АСИМПТОТИЧЕСКИЕ И ПРИБЛИЖЕННЫЕ ФОРМУЛЫ ДЛЯ ДАВЛЕНИЯ И ВНУТРЕННЕЙ ЭНЕРГИИ ВЕЩЕСТВА В ОБОБЩЕННОЙ МОДЕЛИ АТОМА ТОМАСА-ФЕРМИ*

ВВЕДЕНИЕ

Задачей настоящей работы является получение асимптотических и приближенных выражений для давления и внутренней энергии одноатомного вещества на основе обобщенной модели атома Томаса-Ферми [1]. Как известно, термодинамическое состояние вещества определяется двумя термодинамическими параметрами, например плотностью ρ и температурой T.

Остальные параметры, в частности внутренняя энергия 1 см^3 вещества E и давление P, являются функциями от ρ и T

$$E = E(\rho, T), \tag{B.1}$$

$$P = P(\rho, T). \tag{B.2}$$

Соотношения (B.1), (B.2) называются уравнениями состояния.

В случае идеального одноатомного газа, подчиняющегося статистике Больцмана (невырожденный газ), уравнения состояния имеют простой вид

$$E = {}^3\!/_2 \, \frac{N}{A} \rho kT, \tag{B.3}$$

$$P = (N/A)\, \rho kT, \tag{B.4}$$

где $N = 6{,}023 \cdot 10^{23}$ – число Авогадро, $k = 1{,}38 \cdot 10^{-16}$ эрг/град – постоянная Больцмана, T - определяется в градусах по абсолютной шкале. В частности, справедливо соотношение вириала

$$E = {}^3\!/_2 P. \tag{B.5}$$

В случае идеального нерелятивистского газа, подчиняющегося статистике Бозе - Эйнштейна или статистике Ферми - Дирака (вырожденный газ), выражения (B.3), (B.4) усложняются, но соотношение вириала (B.5) остается в силе[1].

При определении энергии и давления одноатомного газа следует учитывать не только энергию и давление ядер, но также и соответствующий вклад электронов атома. Статистическая модель атома Томаса - Ферми позволяет приближенно оценить этот вклад электронов в общую энергию и получить уточненные уравнения состояния.

В настоящей работе дается асимптотическое исследование уравнений состояния, основанных на обобщенной модели атома Томаса - Ферми, а также получаются приближенные выражения для E и P. Результаты настоящей работы были получены в 1952 г. и доложены на семинаре математического сектора ГеоФИАН СССР, руководимого членом-корреспондентом АН СССР, профессором А.Н. Тихоновым.

Автор выражает благодарность за ряд критических замечаний, высказанных при обсуждении этой работы на семинаре, руководителю семинара профессору А.Н. Тихонову и членам семинара А.А. Самарскому, В.Я. Гольдину и Б.Л. Рождественскому.

1. СТАТИСТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ АТОМА ТОМАСА - ФЕРМИ

1. Задача о распределении электронов в поле ядра в атоме представляет собой весьма сложную задачу квантовой теории атома, не решенную полностью и до сих пор. Различные приближения квантово-механической модели атома делались неоднократно.

Исторически первым и наиболее простым приближением является статистическая модель атома Томаса - Ферми, выдвинутая в работах [1, 2] и дающая, несмотря на свою простоту, хорошие результаты во многих применениях. В основе этой модели лежат следующие предположения:

1). Атом, т.е. система ядро + Z электронов, рассматривается как электрически нейтральная система, заключенная в некоторый объем ("ячейку" или элементарный полиэдр). Ячейка является конечной в случае атома, находящегося в веществе конечной плотности, и бесконечной в случае вещества нулевой плотности (свободный атом).

Из соображений симметрии следует, что потенциал V электростатического поля, создаваемого атомами в веществе, становится стационарным на границе ячейки, т.е.

$$\partial V / \partial r = 0 \tag{1.1}$$

на границе атома. Это и является выражением нейтральности атома.

2). Совокупность электронов в атоме-ячейке рассматривается как электронный газ, находящийся в поле ядра и поле электронных зарядов. Распределение электронов по скоростям в каждом элементе объема атомной ячейки удовлетворяет статистике Ферми, что означает, что в одном квантовом состоянии находятся максимум два электрона (различающихся спинами). Электронный газ считается находящимся в термодинамическом равновесии. Отсюда, в частности, вытекает, что химический потенциал электронного газа постоянен в атоме.

---

*Сборник научных работ кафедры математики. М.: Атомиздат, 1958. С. 144-195.

[1] Если скорости частиц газа сравнимы со скоростью света (релятивистский газ), то соотношение (B.5) теряет силу.

3). Потенциал поля зарядов атома удовлетворяет уравнению Пуассона

$$\Delta V = 4\pi\rho_e \cdot e. \tag{1.2}$$

Здесь e — заряд электрона, ρ_e — объемная плотность электронных зарядов, которая нормируется по числу Z электронов в атоме:

$$\int \rho_e dV = Z, \tag{1.3}$$

где интегрирование производится по объему атома.

Потенциал зарядов атома имеет в центре атома особенность вида

$$Z_e/r. \tag{1.4}$$

4). Электронный газ атома рассматривается как газ при нулевой температуре, т.е. низшие квантовые уровни полностью заняты.

Исходя из этого Томас и Ферми получили соотношение между объемной плотностью электронов ρ_e и потенциальной энергией $e \cdot V$. Если обозначить через E_0 максимальную полную энергию электрона (из условия термодинамического равновесия следует, что E_0 одна и та же во всех точках) и через eV его потенциальную энергию, то должны иметь место соотношения

$$p^2_{\max}/2m - eV = E_0, \tag{1.5}$$

где $p_{\max}$ (максимальный импульс электрона) связан с ρ_e соотношением

$$(8\pi/3h^3)p^3_{\max} = \rho_e, \tag{1.6}$$

которое означает, что все нижние уровни заняты и что фазовый объем радиусом $p_{\max}$ полностью заполнен.

Отсюда получается соотношение между ρ_e и V

$$\rho_e = (8\pi/3h^3)\,[2m(E_0+eV)]^{3}/_{2}. \tag{1.7}$$

Теперь из (1.2), (1.7) получаем для F следующее уравнение (в предположении сферической симметрии):

$$\Delta V = \frac{1}{r}\frac{d^2(Vr)}{dr^2} = \frac{32\pi^2 e}{3h^3}\left[2m(E0+eV)\right]^{3/2} \tag{1.8}$$

с краевыми условиями

$$Vr \to Z_e, \qquad r \to 0, \tag{1.9}$$

$$\partial V/\partial r = 0, \qquad r = r_0, \tag{1.10}$$

где r_0 — радиус атома.

Подход Томаса - Ферми был с успехом применен к различным проблемам атомной физики и, в частности, для нахождения уравнений состояния вещества.

В 1949 г, в работе [3] метод Томаса - Ферми был обобщен на случай произвольной температуры. Предположение I) - 3) оставались в силе, предположение 4) было отброшено. Электронный газ рассматривался как находящийся при определенной температуре T, которая в силу предположения о термодинамическом равновесии была постоянна в атоме и равнялась температуре ядерного газа.

В этих предположениях, в соответствии со статистикой Ферми - Дирака, вероятность заполнения

$$\left[1+\exp\left(\frac{p^2/2m - eV}{kT}+\eta\right)\right]^{-1}, \tag{1.11}$$

где $\mu = \eta k\mathrm{T}$ - химический потенциал электронного газа, V - потенциал поля зарядов в атоме.

Исходя из того, что число возможных состояний для электрона с импульсом p равно

$$(2/h^3)4\pi p^2 dp, \tag{1.12}$$

для ρ_e получаем выражение

$$\int_0^\infty \frac{8\pi p^2 dp/h^3}{1+\exp\left(\frac{p^2/2m-eV}{kT}\right)+\eta} = \frac{4\pi}{h^3}(2mkT)^{3/2} I_{1/2}\left(\frac{eV}{kT}-\eta\right), \tag{1.13}$$

где

$$I_k(y) = \int_0^\infty \frac{x^k dx}{e^{x-y}+1}. \tag{1.14}$$

Подставляя выражение для ρ_e в уравнение Пуассона

$$\Delta V = \frac{1}{r}\frac{d^2(Vr)}{dr^2} = 4\pi\rho_e \cdot e, \tag{1.15}$$

получаем уравнение

$$\frac{1}{r}\frac{d^2(Vr)}{dr^2} = \frac{16\pi^2}{h^3} e(2mkT)^{3/2} I_{1/2}\left(\frac{eV}{kT}-\eta\right) \tag{1.16}$$

с краевыми условиями

$$\partial V/\partial r = 0 \text{ при } r = a, \tag{1.17}$$

где a - радиус атома,

$$Vr \to Ze \text{ при } r \to 0. \tag{1.18}$$

Радиус атома a, точнее радиус атомной ячейки, определяется из соотношения

$$a = \left(\frac{4}{3}\pi \frac{6{,}023\cdot 10^{23}}{A}\cdot\rho\right)^{-1/3}, \tag{1.19}$$

где ρ - плотность вещества, A - его атомный вес.

Соотношение (1.19) выражает отсутствие "межатомных" промежутков. V - нормируется условием

$$V(a) = 0 \tag{1.20}$$

(потенциал равен нулю на границе).

Для удобства аналитического исследования и численных расчетов можно перейти к новым переменным, взяв за единицу длины

$$c = \left[\frac{h^3}{32\pi^2 e^2 m(2mkT)^{1/2}}\right]^{1/2} \tag{1.21}$$

и введя в качестве независимой переменной

$$s = r/c \tag{1.22}$$

и в качестве неизвестной функции

$$\beta = [eV/kT - \eta]\cdot s. \tag{1.23}$$

Тогда уравнения (1.16), (1.17), (1.18) примут вид

$$d^2\beta/ds^2 = s I_{1/2}(\beta/s), \tag{1.24}$$

$$\beta = \beta_0 \text{ при } s = 0,\ d\beta/ds = \beta/s \text{ при } s = b, \tag{1.25}$$

где

$$\beta_0 = Ze^2/ckT = c_1 T^{3/4}, \tag{1.26}$$

$$b = \frac{a}{c} = \frac{1}{c}\left(\frac{4}{3}\pi\frac{N}{A}\rho\right)^{-1/3} = \bar{c}_2 \frac{T^{1/4}}{\rho^{1/3}} = \left(\frac{c_2}{\rho\beta_0}\right)^{1/3},$$

$$c_1 = \frac{4\pi e^3(2m)^{3/4}}{h^{3/2}k^{3/4}}\cdot Z,\quad c_2 = c_1\bar{c}_2^{\,3}, \tag{1.27}$$

$$\bar{c}_2 = \frac{4\pi(2m)^{3/4} e k^{1/4}}{h^{3/2}}\left(\frac{4}{3}\pi N\right)^{-1/3} A^{+1/3}.$$

2. Следуя [3], рассмотрим теперь, как выражаются термодинамические параметры вещества: внутренняя энергия 1 см^3 вещества E, давление P, энтропия 1 г вещества S, свободная энергия 1 г вещества F в функции от электронной плотности ρ_0.

Введем обозначения: $V_e(r)$ - потенциал поля электронов в точке r, $V_N(r)$ – потенциал поля ядра в точке r, $V(r)$ - потенциал поля зарядов атома в точке r, $E_\kappa(r)$ – объемная плотность кинетической энергии электронного газа в точке r, $P(r)$ – давление электронного газа в точке r, E_{ee} – потенциальная энергия взаимодействия электронов атома, E_{eN} - потенциальная энергия электронов атома в поле ядра или, что то же самое, потенциальная энергия ядра в поле электронов, E_p – потенциальная энергия зарядов атома, $E_к$ - кинетическая энергия электронов атома, E_t – полная энергия зарядов в атоме (в координатной системе, связанной с ядром), S_e – энтропия электронного газа атома, F_e - свободная энергия электронного газа атома, $v = 4\pi a^3/3$ – объем атома.

