}, \\ \eta(2) &= 1 - \frac{1}{2^2} + \frac{1}{3^2} + \dots, \\ \eta(2) &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)^2} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n)^2}, \\ \eta(2) &= \frac{\pi^2}{8} - \frac{\pi^2}{24} = \frac{\pi^2}{12}.\end{aligned}$$

Portanto,

$$I_2 = 2 \cdot 2! \eta(2) = 4 \frac{\pi^2}{12} = \frac{\pi^2}{3}. \quad (86)$$

Vamos agora calcular a série de Fourier para a função x^4 . Temos,

$$a_0 = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} f(x) dx = \frac{2\pi^4}{5}.$$

Como x^4 é uma função par, também temos aqui $b_n = 0$. Calculando a_n para $n = 1, 2, 3, \dots$,

$$a_n = \frac{2}{\pi} \int_0^{+\pi} x^4 \cos nx dx.$$

Usando a integral indefinida,

$$\begin{aligned}\int x^m \cos ax dx &= \frac{x^m}{a} \operatorname{sen} ax + \frac{mx^{m-1}}{a^2} \cos ax \\ &\quad - \frac{m(m-1)}{a^2} \int x^{m-2} \cos ax dx,\end{aligned}$$

temos,

$$\begin{aligned}
\int_0^{+\pi} x^4 \cos nx dx &= \left[\frac{x^4}{n} \operatorname{senn}x + \frac{4x^3}{n^2} \cos nx \right. \\
&\quad \left. - \frac{4(3)}{n^2} \int_0^{+\pi} x^2 \cos nx dx \right]_0^{+\pi}, \\
&= \frac{4\pi^3}{n^2} (-1)^n - \frac{12}{n^2} \int_0^{+\pi} x^2 \cos nx dx, \\
&= \frac{4\pi^3}{n^2} (-1)^n - \frac{24\pi}{n^4} (-1)^n.
\end{aligned}$$

Portanto,

$$a_n = \frac{8\pi^2}{n^2} (-1)^n - \frac{48}{n^4} (-1)^n,$$

e a série de Fourier para $f(x) = x^4$ é,

$$x^4 = \frac{\pi^4}{5} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{8\pi^2}{n^2} (-1)^n - \frac{48}{n^4} (-1)^n \right) \cos nx.$$

Fazendo $x = \pi$,

$$\begin{aligned}
\pi^4 &= \frac{\pi^4}{5} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{8\pi^2}{n^2} (-1)^n - \frac{48}{n^4} (-1)^n \right) \cos n\pi, \\
\pi^4 &= \frac{\pi^4}{5} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{8\pi^2}{n^2} (-1)^n - \frac{48}{n^4} (-1)^n \right) (-1)^n, \\
\pi^4 &= \frac{\pi^4}{5} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{8\pi^2}{n^2} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{48}{n^4}.
\end{aligned}$$

Substituindo ...,

$$\begin{aligned}
\pi^4 &= \frac{\pi^4}{5} + \frac{4\pi^4}{3} - 48 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4}, \\
48 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4} &= \frac{8\pi^4}{15},
\end{aligned}$$

e finalmente,

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4} = \frac{\pi^4}{90}. \quad (87)$$

A soma acima é sobre todos os números naturais, e também é igual à $\zeta(4)$. Escrevendo os termos para números pares e ímpares separadamente temos,

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4} = \frac{\pi^4}{90},$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n)^4} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)^4} = \frac{\pi^4}{90}.$$

Vemos que o primeiro termo é $1/16$ da soma total. Assim,

$$\frac{1}{16} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)^4} = \frac{\pi^4}{90},$$

$$\frac{1}{16} \frac{\pi^4}{90} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)^4} = \frac{\pi^4}{90},$$

e,

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)^4} = \frac{15 \pi^4}{16 \cdot 90} = \frac{\pi^4}{96}, \quad (88)$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n)^4} = \frac{1}{16} \frac{\pi^4}{90} = \frac{\pi^4}{1440}, \quad (89)$$

$$(90)$$

Podemos agora calcular η para $m = 4$,

$$\eta(4) \equiv \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^{j-1} j^{-4},$$

$$\eta(4) = 1 - \frac{1}{2^4} + \frac{1}{3^4} + \dots,$$

$$\eta(4) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)^4} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n)^4},$$

$$\eta(4) = \frac{15 \pi^4}{16 \cdot 90} - \frac{1}{16} \frac{\pi^4}{90} = \frac{14 \pi^4}{16 \cdot 90} = \frac{7 \pi^4}{8 \cdot 90}.$$

