GÉNESIS HISTÓRICA DE LA ESTADÍSTICA DE FERMI-DIRAC

GEMMA MARÍA FERNANDEZ CRISTÓBAL

1.- Introducción.

Es conocido por investigadores, científicos y estudiantes, incluyendo también un amplio sector de la población, que "el lenguaje de las ciencias son las matemáticas". Gauss citó una frase célebre que ha pasado a la posteridad:

Las Matemáticas es la reina de las ciencias y la teoría de números es la reina de las Matemáticas.

Una de las áreas de las matemáticas sobre las que en ocasiones los investigadores basan parte de los resultados obtenidos en su observación es la estadística. Para algunos ha significado su herramienta con la cual le dan el valor del rigor científico, sin considerar que gran parte de esta área está basada en una realidad: los errores teóricos y los que el investigador pueda cometer al tomar una mala muestra para sus observaciones.

La naturaleza de la estadística se basa en la observación. Sin embargo, la elección de los elementos que van a representar su análisis no tienen, en la mayoría de veces, una metodología basada sobre la teoría generada en la propia estadística; la mayoría de ocasiones la elección de los elementos que intervienen en el estudio estadístico es muy subjetivo, ya que depende de la "experiencia generada por el investigadores", la cual en algunas ocasiones puede arrojar resultados confiables, pero no en todos. Por ello algunos investigadores tratan de descartar su uso y utilizar otro tipo de experimentos que eviten el uso de estadística.

Sobre esto último, Rutherford dijo:

Si tu experimento necesita estadística, deberías haber hecho uno mejor.

2.- Un poco de historia.

La representación de información ha tenido desde siempre un factor importante en la forma de la vida social del hombre, así podemos analizar que el hombre primitivo utilizaba símbolos para representar la información que obtenía, era clásico representar mediante símbolos la información del número de objetos que tenía o de los miembros de los primeros grupos sociales.

Desde tiempos muy remotos se ha intentado dar una explicación mediante números a cualquier hecho científico de la historia, pero no es hasta mediados del siglo XVII cuando se comienza a gestar el término con el que hoy conocemos "estadística".

Fue el alemán Kollegen Hermann Conring a quien se le atribuye el intentar describir los hechos del estado. Él mejora y perfecciona la sistematización de la información contenida en datos. Sin embargo, es su seguidor Godofredo Achenwall quien le da el nombre de "estadística", cuyo origen etimológico deriva de la palabra estado en alemán, y de Italia, *status*, que significa situación, posición o estado. Compatible además con su acepción en griego *statera* cuyo significado conduce a algunas actividades de medida realizado por el estado como lo es balanza o medida.

Con el paso de los años, la estadística tuvo que emigrar a nuevas formas de pensamiento, debido al cambio de las matemáticas. Con el tiempo, resultará imprescindible en áreas como la sociología, la biología (con los trabajos de Mendel y de su primo Galton), la física (con los trabajos de Maxwell, Boltzmann, Fermi, Dirac, Bose, Einstein, Schödinger, entre otros), área en la que al querer explicar la termodinámica de las partículas y la necesidad de hacer uso la mecánica cuántica formó lo que ahora se conoce como mecánica estadística (estadística de Bose-Einstein y la estadística de Fermi-Dirac, la primera para partículas de espín entero como los fotones entre otros y las segunda para las partículas de espín fraccionarios como los electrones).

3.- Principio de Exclusión de Pauli.

En 1925, el físico cuántico Wolfgang Pauli descubrió el "principio de exclusión", principio que sirvió como base de la Estadística de Fermi-Dirac. Establece que:

"Dos electrones en la corteza de un átomo no pueden tener al mismo tiempo los mismos números cuánticos".

En física cuántica, el principio de exclusión es, para los científicos de la especialidad, una regla que establece que dos partículas en el mismo estado (idéntico espín, momento angular, etc.) no pueden existir en el mismo lugar y al mismo tiempo; no pueden tener ambas la misma posición y la misma velocidad, dentro de los límites fijados por el principio de incertidumbre.