Тогда справедливы следующие соотношения:

$$V_N = Z_e / r, \tag{1.28}$$

$$V = V_e + V_N = V_e + Ze/r, \tag{1.29}$$

$$E_p = E_{ee} + E_{eN}, \tag{1.30}$$

$$E_{ee} = \frac{1}{2} e \int_0^a \rho_e V_e d\tau \,, \; d\tau = 4\,\pi r_2 dr, \tag{1.31}$$

$$E_{eN} = e \int_0^a \rho_e V_N d\tau \,, \tag{1.32}$$

$$E_{eN} = -ZkT \cdot \int_0^b I_{1/2}(\beta / s) s ds \,. \tag{1.33}$$

Соотношение (1.33) следует из (1.28) - (1.32) после перехода к новым переменным с помощью соотношений (1.21) - (1.27)

$$-\mathrm{e} = \int_0^a \rho_e V d\tau = 2\, E_{ee} + E_{eN}. \tag{1.34}$$

Соотношение (1.34) следует из (1.29) - (1.32)

$$\int_0^a (eV + \mu)\, \rho_\mathrm{e}\, d\tau = ZkT \int_0^b \frac{\beta}{\beta_0} I_{1/2}(\frac{\beta}{s}) s ds \,. \tag{1.35}$$

Соотношение (1.35) следует из (1.21) - (1.27)

$$\int_0^a (eV + \mu)\, \rho_\mathrm{e}\, d\tau = -2\, E_{ee} - E_{eN} + Z \cdot \mu = -2\, E_\mathrm{p} + E_{eN} + Z \cdot \mu \,. \tag{1.36}$$

Соотношение (1.36) следует из (1.3) и (1.34)

$$E_p = -{}^3/_2 ZkT \cdot M, \tag{1.37}$$

где

$$\mathrm{M} = \frac{1}{3}\left[\int_0^b I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)\left(\frac{\beta}{\beta_0}+1\right) s ds - f\right], \tag{1.38}$$

$$f = -\eta = \frac{\mu}{kT} = \frac{\beta(b)}{b} \,. \tag{1.39}$$

Соотношение (1.37) следует из (1.33), (1.35) и (1.36)

$$E_\mathrm{k}(r) = \int_0^\infty \frac{(p^2/2m) 8\pi p^2 dp / h^3}{1 + \exp((p^2/2m - eV)/kT + \eta}\,, \tag{1.40}$$

$$P(r) = \int_0^\infty \frac{(p^2/3m) 8\pi p^2 dp / h^3}{1 + \exp((p^2/2m - eV)/kT + \eta}\,. \tag{1.41}$$

Соотношения (1.40), (1.41) следуют из кинетической теории идеальных газов, подчиняющихся статистике Ферми - Дирака. После перехода к переменным β, s (см. (1.21) - (1.27)) получаем выражение

$$E_\mathrm{k}(r) = {}^3\!/_2\, P(r) = \frac{4\pi (2mkT)^{5/2}}{2mh^3} I_{3/2}\left(\frac{\beta}{s}\right), \tag{1.42}$$

$$E_\mathrm{k} = \int_0^a E_\mathrm{k}(r)\, d\tau = \frac{3}{2} ZkT \cdot J, \tag{1.43}$$

где

$$J = \frac{2}{3}\,\frac{1}{\beta_0}\int_0^b I_{3/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)s^2\,ds\,. \qquad (1.44)$$

Объединяя формулы (1.37), (1.44), получаем выражение для E_t:

$$E_t = {}^3/_2 ZkT\cdot q, \qquad (1.45)$$

где

$$\theta = J - M. \qquad (1.46)$$

Давление P вещества определяется как давление электронного газа на границе атома. Так как на границе $V(r) = 0$, то из (1.41), (1.42) имеем

$$P\cdot v = ZkT\cdot L, \qquad (1.47)$$

где

$$L = \frac{2}{9}\,\frac{b^3}{\beta_0}\,I_{3/2}(f) \qquad (1.48)$$

Докажем теперь, что нейтральность атомной ячейки ($\partial v/\partial r = 0$, $r = a$) имеет другую эквивалентную формулировку

$$\int \rho_e\,d\tau = Z,$$

т.е. что условие (1.3) вытекает из уравнения Пуассона (1.8) для $V(r)$ и краевых условий (1.9), (1.10).

Переходя к переменным β, s, преобразуем (1,3) к виду

$$\beta_0 = \int_0^b s^2\,I_{1/2}(\beta/s)\,ds. \qquad (1.49)$$

Принимая во внимание уравнение (1.24) и краевые условия (1.25) и интегрируя по частям, имеем

$$\int_0^b s^2\,I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)ds = \int_0^b s\frac{d^2\beta}{ds^2}\,ds = \int_0^b s d\frac{d\beta}{ds} = s\frac{d\beta}{ds}\Big|_0^b,$$

$$-\int_0^b \frac{d\beta}{ds} = b\left(\frac{d\beta}{ds}\right)_b - \beta_0 + \beta_0 = \beta_0$$

Соотношение (1.49) доказано.

Из уравнения (1.24) сразу же следует

$$\int_0^b s\,I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)ds = \left(\frac{d\beta}{ds}\right)_b - \left(\frac{d\beta}{ds}\right)_0 = f - \left(\frac{d\beta}{ds}\right)_0. \qquad (1.50)$$

Выведем теперь соотношение вириала. Докажем предварительно ряд соотношений:

$$\int\left(\frac{d\beta}{ds}\right)^2 ds = \beta\,\frac{d\beta}{ds} - \int \beta I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)s ds\,. \qquad (1.51)$$

Соотношение (1.51) получается интегрированием по частям с последующей заменой $d^2\beta/ds^2$ на $sI_{1/2}(\beta/s)$

$$F(s) = \int s\left(\frac{d\beta}{ds}\right)I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)ds = \frac{1}{2}\left(\frac{d\beta}{ds}\right)^2. \qquad (1.52)$$

Соотношение (1.52) следует непосредственно из (1.24)

$$\int_0^b s^2\,\frac{d\beta}{ds}I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)ds = \frac{1}{2}\left[\beta_0\left(\frac{d\beta}{ds}\right)_0 + \int_0^b \beta I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)s ds\right]. \qquad (1.53)$$

Соотношение (1.53) получается интегрированием по частям с помощью соотношений (1.51), (1.52) и краевых условий (1.25)

$$\int_0^b s^2\,\frac{d\beta}{ds}I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)ds = \int_0^b s dF = \frac{1}{2}s\left(\frac{d\beta}{ds}\right)^2\Big|_0^b - \frac{1}{2}\int_0^b\left(\frac{d\beta}{ds}\right)^2 ds =$$

$$= \frac{1}{2}b\left(\frac{d\beta}{ds}\right)_b^2 - \frac{1}{2}\beta\left(\frac{d\beta}{ds}\right)^2\Big|_0^b + \frac{1}{2}\int_0^b \beta I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)s ds = \frac{1}{2}\left[\beta_0\left(\frac{d\beta}{ds}\right)_0 + \frac{1}{2}\int_0^b \beta I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)s ds\right].$$

Принимая во внимание соотношение $I_k(\eta) = kI_{k-1}(\eta)$ (см. разд. 2, п. 1) и предыдущие тождества, можно вывести соотношение вириала.

Рассмотрим интеграл

$$\int_0^b s^2 I_{3/2}(\beta/s)ds .$$

Интегрируя по частям, имеем

$$\int_0^b s^2 I_{3/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)ds = \frac{1}{3} b^3 I_{3/2}(f) - \frac{1}{2}\int_0^b s^2 I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)\frac{d\beta}{ds}ds + \frac{1}{2}\int_0^b sI_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)\beta ds .$$

Принимая во внимание соотношения (1.53) и (1.50) , получаем

$$\int_0^b s^2 I_{3/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)ds = \frac{1}{3}b^3 I_{3/2}(f) - \frac{1}{4}\left[\beta_0\left(\frac{d\beta}{ds}\right)_0 - \int_0^b sI_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)\beta ds\right] =$$

$$= \frac{1}{3}b^3 I_{3/2}(f) - \frac{1}{4}\beta_0\left[f - \int_0^b sI_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)\left(\frac{\beta}{\beta_0}+1\right)ds\right]. \qquad (1.54)$$

Сопоставляя (1.38), (1.44), (1.48), имеем

$$J = L + ½M \qquad (1.55)$$

или, принимая во внимание (1.37) , (1.43) , (1.47)

$$E_K - {}^3/_2 Pv = -{}^1/_2 E_p. \qquad (1.56)$$

Равенство (1.56) представляет собой соотношение вириала.

Заметим, что в каждой точке r соотношение вириала для электронного газа имеет вид

$E_\kappa(r) - {}^2/_3 P(r) = 0.$

Выведем теперь выражение для энтропии[2] электронного газа в атомной ячейке. Как известно, химический потенциал μ выражается следующим образом:

$$\mu = (E - TS + PV)_{\text{частица}} = \frac{[E(r) - TS(r) + P(r)]}{\rho_e} ,$$

где $E(r)$ — полная энергия электронного газа в 1 см^3 в точке r. Отсюда получаем равенство

$$\int_0^a \mu\rho_e d\tau = \int_0^a [E(r) - TS(r) + P(r)]dr = \int_0^a \left[E(r) - TS(r) + \frac{2}{3}E_\kappa(r)\right]d\tau =$$

$$= E - TS + \frac{2}{3}E_\kappa = \mu\int_0^a \rho_e d\tau = ZkTf . \qquad (1.57)$$

Здесь $E = \int_0^a E(r)d\tau$. Ясно (см. (1.34), что

$$E = E_\kappa + 2E_{ee} + E_{eN} \qquad (1.58)$$

Отсюда (1.57) принимает вид

$$S_e = \frac{{}^5/_3 E_\kappa + 2E_{ee} + E_{eN} - ZkTf}{T} . \qquad (1.59)$$

Это и есть искомое выражение для энтропии S_e. Для F_e получаем выражение

$$F_e = E_t - TS_e = -{}^2/_3 E_\kappa + ZkTf \qquad (1.60)$$

или, пользуясь соотношением вириала

$$F_e = {}^4/_3 (E_\kappa - Pv) + E_{eN} + ZkTf, \qquad (1.61)$$

или

$$F_e = {}^4/_3 (E_\kappa - Pv) + ZkT (d\beta/ds)_0. \qquad (1.62)$$

Сделаем еще замечание о вырождении газа. Критерий вырождения электронного газа в атомной ячейке в точке $r = cs$ имеет вид (см. (1.11))

$$\exp(\eta - eV/kT) = \exp(-\beta/s) \ll 1. \qquad (1.63)$$

Отсюда следует, что в окрестности начала газ всегда вырожден, если $\beta_0 \neq 0$. Вблизи границы вырождение газа характеризуется величиной

$\exp(-\beta/s)_b = \exp -f.$

Если f — большое отрицательное, то газ на периферии атомной ячейки будет невырожденным, т.е. близким к идеальному. В разд. 3 будет показано, что тогда и в целом газ в атомной ячейке будет близким к идеальному, так как вклад окрестности центра мал. Если f — положительное, то газ будет всюду вырожденным.

[2] **Впервые это выражение получено Брахманом в [4], однако формула выведена сложным образом. Мы даем упрощенный вывод**

При расчете полной энергии и давления газа учитывается кинетическая энергия и импульс ядерного газа. Так как ядерный газ является невырожденным, то для него справедливы формулы идеального газа

$$E_n = {}^3/_2(N/A)\rho kT, \qquad (1.64)$$

$$P_n = (N/A)\rho kT, \qquad (1.65)$$

где E_n, P_n указывают соответственно энергию и давление ядерного газа. Объединяя формулы (1.45), (1.47), (1.64), (1.65), получаем выражение для E и P

$$E = {}^2/_3\ (N/A)\ Z\rho\, kT\ [\theta + 1/Z], \qquad (1.66)$$

$$P = (N/A)Z\ \rho kT\ [L + 1/Z]. \qquad (1.67)$$

Формулы (1.66), (1.67) и представляют искомые уравнения состояния в обобщенной теории Томаса - Ферми.

Главная задача состоит в определении функционалов L, J от электронной плотности ρ_e.

Задача эта неизбежно приводит к интегрированию уравнения (1-29) с краевыми условиями (1.25) и последующему определению L, J.

В последующих разделах мы дадим асимптотическое исследование функционалов L, J и на основании этого построим достаточно точные приближенные формулы для E и P.

2. АСИМПТОТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ФУНКЦИЙ

$$I_\kappa(y) = \int_0^\infty \frac{x^k ds}{e^{x-y}+1}.$$

1. Установим некоторые свойства $I_k(y)$:

1) функция $I_k(y)$ определена для всех значений y в интервале $-\infty < y < \infty$ и для всех значений k в интервале $1 < k < \infty$;

2) $I_k(y)$ - монотонно возрастающая функция y в интервале $-\infty < y < \infty$;

3) $I_k(y)$ - монотонно возрастающая функция k в интервале $-1 < k < \infty$;

4) $I_k(y) = kI_{k-1}(y)$.