Portanto,

$$I_4 = 2 \cdot 4! \eta(4) = 2 \cdot 4! \frac{7 \pi^4}{8 \cdot 90},$$

$$I_4 = \frac{7 \pi^4}{15}. \quad (91)$$

Vamos agora calcular a série de Fourier para a função x^6 . Temos,

$$a_0 = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} f(x) dx = \frac{2\pi^6}{7}.$$

Como x^6 é uma função par, também temos aqui $b_n = 0$. Calculando a_n para $n = 1, 2, 3, \dots$,

$$a_n = \frac{2}{\pi} \int_0^{+\pi} x^6 \cos nx dx.$$

Usando a integral indefinida,

$$\int x^m \cos ax dx = \frac{x^m}{a} \operatorname{sen} ax + \frac{mx^{m-1}}{a^2} \cos ax - \frac{m(m-1)}{a^2} \int x^{m-2} \cos ax dx,$$

temos,

$$\begin{aligned} \int_0^{+\pi} x^6 \cos nx dx &= \left[\frac{x^6}{n} \operatorname{sen} nx + \frac{6x^5}{n^2} \cos nx - \frac{6(5)}{n^2} \int x^4 \cos nx dx \right]_0^{+\pi}, \\ &= \frac{6\pi^5}{n^2} (-1)^n - \frac{30}{n^2} \int_0^{+\pi} x^4 \cos nx dx, \\ &= \frac{6\pi^5}{n^2} (-1)^n - \frac{30}{n^2} \left[\frac{4\pi^3}{n^2} (-1)^n - \frac{24\pi}{n^4} (-1)^n \right], \\ &= \frac{6\pi^5}{n^2} (-1)^n - \frac{30 \cdot 4\pi^3}{n^4} (-1)^n + \frac{30 \cdot 24\pi}{n^6} (-1)^n. \end{aligned}$$

Portanto,

$$a_n = \frac{2 \cdot 6\pi^4}{n^2} (-1)^n - \frac{2 \cdot 30 \cdot 4\pi^2}{n^4} (-1)^n + \frac{2 \cdot 30 \cdot 24}{n^6} (-1)^n,$$

e a série de Fourier para $f(x) = x^6$ é,

$$\begin{aligned} x^6 &= \frac{\pi^6}{7} + \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{2 \cdot 6\pi^4}{n^2} (-1)^n - \frac{2 \cdot 30 \cdot 4\pi^2}{n^4} (-1)^n + \frac{2 \cdot 30 \cdot 24}{n^6} (-1)^n \right) \cos nx. \end{aligned}$$

Fazendo $x = \pi$,

$$\begin{aligned}
\pi^6 &= \frac{\pi^6}{7} + \\
&\quad + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{2 \cdot 6\pi^4}{n^2} (-1)^n - \frac{2 \cdot 30 \cdot 4\pi^2}{n^4} (-1)^n + \frac{2 \cdot 30 \cdot 24}{n^6} (-1)^n \right) \cos n\pi, \\
\pi^6 &= \frac{\pi^6}{7} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{2 \cdot 6\pi^4}{n^2} - \frac{2 \cdot 30 \cdot 4\pi^2}{n^4} + \frac{2 \cdot 30 \cdot 24}{n^6} \right), \\
\pi^6 &= \frac{\pi^6}{7} + 2 \cdot 6\pi^4 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} - 2 \cdot 30 \cdot 4\pi^2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4} + 2 \cdot 30 \cdot 24 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^6},
\end{aligned}$$

Substituindo ...,

$$\begin{aligned}
\pi^6 &= \frac{\pi^6}{7} + 2 \cdot 6\pi^4 \left(\frac{\pi^2}{6} \right) - 2 \cdot 30 \cdot 4\pi^2 \left(\frac{\pi^4}{90} \right) + 2 \cdot 30 \cdot 24 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^6}, \\
\pi^6 &= \frac{\pi^6}{7} + 2\pi^6 - \frac{8\pi^6}{3} + 2 \cdot 30 \cdot 24 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^6}, \\
2 \cdot 30 \cdot 24 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^6} &= \pi^6 - \frac{\pi^6}{7} - 2\pi^6 + \frac{8\pi^6}{3} = \frac{32\pi^6}{21},
\end{aligned}$$

e finalmente,

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^6} = \frac{\pi^6}{945}. \quad (92)$$