Aplicando esta regla, los físicos han logrado una importante distinción en la categoría de las partículas: partículas que están sujetas a la exclusión de Pauli (fermiones) y partículas que no sometidas a ello (bosones).

Por otra parte, a través del principio de exclusión se puede explicar por qué las partículas materiales no colapsan en un estado de casi extrema densidad, bajo la influencia de las fuerzas producidas por las partículas de espín 1, 1½ y 2: si las partículas materiales están casi en la misma posición, deben tener entonces velocidades diferentes, lo que significa que no estarán en la misma posición durante mucho tiempo.

Sin la existencia del principio de exclusión, se hace difícil imaginar cuál sería la estructura de la naturaleza.

La derivación del principio de Pauli es sencilla, si nos basamos en el artículo de partículas idénticas. Los fermiones de la misma especie forman sistemas con estados totalmente antisimétricos, lo que para el caso de dos partículas significa que:

$$|\psi\psi'\rangle = -|\psi'\psi\rangle$$

La permutación de una partícula por otra invierte el signo de la función que describe al sistema). Si las dos partículas ocupan el mismo estado cuántico $|\psi\rangle$, el estado del sistema completo es $|\psi\psi\rangle$. Entonces,

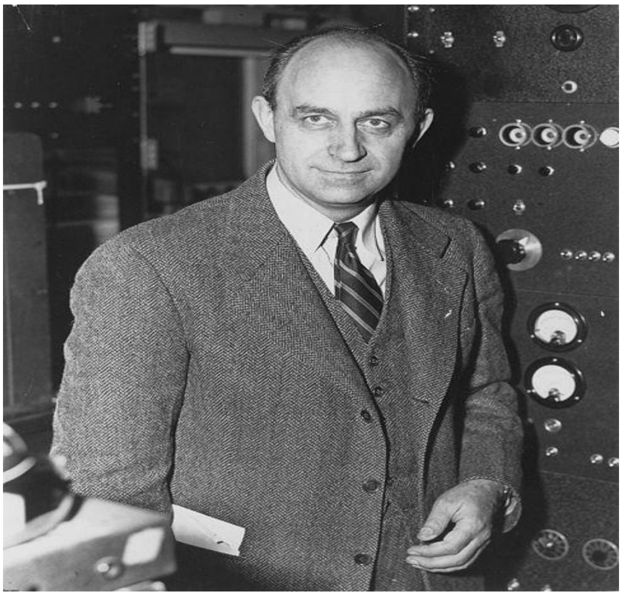
$$|\psi\psi\rangle = -|\psi\psi\rangle = 0 \text{ (ket nulo)}$$

El estado no puede darse. Esto se puede generalizar al caso de más de dos partículas.

4.- Papel de Enrico Fermi y Paul Dirac.

Fermi y Dirac derivaron la estadística objeto de nuestro estudio, la Estadística de Fermi-Dirac. Lleva el nombre de ambos debido a que fue descubierta por cada uno de ellos de forma independiente. Según Dirac, fue estudiada por primera vez por Fermi (de ahí que sea definida en numerosas publicaciones como Estadística de Fermi, solamente), y a las partículas correspondientes se las denominó fermiones, definiéndose como uno de los dos tipos básicos de partículas que existen en la naturaleza (el otro tipo son los bosones). Los fermiones se caracterizan por tener spin semientero (1/2,3/2...).

APUNTES SOBRE LA VIDA DE ENRICO FERMI (1901-1954).-



Enrico Fermi (Roma, 29 de septiembre de 1901 – Chicago, 28 de noviembre de 1954) fue un físico italiano conocido por el desarrollo del primer reactor nuclear y sus contribuciones al desarrollo de la teoría cuántica, la física nuclear y de partículas, y la mecánica estadística. En 1938 Fermi recibió el Premio Nobel de Física por sus trabajos sobre radioactividad inducida producida por los neutrones y por las reacciones nucleares provocadas por neutrones lentos, y es considerado uno de los científicos más destacados del siglo XX.

En 1926, Fermi descubrió las leyes estadísticas, conocidas hoy en día como la “estadística de Fermi”, por la cual las partículas son gobernadas conforme al principio de exclusión de Pauli. Tales partículas se llaman ahora fermiones en su honor.