Действительно, (2.1)

$$I_\kappa(y) = \int_0^\infty \psi(x-y)\, x^k dx, \qquad \psi(x-y) = \frac{1}{e^{x-y}+1},$$

$$I_\kappa(y) = \int_0^\infty \psi_y\,(x-y)\, x^k dx = -\int_0^\infty \psi_x(x-y)\, x^k dx =$$

$$= \int_0^\infty x^k d\psi(x-y) = -\psi(x-y)k^x \Big|_0^\infty + k\int_0^\infty \psi(x-y)k^{x-1}dx = kI_{k-1}(y),$$

что и требовалось доказать;

5) $I_0(y) \equiv y + 1\text{n}(1 + e^{-y})$. (2.2)

2. Установим асимптотику $I_k(y)$ при $y \to -\infty$. Пусть $-y = a \gg 1$. Тогда

$$I_\kappa(y) = \int_0^\infty \frac{x^k dx}{e^{x+a}+1} = A\int_0^\infty \frac{x^k}{e^{x+a}}dx = A\, e^y\int_0^\infty e^{-x}x^k dx = A\, e^y\Gamma(k+1), \qquad (2.3)$$

где A – число, близкое к единице: $|A-1| \sim e^{\,y}$.

Таким образом, первый асимптотический член $I_k(y)$ при y больших отрицательных имеет вид

$$I_k(y) \sim e^y\ \Gamma(k+1). \qquad (2.4)$$

Отсюда, как следствие, имеем

$$I_k(y)/I_{k-1}(y) \to \Gamma(k+1)/\Gamma(k) = k, \quad y \to -\infty. \qquad (2.5)$$

Заметим, что $I_k(y) \to 0$ тогда и только тогда, когда $y \to -\infty$.

Перейдем теперь к асимптотике $I_k(y)$ при y больших положительных ($y \gg 1$). Рассмотрим предварительно некоторые соотношения и оценки. 3. Докажем в первую очередь, что

$$\int_y^\infty \frac{t^k}{e^t+1}dt = 0(e^{-y}) \qquad (2.6)$$

Действительно,

$$\int_0^\infty \frac{t^k}{e^t+1}dt < \int_y^\infty \frac{t^m}{e^t+1}dt, \quad m = [k]+1,$$

$$\int_y^{\infty} \frac{t^m}{e^t+1} = \int_y^{\infty} t^m e^{-t}\frac{dt}{1+e^{-t}} = \int_y^{\infty} t^m e^{-t}\sum_{s=0}^{\infty} (-1)^s e^{-st}\,dt =$$

$$= \sum_{s=1}^{\infty} (-1)^{s+1}\int_y^{\infty} t^m e^{-s\,t}dt. \tag{2.7}$$

Перестановка знаков $\int$ и $\sum$ возможна в силу равномерной сходимости ряда

$\sum_{s=1}^{\infty} (-1)^{s+1}e^{-s\,t}$ на интервале $y < t < \infty$

$$\int_y^{\infty} t^m e^{-s\,t}dt = \frac{1}{s^m+1}\int_A^{\infty}\tau^m e^{-\tau}d\tau\ ,\ A = ys, \tag{2.8}$$

Интегрируя по частям, получаем

$$\int_A^{\infty}\tau^m e^{-\tau}d\tau\ = e^{-A}\cdot A^m\left[1+\frac{m}{A}+m(m-1)\frac{1}{A^2}+....+\frac{m!}{A^m}\right]=$$

$$= e^{-ys}y^m s^m P_m\,(1/ys). \tag{2.9}$$

Отсюда

$$\int_y^{\infty} t^m e^{-s\,t}dt = e^{-ys}\frac{y^m}{s}\,P_m\left(\frac{1}{ys}\right), \tag{2.10}$$

$$\int_y^{\infty} \frac{t^m dt}{e^t+1} = \sum_{s=1}^{\infty} (-1)^{s+1}\frac{e^{-ys}}{s}\,P_m\left(\frac{1}{ys}\right). \tag{2.11}$$

Так как члены знакопеременного ряда (2.11) монотонно убывают по абсолютной величине, то

$$\int_y^{\infty} \frac{t^m dt}{e^t+1} < e^{-y}Pm\left(\frac{1}{y}\right). \tag{2.12}$$

Отсюда

$$\int_y^{\infty} \frac{t^k dt}{e^t+1} = 0(e^{-y}),$$

что и требовалось доказать.

4. Введем в рассмотрение функцию

$$\Phi_k(t) = \sum_{s=1}^{\infty} (-1)^{s+1}\frac{e^{-st}}{s^k}\,{}^{*}.$$

$\Phi_k(t)$ определена (в случае вещественных k) для k в интервале $0 < k < \infty$, так как при таких значениях k ряд справа сходится равномерно по t в интервале от 0 до ∞ Следовательно, ряд $\Phi_k(t)$ можно интегрировать почленно. Интегрируя $\Phi_k(t)$, получаем

$$\int \Phi_k(t)dt = \int \sum_{s=1}^{\infty} (-1)^{s+1}\frac{e^{-st}}{s^k}\,dt = -\sum_{s=1}^{\infty} (-1)^{s+1}\frac{e^{-st}}{s^{k+1}} = \Phi_{k+1}(t). \tag{2.14}$$

Итак,

$$\int \Phi_k(t)dt = -\,\Phi_{k+1}(t),\qquad \Phi_{k+1}(t) = -\,\Phi_k(t). \tag{2.15}$$

В частности, рассмотрим функцию $\Phi_0(t)$

$$\Phi_0(t) = \sum(-1)^{s+1}e^{-st} = 1/(1+e^t)\,. \tag{2.16}$$

Последнее равенство справедливо при $t > 0$. Интегрируя равенство (2.16) в интервале $e < t < \infty$, получим

$$\Phi_1(t)) = -\int \Phi_0(t)\,dt \int \frac{dt}{1+e^t}\,.$$

***Заметим, что $\Phi_k(0)$ связана с функцией ξ *(k)* Римана соотношением**

$$\Phi_k(0) = \left(1 - \frac{1}{2^{k-1}}\right)\xi(k) \tag{2. 17}$$

При этом проинтегрированное равенство справедливо при t в пределах $0 \leqslant t < \infty$ в силу равномерной сходимости ряда $\Phi_1(t)$ в интервале $0 \leqslant t < \infty$. И для $\Phi_k(t)$ справедлива оценка

$$0 < \Phi_k(t) < e^{-t}, \tag{2.18}$$

следующая из знакопеременности ряда и монотонного убывания его членов по величине.

5. Установим асимптотику интеграла

$$I_+ = \int_0^y \frac{(t+y)^k}{e^t+1}dt\ . \tag{2.19}$$

Пользуясь соотношениями п. 4, интеграл (2.19) можно представить в виде

$$I_+ = \int_0^y (t+y)^k\, d\Phi_1(t).$$

Интегрируя последовательно по частям, получим

$$\int_0^y (t+y)^k\, d\Phi_1(t) = -\left\{(t=y)^k \Phi_1(t)\Big|_0^y - k\int_0^y (t+y)^{k-1}\Phi_1(t)dt\right\} =$$

$$= -\left\{(t=y)^k \Phi_1(t)\Big|_0^y + k\int_0^y (t+y)^{k-1}d\Phi_2(t)\right\} =$$

$$= -\left\{(t=y)^k \Phi_1(t) + k(t+y)^{k-1}\Phi_2(t) + \ldots + k(k-1)\ldots(k-m+2)\times(t+y)^{k-m+1}\Phi_m(t)\right\}$$

$$\Big|_0^y + k(k-1)\ldots(k-m+1)\int_0^y \Phi_m(t)(t+y)^{k-m}dt\ , \tag{2.20}$$

где $m = [k+1\ ]$ есть целая часть числа $k+1$.

Оценим интеграл-остаток

$$\int_0^y \Phi_m(t)(t+y)^{k-m}dt = \int_0^y \frac{\Phi_m(t)}{(t+y)^\alpha}dt\ , \qquad \alpha = m-k > 0,$$

$$\int_0^y \frac{\Phi_m(t)}{(t+y)^\alpha}dt < \frac{1}{y^\alpha}\int_0^y \Phi_m(t)dt < \frac{1}{y^\alpha}\int_0^y e^{-t}dt = \frac{1-e^{-y}}{y^\alpha}\ . \tag{2.21}$$

Итак, остаток имеет порядок $1/y^\alpha$, $\alpha > 0$.

Для того чтобы точно вычислить первый член остатка, нужно продолжить интегрирование по

$$\int_0^y (t+y)^k \frac{dt}{1+e^t} = -\left\{(t+y)^k\Phi_1(t) + \ldots + k(k-1)\ldots(k-m+2)(t+y)^{k-m+1}\times\Phi_m(t)\right\}$$

$$\Big|_0^y - k(k-1)\ldots(k-m+1)(t+y)^{k-m}\Phi_{m+1}(t)\Big|_0^y + k(k-1)\ldots(k-m)^{k-m-1}\Phi_{m+1}(t)dt\ . \tag{2.22}$$

Если отбросить часть порядка e^{-y}, которую дает подстановка верхнего предела, то получим

$$\int_0^y (t+y)^k \frac{dt}{1+e^t} = y^k\ \Phi_1(0) + ky^{k-1}\Phi_2(0) + \ldots + k(k-1)\ldots$$
$$\ldots(k-m+2)y^{k-m+1}\Phi_m(0) + R_k(t), \tag{2.23}$$

где $R_k(t)$ имеет вид (с точностью до членов порядка e^{-y})

$R_k(t) = k(k-1)\ \ldots\ (k-m+1)y^{k-m}\ \Phi_m(0) + k(k-1)\ \ldots$

$$\ldots \quad (k-m)\int_0^y \frac{\Phi_{m+1}(t)dt}{(t+y)^{m+1-k}} \tag{2,24}$$

При этом интегральный член имеет порядок

$$1/y^{m+1-k} = 1/y^{1+\alpha}, \tag{2.25}$$

первый член остатка имеет порядок

$$1/y^{m-k} = 1/y^{\alpha}, \ \alpha > 0. \tag{2.26}$$

Таким образом, асимптотическая часть интеграла

$$\int_0^y (t+y)\frac{dt}{1+e^t}$$

имеет вид

$$y^k\Phi_1(0) + ky^{k-1}\Phi_2(0) + \ldots + k(k-1)\ldots(k-m+2)y^{k-m+1}\Phi_m(0), \tag{2.27}$$

первый член остатка имеет вид

$$k(k-1)\ldots(k-m+1)y^{k-m}\Phi_{m+1}(0). \tag{2.28}$$

6. Найдем асимптотическое выражение для интеграла

$$I\_ = \int_0^y \frac{(y-t)^k}{e^t+1} \tag{2.29}$$

Применяя аналогично интегрирование по частям, получим

$$I\_ = \Big\{ -(y-t)^k\Phi_1(t) + k(y-t)^{k-1}\_\Phi_2(t) + \ldots (-1)^m k(k-1)\ldots$$

$$\ldots (k-m+2)(y-t)^{k-m+1}\Phi_m(t) \Big\}\Big|_0^y + (-1)^m k(k-1)\ldots$$

$$\ldots (k-m+1)\int_0^y (y-t)^{k-m}\Phi_m(t)dt\,. \tag{2.30}$$

Для того чтобы получить остаточный член, непосредственное интегрирование по частям уже непригодно, так как получается расходящийся интеграл

$$\int_0^y (y-t)^{k-m-1}\Phi_{m+1}(t)dt \tag{2.31}$$

Поэтому предварительно рассматриваем интеграл

$$I\_(\epsilon) = \int_0^{y-\varepsilon} (y-t)^{k-m}\,\Phi_m(t)dt, \tag{2.32}$$

к которому уже можно применить интегрирование по частям.