A soma acima é sobre todos os números naturais, e também é igual à $\zeta(6)$. Escrevendo os termos para números pares e ímpares separadamente temos,

$$\begin{aligned}
\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^6} &= \frac{\pi^6}{945}, \\
\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n)^6} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)^6} &= \frac{\pi^6}{945}.
\end{aligned}$$

Vemos que o primeiro termo é $1/64 = 1/2^6$ da soma total. Assim,

$$\begin{aligned}
\frac{1}{64} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^6} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)^6} &= \frac{\pi^6}{945}, \\
\frac{1}{64} \frac{\pi^6}{945} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)^6} &= \frac{\pi^6}{945},
\end{aligned}$$

e,

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)^6} = \frac{63}{64} \frac{\pi^6}{945} = \frac{\pi^6}{960}, \quad (93)$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n)^6} = \frac{1}{64} \frac{\pi^6}{945} = \frac{\pi^6}{60480}. \quad (94)$$

Podemos agora calcular η para $m = 6$,

$$\begin{aligned} \eta(6) &\equiv \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^{j-1} j^{-6}, \\ \eta(6) &= 1 - \frac{1}{2^6} + \frac{1}{3^6} + \dots, \\ \eta(6) &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)^6} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n)^6}, \\ \eta(6) &= \frac{63}{64} \frac{\pi^6}{945} - \frac{1}{64} \frac{\pi^6}{945} = \frac{62}{64} \frac{\pi^6}{945} = \frac{31\pi^6}{30240}. \end{aligned}$$

Portanto,

$$\begin{aligned} I_6 &= 2 \cdot 6! \eta(6) = 2 \cdot 6! \frac{31\pi^6}{30240}, \\ I_6 &= \frac{31\pi^6}{21}. \end{aligned} \quad (95)$$

References

- [1] F. Reif, *Fundamentals of statistical and thermal physics*, McGraw-Hill, Singapore (1965).
- [2] T. L. Hill, *Introduction to Statistical Thermodynamics*, Dover, New York (1986).
- [3] T. L. Hill, *Statistical Mechanics, Principles and Selected Applications*, Dover, New York (1956).
- [4] M. W. Zemansky, *Heat and Thermodynamics*, 5th ed., McGraw-Hill Kogakusha Ltd., Tokyo (1968).
- [5] W. Greiner, L. Neise, H. Stöcker, *Thermodynamics and Statistical Mechanics*, Springer-Verlag, New York (1995).
- [6] A. Sommerfeld, *Thermodynamics and Statistical Mechanics*, Academic Press, New York and London (1964).
- [7] E. Fermi, *Thermodynamics*, 2nd ed., Dover, New York (1952).

- [8] E. Schrödinger, *Statistical Thermodynamics*, Dover, New York (1952).
- [9] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Statistical Physics*, Addison-Wesley Publishing Company, Reading, Mass. (1958).
- [10] R. Gautreau, W. Savin, *Schaum's Outline of Theory and Problems of Modern Physics*, 2nd. ed., McGraw-Hill, New York (1999).
- [11] K. Huang, *Statistical Mechanics*, 2nd ed., John Wiley & Sons, Singapore (1987).
- [12] H. B. Callen, *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*, 2nd. ed., John Wiley & Sons, New York (1985).
- [13] W. J. Moore, *Físico-Química*, LTC e EDUSP, Rio de Janeiro (1968).
- [14] R. K. Wangsness, *Electromagnetic Fields*, 2nd ed., John Wiley & Sons, New York (1986).
- [15] A. Sommerfeld, *Partial Differential Equations in Physics*, Academic Press, New York and London (1964s).
- [16] I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik, *Table of Integral, Series, and Products*, 5th ed., Academic Press, San Diego (1994).
- [17] M. R. Spiegel, S. Lipschutz, J. Liu, *Schaum's Outline of Mathematical Handbook of Formulas and Tables*, 3rd ed., McGraw-Hill, New York (2009).
- [18] M. R. Spiegel, *Schaum's Outline of Fourier Analysis with Applications to Boundary Value Problems*, McGraw-Hill, New York (1974).
- [19] M. R. Spiegel, *Schaum's Outline of Advanced Mathematics for Engineers and Scientists*, McGraw-Hill, New York (1971).