Fue nombrado profesor de la cátedra de física teórica de la universidad de Roma, un puesto que conservó hasta 1938 en que, inmediatamente después de recibir el premio Nobel, escapa a Estados Unidos para evitar el fascismo de Mussolini y, con ello, la persecución de su esposa, que era judía.

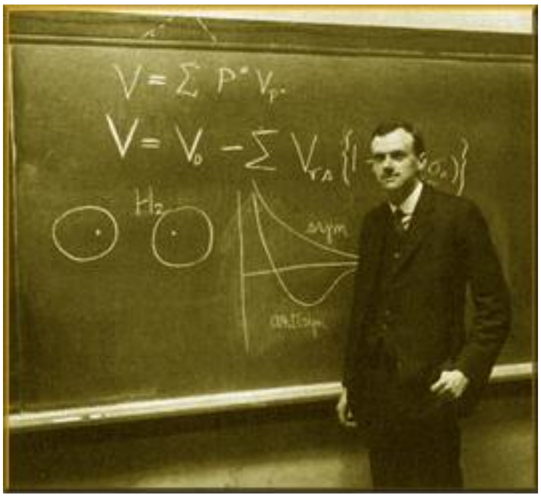
En Estados Unidos continuó su carrera, donde desarrolló plenamente sus estudios y descubrimiento.

Sus grandes contribuciones científicas fueron:

-Estadística de Fermi-Dirac.
-Teoría de la desintegración β.
-Producción de nuevos elementos radiactivos usando fuentes de neutrones.
-Primera reacción nuclear controlada.
-Construcción de la primera bomba atómica.

Se lo reconoce como un físico con grandes capacidades tanto en el plano teórico como experimental, se dice de él que es el último físico completo. El elemento Fermio, que fuera producido en forma sintética en 1952, fue nombrado en su honor.

APUNTES SOBRE LA VIDA DE PAUL ADRIEN MAURICE DIRAC (1902-1984).-



Paul Adrien Maurice Dirac, (Bristol, 8 de agosto de 1902 – Florida, 20 de octubre de 1984) fue un físico teórico británico que contribuyó de forma fundamental al desarrollo de la mecánica cuántica y la electrodinámica cuántica. Ocupó la Cátedra Lucasiana de matemáticas de la Universidad de Cambridge, si bien pasó los últimos diez años de su vida en la Universidad Estatal de Florida. Entre otros descubrimientos formuló la ecuación de Dirac que describe el comportamiento de los fermiones y con la cual predijo la existencia de la antimateria. Dirac compartió el premio Nobel de física de 1933 con Erwin Schrödinger, "por el descubrimiento de nuevas formas productivas de la teoría atómica."

Dirac es ampliamente considerado como uno de los físicos más importantes de todos los tiempos. Fue uno de los fundadores de la mecánica cuántica y la electrodinámica cuántica, siendo considerado por algunos físicos como el físico más relevante del siglo XX.

Sus primeras aportaciones incluyen el cálculo moderno de operadores para la mecánica cuántica, que él llamó Teoría de Transformaciones, así como una versión temprana de la formulación de integrales de camino. También creó un formalismo de muchos cuerpos para la mecánica cuántica que permitía que cada partícula tuviera su propio tiempo.

Su ecuación de ondas relativista para el electrón fue el primer planteamiento exitoso de una mecánica cuántica relativista. Dirac fundó la teoría cuántica de campos con su interpretación de la ecuación de Dirac como una ecuación de muchos cuerpos, con la cual predijo la existencia de la antimateria así como los procesos de aniquilación de materia y antimateria. Así mismo, fue el primero en formular la electrodinámica cuántica, si bien no pudo calcular cantidades arbitrarias debido al límite de distancias cortas que requiere de la renormalización.

5.- Estadística de Fermi-Dirac.

Entre 1923 y 1925 se hace patente el interés de Fermi por problemas en Mecánica Estadística Cuántica, con numerosas publicaciones:

- "Sobre la teoría de Stern de la constante absoluta de la entropía en un gas perfecto monoatómico" (1923).
- "La probabilidad del estado cuántico" (1923).
- "Consideración de la cuantización del sistema que contenga elementos idénticos" (1924).
- "Equilibrio térmico de ionización" (1924).
- "Sobre la teoría del cuerpo sólido" (1925).