При этом в получающемся интеграле меняем подынтегральное выражение так, чтобы при переходе к пределу при $\epsilon \to 0$ получался сходящийся интеграл ("выгоняем" особенность из-под знака интеграла). Выделенная особенность гасится особенностью проинтегрированного выражения, давая конечную величину. Выкладка выглядит следующим образом:

$$I\_(\epsilon) = -\frac{\Phi_{m+1}(t)}{(y-t)^{\alpha}}\Big|_0^{y-\varepsilon} + \alpha\int_0^{y-\varepsilon}\frac{\Phi_{m+1}(t)dt}{(y-t)^{\alpha+1}} = \frac{\Phi_{m+1}(t)}{(y-t)^{\alpha}}\Big|_0^{y-\varepsilon} +$$

$$+\alpha\int_0^{y-\varepsilon}\frac{\Phi_{m+1}(t)-\Phi_{m+1}(y)}{(y-t)^{\alpha+1}}dt + \alpha\Phi_{m+1}(y)\int_0^{y-\varepsilon}\frac{dt}{(y-t)^{\alpha+1}} =$$

$$= \frac{\Phi_{m+1}(t)}{(y-t)^{\alpha}}\Big|_0^{y-\varepsilon} + \Phi_{m+1}y\,\frac{1}{(y-t)^{\alpha}}\Big|_0^{y-\varepsilon} + \alpha\int_0^{y-\varepsilon}\frac{\Phi_{m+1}(t)-\Phi_{m+1}(y)}{(y-t)^{\alpha+1}} =$$

$$= \frac{\Phi_{m+1}(0)-\Phi_{m+1}(y)}{y^{\alpha}} - \frac{\Phi_{m+1}(y-\varepsilon)-\Phi_{m+1}(y)}{\varepsilon^{\alpha}} +$$

$$+\alpha\int_0^{y-\varepsilon}\frac{\Phi_{m+1}(t)-\Phi_{m+1}(y)}{(y-t)^{\alpha+1}} \qquad (2.33)$$

Переходя к пределу при $\varepsilon\to 0$, получим

$$\int_0^y (y-t)^{k-m}\Phi_m(t)dt = \frac{\Phi_{m+1}(0)-\Phi_{m+1}(y)}{y^\alpha} +$$

$$+\alpha\int_0^y\frac{\Phi_{m+1}(t)-\Phi_{m+1}(y)}{(y-t)^{\alpha+1}}dt\,, \qquad (2.34)$$

так как

$$\lim\frac{\Phi_{m+1}(y)-\Phi_{m+1}(y-\varepsilon)}{\varepsilon^\alpha} = \lim\varepsilon^{1-\alpha}\Phi'_{m+1}(y)=0. \qquad (2.35)$$

Таким образом, получаем

$$I\_ = \int_0^y\frac{(y-t)^k\,dt}{e^t+1} = -\Big\{(y-t)^k\,\Phi_1(t) - k(y-t)^{k-1}\Phi_2(t) +$$

$$+(-1)^{m-1}k(k-1)\ldots(k-m+2)\,(y-t)^{k-m+1}\Phi_m(t)\Big\}\Big|_0^y + R_k\,, \qquad (2.36)$$

где остаток R_k имеет вид

$$R_k = -(-1)^m k(k-1)\ldots(k-m+1)\,y^{k-m1}\Phi_m(t)\Big|_0^y +$$

$$+(-1)^m k(k-1)\ldots(k-m+1)\int_0^y\frac{\Phi_{m+1}(t)-\Phi_{m+1}(y)}{(y-t)^{m+1-k}}dt\,. \qquad (2.37)$$

Учитывая, что члены, получающиеся от верхнего предела, имеют порядок e^{-y}, можно написать

$$I\_ = y^k\Phi_1(0) - ky^{k-1}\Phi_2(0) + \ldots(-1)^{m-1}k(k-1)\ldots$$

$$\ldots(k-m+2)\,y^{k-m+1}\Phi_m(0) + R_k\,, \qquad (2.38)$$

где

$$R_k = (-1)^m k(k-1)\ldots(k-m+1)\,y^{k-m}\,\Phi_m(0) + (-1)^m k(k-1)\ldots$$

$$\ldots(k-m+1)\int_0^y\frac{\Phi_{m+1}(t)-\Phi_{m+1}(y)}{(y-t)^{m+1-k}}dt\,. \qquad (2.39)$$

7. Дадим теперь асимптотическое выражение для интеграла

$$I_k(y) = \int_0^y\frac{x^k}{e^{x-y}+1}dx\,.$$

Преобразуем интеграл $I_k\,(y)$ следующим образом:

$$I_k(y) = \int_0^y\frac{x^k dx}{e^{x-y}+1} = \int_{-y}^{\infty}\frac{(t+y)^k\,dt}{e^t+1} = \int_{-y}^{y}\frac{(t+y)^k\,dt}{e^t+1} +$$

$$+\int_y^\infty\frac{(t+y)^k\,dt}{e^t+1}\,. \qquad (2.40)$$

Из рассмотрений п. 3 следует

$$\int_y^\infty\frac{(t+y)^k}{e^t+1}dt = 0\,(e^{-y}). \qquad (2.41)$$

Преобразуем интеграл $\int_{-y}^{y}\frac{(t+y)^k}{e^t+1}\ dt$:

$$\int_{-y}^{y}\frac{(t+y)^k}{e^t+1}\ dt = \int_0^y\frac{(t+y)^k}{e^t+1}dt = \frac{y^{k+1}}{e^t+1}dt = \int_0^y\frac{(t+y)^k}{e^t+1}dt +$$

$$+\int_{-y}^{0}(t+y)^k dt\ c\int_{-y}^{0}\frac{(t+y)^k}{1+e^t}dt = \int_{-y}^{y}\frac{(t+y)^k}{e^t+1} - \int_0^y\frac{(y-t)^k}{1+e^t}dt =$$

$$= \frac{y^{k+1}}{k+1} + I_+ - I_- \qquad (2.42)$$

Используя формулы п. 5 и 6, получим

$$\int_{-y}^{y} (t+y)^k \frac{dt}{e^t+1} = \frac{y^{k+1}}{k+1} + c_1 y^{k-1} + c_3 y^{k-3} + \ldots + c_s y^{k-s+1},$$

где s — нечетные числа,

$$c_1 = 2k\Phi_2(0),$$

$$c_3 = 2k(k-1)(k-2)\Phi_4(0),$$

$$c_s = 2k(k-1)\ldots(k-s+1)\Phi_{s+1}(0), \qquad (2.43)$$

а первый член остатка есть первый член ряда с отрицательной степенью y.

В частном случае интеграла $I_{½}(y)$ имеем

$$I_{½}(y) = {}^3/_2\, y^{3/2} + \Phi_2(0) y^{-½}. \qquad (2.44)$$

3. НЕКОТОРЫЕ АСИМПТОТИЧЕСКИЕ СООТНОШЕНИЯ ДЛЯ РЕШЕНИЙ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ФЕРМИ-ДИРАКА

1. Рассмотрим дифференциальное уравнение второго порядка

$$d^2\beta/ds^2 = sI_{½}(\beta/s). \qquad (3.1)$$

Будем рассматривать решения уравнения (3.1), удовлетворяющие краевым условиям

$$\beta = \beta_0 \ \text{ при } s = 0, \qquad (3.2а)$$

$$d\beta/ds = \beta/s \ \text{ при } s = b. \qquad (3.2б)$$

Мы ставим себе задачей исследовать вид решений и некоторых функций от них при следующих предельных случаях:

I. $\beta_0 \to 0$ $\qquad b \to \infty$,

II. $\beta_0 = 0(1)$, $\qquad b \to 0$,

III. $\beta_0 \to \infty$, $\qquad b \to 0$,

IV. $\beta_0 = 0(1)$, $\qquad b \to \infty$,

Заметим, что параметры β_0, b связаны с физическими параметрами ρ, Т соотношениями (1.26) и (1.27)

$$\beta_0 = c_1/T^{¾}, \qquad b = \bar{c}_2 T^{¼}/\rho^{⅓}$$

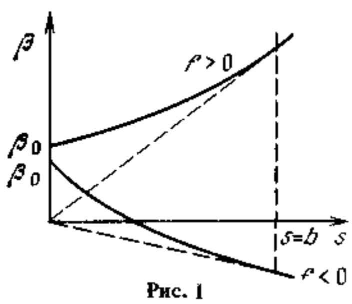

Рис. 1

Таким образом, случаи I, II, III и IV соответствуют следующим физическим случаям:

I. $\rho = 0(1)$, $\qquad T \to \infty$,

II. $T = 0(1)$, $\qquad \rho \to \infty$,

III. $\rho = 0(1)$, $\qquad T \to 0$,

IV. $T = 0(1)$, $\qquad \rho \to 0$.

Сделаем предварительно несколько общих замечаний. Из положительности функции $I_{⅓}(\beta/s)$ вытекает, что

$$d^2\beta/ds^2 > 0. \qquad (3.3)$$

Интегральные кривые всюду обращены выпуклостью вниз и могуг достигать своего максимума только на границах.

Из (3.3) следует, кроме того, что $d\beta/ds$ всюду на промежутке $(0, b)$ является монотонно возрастающей функцией. Условия (3.2а) и (3.26) на границе $s = b$ имеют следующий геометрический смысл: касательная к кривой в точке $s = b$ проходит через начало. Таким образом, кривые $\beta(s)$ могут иметь примерно такой вид, как на рис. 1.

Отсюда легко следуют соотношения

$$\beta_{max} > \beta > fs \qquad (3,4а)$$

$$\beta_0 + fs > \beta > fs, \qquad (3.4б)$$

$$\beta_0 + \frac{fb-\beta_0}{b}s > \beta > fs, \qquad (3.4в)$$

где

$$f = (d\beta/ds)_b = \beta_b/b. \qquad (3.5)$$

В силу монотонности функции $I_{1/3}(\beta/s)$ имеем

$$I_{1/3}(\beta_{max}/s > I_{1/3}(\beta/s) > I_{1/3}(f) \qquad (3,6а)$$

$$I_{1/3}(\beta_0/s + f) > I_{1/3}(\beta/s) > I_{1/3}(f), \qquad (3,6б)$$

$$I_{1/3}(\beta_0/s + f - \beta_0/b) > I_{1/3}(\beta/s) > I_{1/3}(f), \qquad (3,6в)$$

Предполагая конечной производную $d\beta/ds$ при $s = 0$, можно придать краевому условию (3.26) несколько иной вид. Рассмотрим интеграл

$$\int_0^b s^2 I_{1/2}(\beta/s)ds\,. \qquad (3.7)$$

Пользуясь уравнением (В. 1), получим

$$\int_0^b s^2 I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)ds = \int_0^b s^2\frac{d^2\beta}{ds^2}ds = \int_0^b sd\frac{d\beta}{ds} = s\frac{d\beta}{ds}\bigg|_0^b - \int_0^b \frac{d\beta}{ds}ds = s\frac{d\beta}{ds}\bigg|_0^b - \beta\bigg|_0^b.$$

Пользуясь краевым условием (3.2б) и условием $(d\beta/ds)_0 \neq \infty$, приходим к формуле

$$\int_0^\infty s^2 I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)ds = \beta_0. \qquad (3.8)$$

Интегральное соотношение (3.8) является эквивалентом условия (3.26)

Из уравнения (3.1) сразу же следует

$$\int_0^\infty sI_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)ds = f - \left(\frac{d\beta}{ds}\right)_0. \qquad (3.9)$$

Соотношения (3.8), (3.9) являются основными для дальнейших выкладок.

Геометрическая сущность аппроксимаций, применяемых в дальнейшем, заключается в следующем: и в случае I и в случаях II, IV левый конец кривой $\beta = \beta(s)$ является либо фиксированным (случаи II, IV), либо стремится к точке 0 (случай I), правый же конец устремляется в бесконечность или по оси s (I, IV случаи) или вверх (II случай). Так как при этом касательная в правом конце все время проходит через начало, а кривая обращена выпуклостью к касательной, то кривая асимптотически спрямляется, и с большой степенью точности на большом промежутке можно заменить

β/s на $(\beta/s)_b$.

Правда, в окрестности начала β/s имеет крутой ход, однако на значении интеграла

$$\beta_0 = \int_0^b I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)s^2 ds$$

это существенно не сказывается, так как подынтегральная функция имеет в нуле порядок $s^{1/2}$.

2. Рассмотрим первый предельный случай

$$\beta_0 \to 0, \quad b \to \infty. \qquad (3.10)$$

Докажем в первую очередь, что

$$f < 0, \text{ а следовательно, } \beta_b < 0. \qquad (3.11)$$

Из соотношения (3.8) и из неравенств

$$\beta/s > f, \qquad I_{1/3}(\beta/s) > I_{1/3}(f), \qquad (3.12)$$

следует

$$\beta_0 > I_{1/3}(f)\,(b^3/3); \tag{3.13}$$

откуда, принимая во внимание (3.10), имеем

$$I_{1/3}(f) \to 0 \text{ при } \beta_0 \to 0. \tag{3.14}$$

Из замечания в конце п. 2 следует, что $f < 0$ при β_0 достаточно малых.

Так как функция $d\beta/ds$ монотонно возрастающая, то из $d\beta/ds < 0$ при $s = b$ следует, что

$$d\beta/ds < 0 \text{ для } 0 \leqslant s < b, \tag{3.15}$$

т.е. фукнция $\beta(s)$ будет монотонно убывать.

В частности,

$$\beta_0 = \beta_{\max}. \tag{3.16}$$

Оценим интегралы

$$\int_0^1 I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right) s\,ds \text{ и } \int_0^1 I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right) s^2 ds \tag{3.17}$$

Пользуясь неравенствами (3.4), (3.6), получаем

$$\int_0^1 I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right) s\,ds < \int_0^1 I_{1/2}\left(\frac{\beta_0}{s} + f\right) s\,ds = \beta_0^2 \int_0^{1/\beta_0} I_{1/2}\left(\frac{1}{\tau} + f\right) \tau\,d\tau =$$

$$= \beta_0^2 \int_0^1 I_{1/2}\left(\frac{1}{\tau} + f\right) \tau\,d\tau + \beta_0^2 \int_1^{1/\beta_0} I_{1/2}\left(\frac{1}{\tau} + f\right) \tau\,d\tau, \text{ где } \tau = \frac{s}{\beta_0}. \tag{3.18}$$

Имеет место очевидное при $f < 0$ неравенство

$$I_{1/2}(1/\tau + f) < I_{1/2}(1/\tau) \text{ при } \tau > 1 \tag{3.19}$$

$$I_{1/2}(1/\tau + f) < I_{1/2}(1 + f) = ce^{f+1}, \tag{3.20}$$

c близко к $\Gamma(3/2)$. Отсюда

$$\int_0^1 I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right) s\,ds < \beta_0^2 \int_0^1 I_{1/2}\left(\frac{1}{\tau}\right) \tau\,d\tau + ce^{1+f} \beta_0^2 \int_1^{1/\beta_0} \tau\,d\tau <$$

$$< \beta_0^2 \int_0^1 I_{1/2}\left(\frac{1}{\tau}\right) \tau\,d\tau + \frac{c}{2} e^{1+f} \beta_0^2 < \bar{c}\,\beta_0^2, \tag{3.21}$$

где $\bar{c}$ – некоторая константа.

Заметим, что интеграл

$$\int_0^1 I_{1/2}\left(\frac{1}{\tau}\right) \tau\,d\tau \tag{3.22}$$

сходится, так как подынтегральное выражение $I_{1/2}(1/\tau)d\tau$ имеет в нуле порядок $\tau^{-1/2}$.

Таким образом, имеют место оценки

$$0 < \int_0^1 I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right) s^2 ds < \int_0^1 I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right) s\,ds < \bar{c}\,\beta_0^2. \tag{3.23}$$

С другой стороны,

$$\int_1^b I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right) s\,ds < \int_1^b I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right) s^2 ds < \int_0^b I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right) s^2 ds = \beta_0. \tag{3.24}$$

Отсюда имеем

$$\left(\frac{d\beta}{ds}\right)_b - \left(\frac{d\beta}{ds}\right)_0 = \int_0^b I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right) s\,ds < \beta_0 + \bar{c}\,\beta_0^2 = \alpha\beta_0. \tag{3.25}$$

В силу монотонности $(d\beta/ds)$ $0 < a < 1 + \epsilon$, $\epsilon \to 0$, $\beta_0 \to 0$.

$$(d\beta/ds)_b - d\beta/ds < a\beta_0, \quad d\beta/ds = f - \theta(s)\,\beta_0, \quad 0 < \theta < a. \tag{3.26}$$

Интегрируя соотношение (3.26), получим

$$\beta - \beta_0 = fs - \beta_0 \int_0^s \theta(s)\,ds = f \cdot s - \kappa(s)\,\beta_0 s, \quad 0 < \kappa < a. \tag{3.27}$$

откуда

$$\beta/s = f + \beta_0 (1/s - \kappa). \qquad (3.28)$$

Ясно, что, например, при $s > 1$ и достаточно малом β_0 будем иметь

$$1 - \epsilon < (\beta/s) f^{-1} < 1 + \epsilon \qquad (3.28')$$

соответственно

$$(1 - \delta)\, I_{1/2}(f) < I_{1/2}(\beta/s) < (1+\delta)\, I_{1/2}(f), \qquad (3.29)$$

$\delta \to 0$ при $\beta_0 \to 0$. Отсюда

$$\int_1^b I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right) s^2\, ds = \beta_0 - d\beta_0^2 = A \int_1^b I_{1/2}(f)\, s^2\, ds = A\, I_{1/2}(f)\, \frac{b^3 - 1}{3} \qquad (3.30)$$

где A близко к 1, $0 < d < \bar{c}$. Отсюда следует, что при $\beta_0 \to 0$

$$I_{1/2}(f) \to 3/\beta_0 / b^3. \qquad (3.31)$$

Ясно, что (см. разд. п. 2)

$$I_{3/2}(f) \to {}^9\!/_2\, \beta_0 / b, \qquad (3.32)$$

$$L = {}^2\!/_9 (b^3/\beta_0)\, I_{3/2}(f) \to 1, \quad \beta_0 \to 0. \qquad (3.33)$$

Найдем теперь асимптотическое значение интеграла

$$\int_0^b I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right) s ds. \qquad (3.34)$$

Как было показано,

$$\int_0^1 I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right) s ds < \bar{c}\, \beta_0^2.$$

Рассмотрим интеграл

$$\int_1^b I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right) s ds = \int_1^b I_{1/2}\left[\frac{\beta_0}{s} + f - k\beta_0\right] s ds = A \int_1^b I_{1/2}(f)\, s\, ds =$$

$$= A\, I_{1/2}(f)\, (b^2 - 1)/2 = {}^1\!/_2 B\, I_{1/2}(f) b^2 = {}^3\!/_2 D \beta_0\, b^{-1}, \qquad (3.35)$$

где $A, B, D \to 1$ при $\beta_0 \to 0$. Отсюда имеем

$$\int_0^b I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right) s ds = {}^3\!/_2 \frac{\beta_0}{b} + 0(\beta_0). \qquad (3.36)$$

Пользуясь соотношением

$$\rho b^3 = c_2/\beta_0, \qquad (3.37)$$

имеем

$$b = (c_2/\rho)^{1/3} \beta_0^{-1/3} \qquad (3.38)$$

$$\int_0^b I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right) s ds \sim \frac{3}{2}\left(\frac{\rho}{c_2}\right)^{1/3} \beta_0^{4/3} \qquad (3.39)$$

Рассмотрим, наконец, выражение

$$M = \frac{1}{3}\left[\int_0^b I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)\left(\frac{\beta}{\beta_0} + 1\right) s ds - f\right]. \qquad (3.40)$$

Преобразуем его следующим образом:

$$M = \frac{1}{3}\left[-f + \int_0^b I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right) s ds + \frac{1}{\beta_0}\int_0^b I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)\beta s ds\right]. \qquad (3.41)$$

Рассмотрим последний интеграл

$$\int_0^b I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)\beta s ds = \int_0^b I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)\frac{\beta}{s} s^2 ds \qquad (3.42)$$

Пользуясь для β/s выражением (3.28), получаем

$$\int_0^b I_{½}\left(\frac{\beta}{s}\right)\beta s ds = \int_0^b I_{½}\left(\frac{\beta}{s}\right)\left[f + \frac{\beta_0}{s} - k\beta_0\right] s^2 ds =$$

$$= f\int_0^b I½\left(\frac{\beta}{s}\right) s^2 ds + \beta_0\int_0^b I_{½}\left(\frac{\beta}{s}\right) sds - \tilde{k}\ \beta_0\int_0^b I_{½}\left(\frac{\beta}{s}\right) s^2 ds= \tag{3.43}$$

$$= f\beta_0 + \beta_0\int_0^b I_{½}\left(\frac{\beta}{s}\right) sds - \tilde{k}\ \beta_0^2.$$

Подставляя это выражение в (3.41) , получим

$$M = \frac{1}{3}\left[2\int_0^b I_{½}\left(\frac{\beta}{s}\right) sds - \tilde{k}\beta_0\right]. \tag{3.44}$$

Отсюда следует, что

$$M=0(\beta_0). \tag{3.45}$$

Рассмотрим выражение

$$J = \frac{2}{3}\ \frac{1}{\beta^0}\int_0^b I_{3/2}\left(\frac{\beta}{s}\right) s^2 ds. \tag{3.46}$$

Легко видеть, что

$$J \to \frac{2}{9}\ \frac{b_3}{\beta_0} I_{3/2}\ (f) \to L. \tag{3.47}$$

Рассматривая величину $\theta = J - M$, получаем

$$\theta\ = L+0(\beta_0). \tag{3.48}$$

Эти результаты будут в дальнейшем использованы в п. 3 разд. 4 для получения асимптотических членов величин P, E.

3. Рассмотрим второй предельный случай

$\beta_0 =\ 0(1)$, $b \to 0$.

Докажем, что в этом случае

$$\beta_{\max} = \beta_b = f \cdot b \tag{3. 49}$$

Предположим, что $\beta_0 = \beta_{\max}$. Тогда

$$\beta_0\ = \int_0^b I_{½}\left(\frac{\beta}{s}\right) s^2\ ds < \int_0^b I_{½}\left(\frac{\beta_0}{s}\right) s^2\ ds \tag{3. 50}$$

Так как $\beta_0 = 0$ (1), а b мало, β_0 /s - велико.

Применяя асимптотическую формулу (1.45) , получим

$$\beta_0\ < \frac{2}{3}\mathrm{A}\beta_0^{3/2}\int_0^b s^{1/2}\ ds = \frac{4}{9} A\beta_0^{4/3}\ b^{3/2}, \tag{3.51}$$

где $A \to 1$ при $b \to 0$. При достаточно малых b неравенство (3.51) приведет к противоречию.
Итак, при $b \to 0$ должны иметь $b_{\max} = \beta_0$, что и требовалось доказать. Оценим теперь порядок величин f, $\beta_b = f\, b$.

Из неравенств

$$\beta_b/s = f\, b/s > f, \tag{3.52}$$

$$\int_0^b I_{½}\left(\frac{\beta}{s}\right) s^2\ ds\ > \beta_0 > \int_0^b I_{½}(f)\ s^2\ ds, \tag{3. 53}$$

переходя к асимптотике, имеем

$$A_1\, {}^4\!/_9\, f^{3/2}\ b^3 > \beta_0 > A_2\ {}^2\!/_9\, f^{3/2}\ b^3, \tag{3.54}$$

где A_1, $A_2 \to 1$ при $b \to 0$. Отсюда следует, что

$$f \sim 1/b^2, \quad fb \sim 1/b. \tag{3.55}$$

Оценим теперь интеграл $\int\limits_0^b I_{½}(\beta/s)\, sds$:

$$\int\limits_0^b I_{½}\left(\frac{\beta}{s}\right) sds < \int\limits_0^b I_{½}\left(\frac{\beta_b}{s}\right) sds = B_1\frac{4}{3}f^{3/2}b^2 \sim \frac{1}{b}, \quad B_1 \to 1. \tag{3.55}$$

Таким образом,

$$(d\beta/ds)_b - (d\beta/ds)_0 < \text{const}/b. \tag{3.57}$$

Отсюда следует, что

$$(d\beta/ds)_0 \sim 1/b^2. \tag{3.58}$$

Таким образом, как и в предыдущем случае, разность производных на концах меньшего порядка по сравнению с самими производными на концах.

Для дальнейшего целесообразно перейти к новым переменным α, *t,* изменив масштабы:

$$\alpha = \beta b, \quad \alpha_0 = \beta_0\, b, \quad \alpha_1 = f\, b^2, \tag{3.59}$$
$$t = s/b, \quad t_0 = 0, \quad t_1 = 1.$$

Тогда

$$d\alpha/dt = b^2 d\beta/ds, \; \alpha/t = b^2\beta/s. \tag{3.60}$$

Ясно, что справедливы неравенства

$$\alpha_1/t > \alpha/t > \alpha_1. \tag{3.61}$$

Действительно, умножая неравенства

$$f\, b/s = \beta_b/s > \beta/s > f$$

на b^2, имеем

$$f\, b^3/s > b^2\rho/s > \beta b^2.$$

Переходя к новым переменным, получаем (3.61). Следовательно,

$$(d\alpha/dt)_0 \sim (d\alpha/dt)_1 = \alpha_1 \sim 1; \tag{3.62}$$
$$(d\alpha/dt)_1 - (d\alpha/dt)_0 \sim b.$$

Найдем выражение для $d\alpha/dt$ на интервале $0 \leqslant t \leqslant 1$.