Pauli publica su principio de exclusión (1925).

Inmediatamente Fermi publica dos artículos:
- "Cuantización de los gases ideales" (1926)
- "La cuantización del gas perfecto monoatómico" (1926).

Con estas publicaciones, Fermi:

- Utiliza un potencial armónico (en vez de un pozo cuadrado infinito) para confinar el gas.
- Asume que solo puede haber un "átomo" en cada nivel cuántico.
- Calcula correctamente los niveles de energía del oscilador armónico (mecánica cuántica antigua).
- A altas temperaturas recupera la formulación clásica.
- S (T = 0) = 0.
- Fermi asume que todos los átomos obedecen el principio de exclusión de Pauli: ahora se sabe que no es cierto.

Fermi lo aplica al átomo de Helio que es un bosón.

Con todos los estudios y publicaciones realizados, tanto Fermi como Dirac llegaron a establecer, de forma independiente, la **estadística de Fermi-Dirac,** que es la forma de contar estados de ocupación de forma estadística en un sistema de partículas (fermiones). Define la estadística de un sistema de partículas idénticas con la restricción de que dos de ellas no pueden ocupar el mismo estado cuántico, cumpliendo fielmente el Principio de Exclusión de Pauli.

A todas las partículas a las que puede aplicarse la Estadística de Fermi- Dirac se le conoce con el nombre de fermiones (definidos como uno de los dos tipos básicos de partículas que existen en la naturaleza, que se caracterizan por tener spin semienteros (1/2, 3/2,..)), en oposición a los bosones (el segundo tipo básico de partículas en la naturaleza), que son aquellas partículas que transmiten las cuatro interacciones fundamentales y no están sujetas al Principio de Exclusión de Pauli.

Forma parte de la Mecánica Estadística. Y tiene aplicaciones sobre todo en la Física del estado sólido.

La energía de un sistema mecanocuántico está discretizada. Esto quiere decir que las partículas no pueden tener cualquier energía, sino que ha de ser elegida de entre un conjunto de valores discreto. Para muchas aplicaciones de la física es importante saber cuántas partículas están a un nivel dado de energía. La distribución de Fermi-Dirac nos dice cuánto vale esta cantidad en función de la temperatura y el potencial químico.

FORMULACIÓN MATEMÁTICA.-

Calculamos el número W de microestados correspondientes a un macroestado determinado de un sistema de N fermiones. Un macroestado vendrá determinado por el conjunto de números $\{n_i\}$ que nos indica que el número de partículas n_i que existen en cada nivel energético E_i, cuya degeneración designamos por g_i. Por el principio de exclusión de Pauli, como máximo puede existir una partícula por compartimento, es decir,

$$n_i \leq g_i$$

Si n_i compartimentos de una celda están llenos, $(g_i - n_i)$ están vacíos. Por el cálculo de números combinatorios, sabemos que el número de formas distintas de distribuir g_i objetos de dos categorías, siendo n_i los de una categoría y $(g_i - n_i)$ los de otra:

$$W_i = \frac{g_i!}{(g_i - n_i)! \cdot n_i!}$$

Según eso, el número total de formas en que podemos poner N partículas en las celdas con n_1 en la primera celda, n_2 en la segunda, etc., es:

$$W = \prod_i \frac{g_i!}{(g_i - n_i)! \cdot n_i!}$$

Planteamos ahora el problema de saber, en el caso de un sistema en equilibrio, es decir, un sistema en el que se conservan el número de partículas, N, y su energía total, E, cual es, de todos los posibles macroestados, el más probable. Para ello plantearemos la hipótesis de que todos los microestados son igualmente probables, con lo cual, el macroestado con mayor número de microestados será el más probable. Según eso, el conjunto de números $\{n_i\}$ que maximiza a W será el macroestado buscado.