Из (3.62) имеем силу монотонности $d\alpha/dt$ (c – некоторая ограниченная положительная функция)

$$d\alpha/dt = \alpha_1 - cb. \tag{3.63}$$

Интегрируя (3.63), получим

$$\alpha/t = \alpha_1 + b(\beta_0/t - d), \tag{3.64}$$

где d – ограниченная функция.

Рассматривая интеграл

$$\beta_0 = \int\limits_0^b I_{½}\left(\frac{\beta}{s}\right) s^2\, ds$$

в новых переменных, получаем

$$\frac{\beta_0}{b_3} = \int\limits_0^1 I_{½}\left(\frac{1}{b_2}\frac{\alpha}{t}\right) t^2 dt \tag{3.65}$$

Разобьем интеграл (3.65) на две части

$$\int\limits_0^1 = \int\limits_0^{\sqrt{\alpha_0}} + \int\limits_{\sqrt{\alpha_0}}^1 ; \quad \alpha_0 = \mathrm{b}\beta_0 \tag{3.66}$$

Оценим первый интеграл

$$\int\limits_0^{\sqrt{\alpha_0}} I_{½}\left(\frac{1}{b^2}\frac{\alpha}{t}\right) t^2 dt < \int\limits_0^{\sqrt{\alpha_0}} I_{½}\left(\frac{1}{b^2}\frac{\alpha_1}{t}\right) t^2 dt = A\frac{\alpha_1^{3/2}}{b^3}\alpha_0^{3/4} = \frac{B}{\beta^{2\,1/4}}. \tag{3.67}$$

В то же время

$$\int_{\sqrt{\alpha_0}}^{1} I_{1/2}\left(\frac{1}{b^2}\frac{\alpha}{t}\right)t^2dt = \int_{\sqrt{\alpha_0}}^{1} I_{1/2}\left\{\frac{1}{b_2}\left[\alpha_1+b\left(\frac{\beta_0}{t}-d\right)\right]\right\}t^2dt = c\int_{\sqrt{\alpha_0}}^{1} I_{1/2}\left(\frac{\alpha_1}{\beta^2}\right)t^2dt, \tag{3.68}$$

где c – близко к единице. Это следует из

$$b\ (\beta_0/t-d) < \mathrm{const}\ \sqrt{b}\ \text{ при } t \geqslant \sqrt{\alpha_0} = \sqrt{\beta_0}\ \sqrt{b}\ . \tag{3.69}$$

Отсюда

$$\int_{\sqrt{\alpha_0}}^{1} I_{1/2}\left(\frac{1}{b^2}\frac{\alpha}{t}\right)t^2dt = c\ \frac{2}{9}\ \frac{\alpha_1^{3/2}}{b^3}\ \left[1-\alpha_0^{3/2}\right]. \tag{3.70}$$

Таким образом, равенство (3.65) принимает вид

$$\frac{\beta_0}{b^2} = B\frac{1}{b^{2\frac{1}{4}}} + C\ \frac{2}{9}\ \frac{\alpha_1^{3/2}}{b^3}\ \left[1-\alpha_0^{3/2}\right]. \tag{3.71}$$

Умножая на b^3 и переходя к пределу при $b \to 0$, получим

$$\alpha_1 = \left(\tfrac{9}{2}\,\beta_0\right)^{2/3}. \tag{3.72}$$

Отсюда

$$I_{1/2}(f) = \tfrac{2}{3}\ f^{3/2} = \tfrac{2}{3}\,\alpha_1^{3/2}\ b^{-3} = 3\rho\beta_0^2/c^2; \tag{3.73}$$

$$I_{1/2}(f) = \tfrac{2}{5}\ f^{5/2} = \tfrac{2}{5}\,\alpha_1^{5/2}\ b^{-5}; \tag{3.74}$$

$$L = (\delta/T)\ \rho^{2/3}, \tag{3.75}$$

где

$$\delta = \tfrac{4}{45}\left(\tfrac{9}{2}\right)^{5/3} c_2^{-2/3}\ c_1^{4/3}. \tag{3.76}$$

Рассмотрим интеграл

$$\int_0^b I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)s\ ds.$$

В переменных α, t он имеет вид

$$\int_0^b I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)s\ ds = \frac{2}{3}\ \frac{\beta_0^{3/2}}{b}\int_0^1 \alpha\, t^{-1/2}\, dt \tag{3.77}$$

Применяя к последнему интегралу интегрирование по частям и заменяя в интеграле $d\alpha/dt$ на α_1, получим

$$\int_0^1 \alpha\, t^{-1/2}dt = 2\alpha t^{1/2}\Big|_0^1 - 2\int_0^1 \frac{d\alpha}{dt}t^{1/2}dt = \frac{2}{3}\alpha_1. \tag{3.78}$$

Таким образом,

$$\int_0^b I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)s\ ds = \frac{4}{9}\beta_0^{3/2}\,\frac{\alpha_1}{b}. \tag{3.79}$$

Принимая во внимание равенства (3.72), (1.26) и (1.27), получим

$$\int_0^b I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)s\ ds = \frac{4}{9}\left(\frac{2}{9}\right)^{2/3}\left(\frac{\rho}{c_2}\right)^{1/3}\left(\frac{c_1}{T^{3/4}}\right)^{5/2}. \tag{3.80}$$

Оценим после этого величины

$$M = -\frac{1}{3}\left[f - \int_0^b I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)\left(\frac{\beta}{\beta_0}+1\right)sds\right]; \tag{3.81}$$

$$J = \frac{2}{3\beta_0}\int_0^b I_{3/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)s^2ds; \qquad \theta = J - M.$$

Преобразуем интеграл в выражении для M

$$\int_0^b I_{\frac12}\left(\frac{\beta}{s}\right)\left(\frac{\beta}{\beta_0}+1\right)sds=\int_0^b I_{\frac12}\left(\frac{\beta}{s}\right)sds+\frac{1}{\beta_0}\int_0^b \ \boldsymbol{I}_{\frac12}\left(\frac{\beta}{s}\right)\frac{\beta}{s}\ s^2ds=$$

$$=\int_0^b I_{\frac12}\left(\frac{\beta}{s}\right)sds+\frac{1}{\beta_0}\int_0^b \ \boldsymbol{I}_{\frac12}\left(\frac{\beta}{s}\right)\left[\frac{\beta_0}{s}+f-\frac{d}{b}\right]s^2ds\ =$$

$$=2\int_0^b I_{\frac12}\left(\frac{\beta}{s}\right)sds+f-\frac{d}{b}\ =\ \frac{8}{9}\beta_0^{\frac32}\frac{\alpha_1}{b}+f-\frac{\tilde d}{b}\,; \tag{3.82}$$

$\tilde d$

Отсюда

$$M=\frac{8}{27}\beta_0^{\frac32}\alpha_1\frac{1}{b}-\frac{\tilde d}{3b}\,, \tag{3.83}$$

Или

$$M=A\,\rho^{\frac13} \tag{3.84}$$

где A — конечная величина.

Рассмотрим теперь выражение для J

$$J=\frac{2}{3\beta_0}\int_0^b I_{\frac32}\left(\frac{\beta}{s}\right)s^2ds\ =\ \frac{2}{9}I_{\frac32}(f)b^3=L=\frac{\delta}{T}\rho^{\frac23}\,. \tag{3.85}$$

Отсюда

$$\theta=J-M=(\delta/T)\,\rho^{\frac23}\ -A\rho^{\frac13}\,, \tag{3.86}$$

при $\rho\to\infty$

$$\theta\to L=(\delta/T)\,\rho^{\ \frac23}\,. \tag{3.87}$$

4. Рассмотрим теперь предельный случай

$$\beta_0\to\infty;\qquad\qquad b^3=\alpha\,/\,\beta_0\to 0;\qquad\qquad \alpha=c_2/\rho. \tag{3.88}$$

Докажем, что при достаточно малых a (достаточно больших ρ)

$$\beta_{\max}=\beta_b \tag{3.89}$$

Предположим, что $\beta_{\max}=\beta_0$. Тогда

$$\beta_0<\int_0^b I_{\frac12}(\beta_0\,/\,s)s^2ds\ \sim\ \tfrac23\ \ \beta_0^{\frac32}\int_0^b s^{\frac12}ds=\tfrac49\beta_0^{\frac32}b^{3/2}\,.$$

Отсюда

$$1<\tfrac49\,\beta_0^{\frac12}b^{\frac32}=\tfrac49\sqrt{a}\ \ \text{при}\ \beta_{\max}=\beta_0. \tag{3.90}$$

Таким образом, если

$$\sqrt{a}\ <\ \tfrac49\ ,\ \text{т.е.}\ \rho>16\ c_2/81, \tag{3.91}$$

то

$$\beta_{\max}=\beta_b \tag{3.92}$$

Рассмотрим этот случай. Применим обычные неравенства

$$\beta_{\max}/s\ =fb/s>\beta/s>f, \tag{3.93}$$

$$I_{\frac12}(fb/s)>\beta_0\,(\beta/s)>I_{\frac12}(f). \tag{3.94}$$

Интегрируя (3.94), получим

$$\int_0^b I_{\frac12}\left(\frac{fb}{s}\right)s^2ds>\beta_0\int_0^b I_{\frac12}(f)s^2ds\ , \tag{3.95}$$

так как

$$\beta_b>\beta_0;\qquad\qquad fb>\beta_0;\qquad\qquad f\geqslant\beta_0^{\frac43}/a^{\frac13}\,, \tag{3.94}$$

то можно применить асимптотические формулы. Таким образом, получим:

$$\tfrac49 f^{\ \frac32}\,b^3>\beta_0>\ \tfrac29 f^{\ \frac32}\,b^3. \tag{3.97}$$

Отсюда сразу же определяется точный порядок f

$$(9/4a)^{\frac23}\ \ \beta_0^{\frac43}<f<(9/2a)^{\ \frac23}\,\beta_0^{\frac43} \tag{3.98}$$

или

$$f=k\beta_0^{\frac43}\,;\qquad\qquad (9/4a)^{\frac23}\ <k<(9/2a)^{\ \frac23}\,. \tag{3.99}$$

Перейдем к новым переменным α, t с помощью формул

$$\alpha=\beta/\beta_0,\quad\ t=s/b. \tag{3.100}$$

Тогда справедливы соотношения

$$\frac{\alpha}{t}=\frac{b}{\beta_0}\cdot\frac{\beta}{s}\,;\quad \frac{d\alpha}{dt}=\frac{b}{\beta_0}\frac{d\beta}{ds}\,;\quad \frac{d^2\beta}{ds^2}=\frac{\beta_0}{b^2}\frac{d^2\alpha}{dt^2}\,;$$

$$\alpha(0)=\alpha_0=1;\quad \alpha(1)=\alpha_1, \tag{3.101}$$

и асимптотическое уравнение

$$d^2\beta/ds^2=\tfrac{2}{3}\,\beta^{3/2}s^{-1/2} \tag{3.102}$$

с краевыми условиями

$$\beta(0)=\beta_0,\qquad (d\beta/ds)\big|_{s=b}=\beta_b/b \tag{3.103}$$

переходит в

$$d^2\alpha/dt^2=\tfrac{2}{3}\sqrt{a}\,\alpha^{3/2}t^{-1/2},\quad \alpha_0=1,\ \ (d\alpha/dt)\big|_{t=1}=\alpha. \tag{3.104}$$

Интегральное соотношение

$$\beta_0=\int_0^b I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)s^2ds=\frac{2}{3}\sqrt{a}\int_0^b\beta^{3/2}s^{1/2}ds$$

перейдет в

$$1=\tfrac{2}{3}\sqrt{a}\int_0^1\alpha^{3/2}t^{1/2}dt\,. \tag{3.105}$$

Можно также перейти к переменным

$$t,\ \omega=\alpha\gamma,\qquad \gamma=\tfrac{4}{9}\,a=\tfrac{4}{9}\,c_2/\rho, \tag{3.106}$$

после чего переходим к уравнениям

$$d^2\omega/\,dt^2=\omega^{3/2}t^{-1/2};$$

$$\omega=\gamma\ \text{ при }\ t=0;\quad d\omega/dt=\omega\ \text{ при }\ t=1. \tag{3.107}$$

Интегральное соотношение (3.105) примет вид

$$\gamma=\int_0^1\omega^{3/2}t^{1/2}dt \tag{3.108}$$

Так как в уравнения и краевые условия (3.107) входит только один параметр $\gamma = = \tfrac{4}{9}$ (c_2/ρ), то и решения (3.104), (3.107) будут зависеть только от γ, t. Таким образом, решение (3.104) есть

$$\alpha=\alpha\,(c_2/\rho,\ t), \tag{3.109}$$

решение (3.107) есть

$$\omega=\omega\,(c_2/\rho,\ t), \tag{3.110}$$

Решение задачи (3.102) принимает вид

$$\beta=\beta_0\,\alpha\,(\gamma,t)=(\beta_0/\,\gamma)\,\omega\,(\gamma,t). \tag{3.111}$$

Оценим теперь функцию $\alpha_1=\alpha_1(\gamma)$. Из равенства (3.99) легко следует ,

$$\alpha_1=(b/\beta_0)f=k(\,c_2/\rho)^{1/3}\,. \tag{3.112}$$

Отсюда следует, что функция α_1 (c_2/ρ) заключена в пределах

$$(9/4)^{2/3}\,(\rho\,/c_2)^{1/3}<\alpha_1(\,c_2/\rho)<(9/2)^{2/3}\,(\rho\,/c_2)^{1/3}\,. \tag{3.113}$$

Таким образом, имеем

$$L=\varphi\,(\,c_2/\rho)T^{-1}, \tag{3.114}$$

где

$$\varphi\,(\,c_2/\rho)=\tfrac{4}{45}\,c_1^{4/3}\,(\,c_2/\rho)^{1/6}\,\alpha_1^{5/2}\,. \tag{3.115}$$

Отсюда нетрудно показать, пользуясь соотношением вириала, что

$$\theta=\Psi\left(\frac{c_2}{\rho}\right)\frac{1}{T},\ \Psi=\frac{8}{45}c_1^{4/3}\left(\frac{c_2}{\rho}\right)^{1/2}\left[\alpha_1^{5/2}-\frac{4}{3}\int_0^1\alpha^{5/2}t^{-1/2}dt\right]. \tag{3.116}$$

5. Рассмотрим предельный случай

$\beta_0=0(1),\qquad b\to\infty.$

Из интегрального соотношения

$$\int_0^b I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)s^2 ds = \beta_0$$

вновь следует, что при достаточно больших

$\beta/s < 0, \quad f = \beta_0/b < 0, \; f \to -\infty$ при $b \to \infty$. (3.117)

Отсюда следует, что

$\beta_{max} = \beta_0$. (3.118)

Легко показать, что на интервале (0, b) величина $f^{-1}\, \alpha\beta/ds$ заключена в пределах

$1 < f^{-1} \cdot d\beta/ds < 1 + \varepsilon, \; \varepsilon \to 0$ при $b \to \infty$. (3.119)

Соответственно величина /3/s на большей части интервала также заключена в довольно узких пределах.

Действительно,

$$0 < f - \left(\frac{d\beta}{ds}\right)_0 = \int_0^b I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)s ds = \int_0^1 I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)s ds + \int_1^b I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)s ds <$$

$$< \int_0^1 I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)s ds + \beta_0 = \beta_0^2 \int_0^{1/\beta_0} I_{1/2}\left(\frac{1}{t}\right)t dt + \beta_0 = 0(1)\,. \qquad (3.120)$$

В силу неравенств

$(d\beta/ds)_0 < d\beta/ds < f$ (3.121)

утверждение (3.119) с легкостью следует из (3.118) и (3.120).

Интегрируя (3.119), получим

$f(1 + \varepsilon)\, s < \beta - \beta_0 < fs,$ (3.122)

$\beta/s = \beta_0/s + f(1 + \delta), \qquad \delta \to 0, \quad b \to \infty.$ (3.123)

Рассмотрим теперь равенство

$$\beta_0 = \int_0^b I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)s^2 ds\,.$$

Разобьем интеграл на две части

$$\int_0^b I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)s^2 ds = \int_0^1 I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)s^2 ds + \int_1^b I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)s^2 ds\,. \qquad (3.124)$$

Рассмотрим первый интеграл

$$\int_0^1 I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)s^2 ds = \int_0^1 I_{1/2}\left[\frac{\beta_0}{s} + f(1+\delta)\right]s^2 ds =$$

$$= \beta_0^2 \int_0^{1/\beta_0} I_{1/2}\left[\frac{1}{t} + f(1+\delta)\right]t^2 dt\,, \quad t = \frac{s}{\beta_0}\,. \qquad (3.125)$$

При $f \to -\infty$ этот интеграл должен стремиться к нулю.

Действительно, подынтегральное выражение в нуле имеет порядок $t^{1/2}$, на конце интервала $t = 1/\beta_0$ имеет порядок $e^{f(1+\delta)}$. При $|f|$ достаточно большом подыинтеграль-
ная функция будет иметь на интервале (ε, $1/\beta_0$) порядок e^f ($\varepsilon \to 0$ при $f \to -\infty$). Применяя во втором интеграле (3.124) представление (3.123), получим

$\beta_0 = AI_{1/2}(f)\, b^3/3, \; A \to 1$ при $b \to \infty$. (3.126)

Отсюда

$$I_{3/2}(f) = \frac{3}{2}\, I_{1/2}(f) = \frac{1}{A}\frac{9}{2}\frac{\beta_0}{b_3}, \; L = 1/A \to 1 \text{ при } b \to \infty. \qquad (3.127)$$

Рассмотрим выражение для

$$J = \frac{2}{3\beta_0}\int_0^b I_{3/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)s^2 ds\,.$$

Вновь разбивая интеграл J на две части, получим

$$J = \frac{2}{3}\beta_0^2 \int_0^{1/\beta_0} I_{3/2}\left[\frac{1}{t} + f(1+\delta)\right]t^2 dt + \frac{2}{3\beta_0}\int_1^b I_{3/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)s^2 ds\,. \qquad (3.128)$$

Подынтегральное выражение в первом интеграле имеет порядок

$t^{-1/2}$ при t=0 и $e^{f(1+\delta)}$ при $t = 1/\beta_0$.

При $|f|$ достаточно большом оно будет иметь порядок e^f в интервале $(\varepsilon, 1/\beta_0)$, ($\varepsilon \to 0$ при $|f| \to \infty$). Отсюда вновь получаем

$$J = A\,(2/3\beta_0)\, I_{1/2}(f)\, b^3/3 = AL, \quad A \to 1 \text{ при } b \to \infty). \tag{3.129}$$

Пользуясь соотношением вириала, получим

$$\theta \to L \to 1. \tag{3.130}$$

4. ПОЛУЧЕНИЕ ИНТЕРПОЛЯЦИОННЫХ ФОРМУЛ

1. Анализ асимптотических соотношений, рассмотренных в разд. 2, показывает 1). В случаях I, II, IV справедлива асимптотическая формула

$$I_{1/2}(f) = 3\beta_0/b^3 \tag{4.1}$$

Это обстоятельство не является случайным.

Действительно, во всех случаях правый конец $(b, (\beta_b)$ кривой $\beta = \beta(s)$ удалялся от левого $(0, \beta_0)$ или в силу роста b (случаи I, IV), или в силу роста β_b (случай II).

Так как кривая $\beta(s)$ всегда является выпуклой, и касательная в ее правом конце проходит через начало, то во всех трех случаях это приводит к спрямлению кривой, гак что величина $(1/f)\,(d\beta/ds)$ заключается в узких пределах на всем интервале $(0, b)$. Соответственно величина β/s представляется в виде

$$\beta/s = \beta_0/s + f(1+\delta),\ \delta \to 0,\ (b, \beta_b) \to \infty. \tag{4.2}$$

Учитывая порядок $s^{1/2}$ функции $I_{1/2}\ (\beta/s)s^2$ при $s = 0$, легко приходим к формуле (4.1).

2). Таким образом, соотношение (4.1) является устойчивым относительно перехода от одной асимптотической области к другой. Есть основание поэтому полагать,

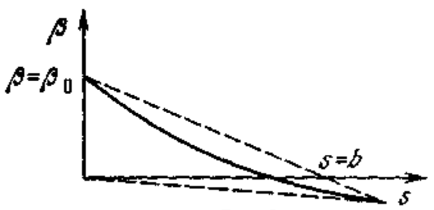

Рис. 2

что с внесением соответствующих поправок оно может дать хорошее приближение в широкой области переменных ρ, T.

3). Случаи I, IV ($T/\rho \to \infty$) сходны по своей асимптотике. И в том и в другом случае имеем

$$L,\ 0 \to 1. \tag{4.2}$$

Таким образом, в случае $T/\rho \to \infty$ имеем переход к идеальному газу.

Случаи II, III приводят к различной асимптотике. Однако общим для них является представление

$$L \cdot T = f(\rho); \quad \theta \cdot T = \varphi(\rho). \tag{4.4}$$

Отсюда следует, что в случае $T/\rho \to 0$ давление P и внутренняя энергия E 1 см^3 асимптотически становятся функциями от одного ρ [3].

2. Для уточнения формулы (4.1) необходимо перейти от аппроксимации кривой $\beta = \beta(s)$ с помощью касательной к аппроксимации с помощью хорды. Характер обеих аппроксимаций ясно виден на рис. 2.

Если в соотношении

$$\beta_0 = \int_0^b I_{1/2}\left(\frac{\beta}{s}\right) s^2 ds \tag{4.5}$$

положить в подынтегральном выражении

$$\beta/s = f \text{ (аппроксимация касательной),} \tag{4.6}$$

то получим значение β_0 с недостатком

$$\beta_0 = I_{1/2}(f) b^3/3 \tag{4.7}$$

Если положить

$$\beta/s = \beta_0/s + \tilde{f}, \quad \tilde{f} = f - \beta_0/b \quad \text{(аппроксимация хордой),} \tag{4.8}$$

[3] **Речь идет только о вкладе в энергию и давление электронного газа**

то получим значение β_0 с избытком

$$\beta_0 \int_0^b I_{1/2}\left[\frac{\beta_0}{s}+\tilde{f}\right]s^2 ds = \beta_0^3 \int_0^k I_{1/2} + \left[\frac{1}{t}+\tilde{f}\right]t^2 dt\,; \tag{4.9}$$

$k = b/\beta_0$

Истинное значение β_0 будет лежать где-то между значениями (4. 8) и (4.9).
Оценим интеграл (4.9) . Применяя интегрирование по частям, находим

$$\int_0^k I_{1/2} + \left[\frac{1}{t}+\tilde{f}\right]t^2 dt^2 = 1/3 \int_0^k I_{1/2} + \left[\frac{1}{t}+\tilde{f}\right]dt^3 =$$

$$= 1/3\, t^3 I_{1/2}\left[\frac{1}{t}+\tilde{f}\right]\Big|_0^k + 1/6 \int_0^k I_{-1/2} + \left[\frac{1}{t}+\tilde{f}\right]tdt =$$

$$= 1/3\, k^3 I_{1/2}(f) + 1/12 \int_0^k I_{-1/2} + \left[\frac{1}{t}+f\right]dt^2 =$$

$$= 1/3\, k^3 I_{1/2}(f) + 1/12\, k^2 I_{-1/2}(f) + 1/12\, 2kI_{-1/2}(f) + R, \tag{4.10}$$

где

$$R = 1/12 \int_0^k I_{-1/2} + \left[\left(\frac{1}{t}+\tilde{f}\right) - I_{-1/2}(f)\right]dt > 0. \tag{4.11}$$

С большой степенью точности в большой области переменных проинтегрированную часть можно заменить через

$$1/3\, I_{1/2}(f)[k^3+(k+k^2)/2]. \tag{4.12}$$

Таким образом, аппроксимация по хорде приводит к следующему выражению для β_0:

$$\beta_0 = 1/3\, b^3 I_{1/2}(f)[1+((\varepsilon+\varepsilon^2)/2)+\delta]; \quad \varepsilon = \beta_0/b. \tag{4.13}$$

Первый член выражения (4.13) дает аппроксимацию по касательной, остальные члены положительны. Отбрасывая $\delta > 0$, получаем некоторую аппроксимацию, заключенную между аппроксимацией по хорде и аппроксимацией по касательной. Она дается формулой

$$\beta_0 = 1/3\, b^3 I_{1/2}(f)[1+((\varepsilon+\varepsilon^2)/2)]; \quad \varepsilon = \beta_0/b. \tag{4.14}$$

Так как истинное значение также заключено между этими аппроксимациями, то можно ожидать, что формула (4.14) дает хорошее приближение в широкой области переменных. Отсюда для L получается выражение

$$L = 2/9\, (b^3/\beta_0) I_{3/2}(f), \tag{4.15}$$

где f определяется из (4.14).