Puesto que lnW varía monótonamente con W, calcularemos el máximo de lnW en vez del de W. De la expresión anterior podemos deducir:

$$\ln W = \sum_i \{\ln g_i! - \ln n_i! - \ln[(g_i - n_i)!]\}$$

Suponiendo que g_i y n_i son grandes, y $(g_i - n_i) >> 1$, por la fórmula de aproximación de Stirling:

$$\ln x! = (x \cdot \ln x) - x$$

tenemos:

$$\ln W = \sum_i [g_i \cdot \ln g_i - n_i \cdot \ln n_i - (g_i - n_i) \ln (g_i - n_i)]$$

Considerando las variables ni continuas y teniendo en cuenta que g_i permanece constante, el máximo de *lnW* lo obtenemos resolviendo:

$$d(\ln W) = \sum_i \frac{\partial \ln W}{\partial n_i} dn_i = 0 \Rightarrow \sum_i \ln\left(\frac{g_i - n_i}{n_i}\right) \cdot dn_i = 0$$

Las variaciones dn_i no son independientes debido a las condiciones restrictivas concernientes a la conservación de la energía y al número de partículas:

$$\sum_i n_i = N \quad ; \quad \sum_i E_i \cdot n_i = E \Rightarrow \sum_i dn_i = 0 \quad ; \quad \sum_i E_i \cdot dn_i = 0$$

Por lo tanto, para encontrar el máximo buscado aplicamos el método de los multiplicadores de Lagrange con las condiciones anteriores, es decir:

$$\sum_i \left[\ln\left(\frac{g_i - n_i}{n_i}\right) - \alpha - \beta \cdot E_i\right] dn_i = 0$$

de donde resulta:

$$\ln\left(\frac{g_i - n_i}{n_i}\right) - \alpha - \beta \cdot E_i = 0 \Rightarrow \ln\left(\frac{g_i - n_i}{n_i}\right) = \alpha + \beta E_i$$

y tomando antilogaritmos:

$$\frac{g_i - n_i}{n_i} = \exp(\alpha + \beta E_i) \Rightarrow \frac{n_i}{g_i} = \frac{1}{\exp(\alpha + \beta E_i) + 1}$$

El cociente $(n_i/g_i) = n(E_i)$ se denomina índice de ocupación de un compartimento de energía E_i. Este valor representa el número medio de partículas por compartimento a dicha energía.

La identificación de las constantes α y β con magnitudes termodinámicas del sistema se realiza considerando dos sistemas, uno con energía E, distribución ni y espectro E_i, y otro con energía $(E + dE)$, distribución $(n_i + dn_i)$ y espectro $(E_i + dE_i)$. Obtenemos:

$$dE = \sum_i E_i \cdot dn_i + \sum_i n_i \cdot dE_i$$

Si sustituimos $E_i dn_i$, resulta:

$$dE = \sum_i \left[\frac{1}{\beta} \cdot \ln\left(\frac{g_i - n_i}{n_i} \right) dn_i - \frac{\alpha}{\beta} \cdot dn_i + n_i \cdot dE_i \right]$$

y también:

$$dE = \frac{1}{\beta} \cdot d(\ln W) - \frac{\alpha}{\beta} \cdot dN + \sum_i n_i \cdot dE_i$$

El espectro E_i cambia solamente con el volumen V del sistema, ya que viene determinado por las condiciones de contorno del problema. Podemos escribir entonces:

$$dE = \frac{1}{\beta} \cdot d(\ln W) - \frac{\alpha}{\beta} \cdot dN + \left(\sum_i n_i \cdot \frac{dE_i}{dV} \right) dV$$

Por otra parte sabemos que la primera ley de la termodinámica:

$$dE = T \cdot dS - P \cdot dV + \mu \cdot dN$$

siendo T la temperatura, S la entropía, P la presión y μ el potencial electroquímico. Si consideramos además la definición microscópica de la entropía:

$$S = k \cdot \ln W$$

donde k es la constante de Boltzmann, podemos identificar, comparando las ecuaciones:

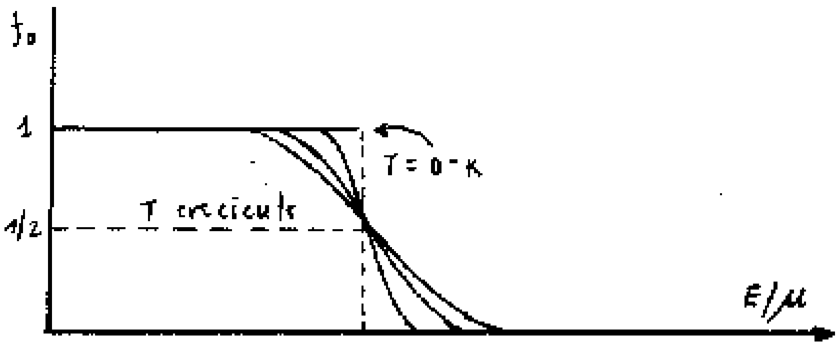
$$\beta = \frac{1}{k \cdot T} \quad ; \quad \alpha = -\frac{\mu}{k \cdot T}$$

Finalmente, resulta:

$$\frac{n_i}{g_i} = f_0(E_i) = \frac{1}{\exp[(E_i - \mu)/k \cdot T] + 1}$$

La $f_0(E_i)$ es la llamada función de **distribución de Fermi - Dirac**. Por la definición de n_i y g_i, $f_0(E_i)$ representa la probabilidad de que un estado de energía e contenga una partícula (fermión). Es usual denominar al potencial químico, μ, en el caso de fermiones, nivel de Fermi que, en general, será función de la temperatura. Su valor para T = 0, que representaremos por $\mu_0 = \mu(T = 0)$ recibe el nombre de energía de Fermi (μ tiene dimensiones de energía).

En la siguiente figura se representa la forma de $f_0(E_i)$ para distintos valores de la temperatura, y donde E_i se ha tomado como variable continua:



En el cero absoluto, todos los estados que corresponden a una energía menor que el nivel de Fermi están ocupados, mientras que los estados de energía superior están vacíos. A temperaturas superiores, los niveles de energía inferior a μ pero próximos a él comienzan a despoblarse en beneficio de los que ponen una energía superior. Podemos observar que para cualquier temperatura T > 0 ºC se tiene:

$$\frac{n_i}{g_i} \quad en \quad (E_i = \mu) = \frac{1}{2}$$

y, por tanto, los estados con energía menor que la del nivel de Fermi, siempre tienen $(n_i/g_i) > 1/2$ y los que poseen una energía superior, $(n_i/g_i) < 1/2$.

Otro punto a señalar es que en rigor, las curvas de la figura anterior sólo poseen significado para ciertos valores de Ei, pues como sabemos, los posibles valores de la energía de una partícula localizada en una cierta región del espacio, tienen espectro discreto.

INTERPRETACIÓN FÍSICA.

Para *bajas temperaturas*, la distribución de Fermi es una función escalón que vale 1 si $\varepsilon < \mu$ y 0 si $\varepsilon > \mu$. Esto quiere decir que las partículas van colocando desde el nivel más bajo de energía hacia arriba debido al Principio de exclusión de Pauli hasta que se hayan puesto todas las partículas. La energía del último nivel ocupado se denomina energía de Fermi y la temperatura a la que corresponde esta energía mediante $\varepsilon_f = k_B T_f$ temperatura de Fermi.

Se da la circunstancia de que la temperatura de Fermi de la mayoría de metales reales es enorme (del orden de 10000 Kelvin), por tanto la aproximación de decir que la distribución de Fermi-Dirac sigue siendo un escalón hasta temperatura ambiente es válida con bastante precisión.

La distribución de Fermi-Dirac tiene importancia capital en el estudio de gases de fermiones y en particular en el estudio de los electrones libres en un metal.

APLICACIONES.

La conductividad en los metales puede ser explicada con gran aproximación gracias a la estadística de Fermi-Dirac aplicada a los electrones de valencia o "gas electrónico" del metal.

6.- Bibliografía.

- "Mecánica Estadística". Brey Abalo, J., De la Rubia Pacheco, J., De la Rubia Sánchez, J.

- *es.*wikipedia*.org*

- www.unex.es/fisteor/juan/

- www.uam.es

- www.physica.cn