С большой степенью точности можно также положить

$$L = 1/(1+\alpha). \tag{4.16}$$

Что касается θ, то в этом параграфе выражение для θ мы получим из термодинамического

$$\frac{\partial E_2}{\partial(1/\rho)} = P\frac{\partial P}{\partial T} - P\,. \tag{4.17}$$

которое в наших переменных L, θ принимает вид

$$\frac{3}{2}\frac{\partial\theta}{\partial(1/\rho)} = \frac{\partial L}{\partial T}. \quad (4.18)$$

Пользуясь выражением (4.16) для L и представлением β_0, b через ρ, T, получим

$$\frac{\partial\theta}{\partial(1/\rho)} = \frac{2}{3}\rho T\frac{\partial\alpha/\partial T}{(1+\alpha)} = \frac{2}{3}\frac{1/2\varepsilon+\varepsilon^2}{(1+\varepsilon/2+\varepsilon^2/2)^2}, \quad \alpha = \frac{\varepsilon+\varepsilon^2}{2}. \quad (4.19)$$

Переходя к переменному ε получим

$$\frac{\partial\theta}{\partial\varepsilon} = \frac{1+2\varepsilon}{(1+\varepsilon/2+\varepsilon^2/2)^2}. \quad (4.20)$$

Интегрируя (4.20), находим

$$\theta = 1-2\ \frac{\varepsilon+\varepsilon^2}{2+\varepsilon+\varepsilon^2} + \varphi(T), \quad (4.21)$$

где $\varphi(T)$ – произвольная функция T, причем

$$\varphi(T) \to 0 \text{ при } T \to \infty. \quad (4.22)$$

$\varphi(T)$ интерполируется по просчитанным вариантам.

3. Дадим теперь асимптотические выражения для физических величин P (давление) и E (внутренняя энергия 1 см^3 вещества).

Как известно, P и E выражаются через величины L, θ следующим образом:

$$P = c\, Z/A\, \rho T\,(L + 1/Z), \quad (4.23)$$

$$E = {}^3/_2\, c(Z/A)\,\rho\, T\,(\theta - 1/Z), \quad (4.24)$$

где A – атомный вес вещества, Z – заряд ядра атома (порядковый номер), $c = N_0 \cdot R$, $N_0 = 6{,}023 \cdot 10^{23}$ – число Авогадро, $k = 1{,}38\text{-}\ 10^{-16}$ эрг/град – постоянная Больцмана. T измеряется в градусах, P, E, ρ измеряются в системе CGS.

Таким образом, получаем для P и E следующие выражения.

Асимптотический случай I ($\rho = 0\ (1)$, $T \to \infty$)

$$P = a\rho T(1 + 1/Z), \quad E = {}^3\!/_2\, a\rho T(1 + 1/Z), \quad a = cZ/A. \quad (4.25)$$

Асимптотический случай II ($T = 0\ (1)$, $\rho \to \infty$)

$$L = (\delta/T)\,\rho^{2/3}, \quad \theta \to L, \quad (4.26)$$

где δ – некоторая функция от A, Z. Соответственно этому получаем

$$P = a\cdot\delta\cdot\rho^{5/3}, \quad E = {}^3\!/_2\, P. \quad (4.27)$$

Асимптотический случай III ($\rho = 0\ (1)$, $T \to 0$) (ρ достаточно велико)

$$L = \varphi(A, Z, \rho)\cdot T, \quad (4.28)$$

где (ρ - некоторая функция ρ, A, Z (см. (3.114) – (3.116):

$$\theta = \Psi(A, Z, \rho)\ (1/T). \quad (4.29)$$

Отсюда

$$P = a\cdot\varphi(\rho), \quad E = 3/2a\,\Psi(\rho). \quad (4.30)$$

Асимптотический случай IV ($T = 0\ (1)$; $\rho \to 0$

$$L = \theta = I; \quad P = a\rho T; \quad E = {}^2/_3\, a\rho T. \quad (4.31)$$

5. ПРИБЛИЖЕННАЯ ФОРМУЛА ДЛЯ ВНУТРЕННЕЙ ЭНЕРГИИ 1 см^3

1. В разд. 4 была получена приближенная формула для L в функции от β_0, b, основанная на асимптотическом исследовании решений уравнения Ферми-Дирака ц дающая среднюю точность 1,7% в довольно широкой области переменных β_0, b. В настоящем разделе мы ставим задачей получить соответствующую формулу для внутренней энергии 1 см^3 вещества.

Формула основывается на тех же аппроксимационных соображениях, чго и формула для L, т.е. на замене кривой $\beta = \beta(s)$ касательной и хордой. В данном случае приходится прибегать к различным аппроксимациям на различных участках интервала

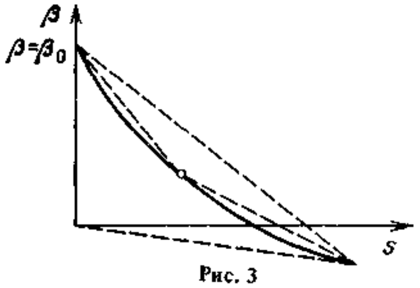

Рис. 3

(0, b). Так как выражение для L получено, то в силу соотношения вириала достаточно знать M или J, чтобы определить θ.

Из аналитических соображений удобнее определять J.

Рассмотрим выражение для J

$$J = \frac{2}{3\beta_0}\int_0^b I_{3/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)s^2 ds \tag{5.1}$$

Аппроксимация интеграла по касательной является здесь более грубой, чем в случае интеграла

$$\int_0^b I_{3/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)s^2 ds \tag{5.2}$$

так как порядок обращения в бесконечность подынтегральной функции в $s = 0$ уве-личивается на 1: с $s^{1/2}$ до $s^{-1/2}$, поэтому аппроксимирующая кривая должна обяза-тельно проходить через точку (0, (β_0). Такой аппроксимацией является, например, хорда или ломаная (рис. 3).

Аппроксимация хордой является, однако, слишком грубой, аппроксимация лома-ной приводит к большим аналитическим трудностям. Поэтому мы аппроксимируем кривую $\beta = \beta(s)$ на некотором участке (0, c) с помощью хорды, на участке (c, b) - с помощью касательной. Последнее возможно, так как на участке, достаточно удален-ном ог начала, аппроксимация касательной является достаточно хорошей. В качестве точки c мы выберем точку $s = \beta_0$.

Аппроксимируя $\beta = \beta(s)$ по касательной, имеем

$$\beta = f \cdot s, \tag{5.3}$$

аппроксимируя по хорде, получаем

$$\beta = \beta_0 + \tilde{f}\cdot s, \quad \tilde{f} = f - \varepsilon, \ \varepsilon = \beta_0/b. \tag{5.4}$$

Для J получаем следующее выражение:

$$J = \frac{2}{3\beta_0}\int_0^b I_{3/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)s^2 ds = \frac{2}{3\beta_0}\int_0^{\beta_0} I_{3/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)s^2 ds + \frac{2}{3\beta_0}\int_{\beta_0}^b I_{3/2}\left(\frac{\beta}{s}\right)s^2 ds. \tag{5.5}$$

Аппроксимируя в первом интервале по хорде, во втором – по касательной, получаем

$$J = \frac{2}{3}\beta_0\int_0^1 I_{3/2}\left[\frac{1}{t} + \tilde{f}\right]t^2 dt + L\,(1 - \varepsilon^3). \tag{5.5′}$$

Таким образом, для/ получается следующее выражение:

$$\text{I. } J = L\,(1 - \varepsilon^3) + \Phi(\tilde{f})\,\beta_0^2, \tag{5.6}$$

где

$$\Phi(\tilde{f}) = \frac{2}{3}\int_0^1 I_{3/2}\left[\frac{1}{t} + \tilde{f}\right]t^2 dt. \tag{5.7}$$

Рис. 4

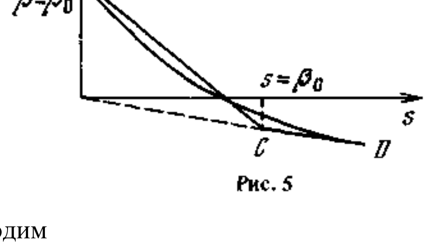

Рис. 5

Применяя интегрирование но частям, находим

$$\Phi(\tilde{f}) = \frac{2}{3}\int_0^1 I_{3/2}\left[\frac{1}{t}+\tilde{f}\right]\frac{dt^3}{3} =$$

$$=\frac{2}{9}I_{3/2}(\tilde{f}+1)+\frac{1}{3}\int_0^1 I_{1/2}\left(\frac{1}{t}+\tilde{f}\right)tdt = \frac{2}{9}\tilde{I}_{3/2}(\tilde{f}+1)+$$

$$+\frac{1}{6}I_{1/2}(\tilde{f}+1)+\frac{1}{12}\int_0^1 I_{-1/2}\left(\frac{1}{t}+\tilde{f}\right)dt\ . \qquad (5.8)$$

Таким образом, для Φ ($\tilde{f}$) получаются дополнительно следующие выражения:

$$\Phi(\tilde{f}) = \frac{2}{9}I_{3/2}(\tilde{f}+1)+\frac{1}{3}\int_0^1 I_{1/2}\left(\frac{1}{t}+\tilde{f}\right)tdt\ , \qquad (5.9)$$

$$\Phi(\tilde{f}) = \frac{2}{9}I_{3/2}(\tilde{f}+1)+\frac{1}{6}I_{1/2}(\tilde{f}+1)+\frac{1}{12}\int_0^1 I_{-1/2}\left(\frac{1}{t}+\tilde{f}\right)dt\ . \qquad (5.10)$$

Аппроксимационная формула (5.6) может быть варьируема различным образом путем изменения аппроксимирующих отрезков на соответствующих участках.

Заменяя на участке (0, β) прямую с наклоном ($\tilde{f}$)прямой с наклоном $f-1$, получим формулу

II. $J = L(1-\varepsilon^3) + \Phi(f-1)$. (5.11)

Различие между аппроксимациями I и II видно на рис. 4 и 5.

В первом случае аппроксимирует ломаная *ABCD,* во втором – ломаная *ACD.* Ясно, что аппроксимация с помощью *CD* – с недостатком. Наконец, аппроксимация на (β_0, b)) может быть улучшена введением поправки, приближающей аппроксимацию касательной *CD* к аппроксимации хордой *BD*.

3. Вычисление функции

$$\Phi\ (\alpha) = \frac{2}{3}\int_0^1 I_{3/2}\left(\frac{1}{t}+\alpha\right)t^2 dt\ . \qquad (5.12)$$

Непосредственное вычисление Φ (α) с помощью формул численного интегрирования затруднительно ввиду наличия особенности типа $t^{-1/2}$ в 0.

Выделяя особенность в подынтегральном выражении (5.12), получаем

$$\Phi\ (\alpha) = \frac{8}{15}+\frac{2}{3}\int_0^1 f(t,\alpha)dt\ , \qquad (5.13)$$

$$f(t,\ \alpha) = I_{3/2}\ (1/t + \alpha)\ t^2 - 0{,}4/\ t^{1/2}\ . \qquad (5.14)$$

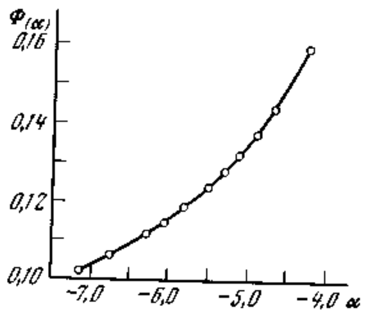

Рис. 6

Аналогично из выражений (5.9) и (5.10) находим

$$\Phi(\alpha) = \frac{9}{2}I_{3/2}(\alpha+1)+\frac{4}{9}+\frac{1}{3}\int_0^1 g(t,\alpha)\ dt, \qquad (5.15)$$

$$g(t,\ \alpha) = I_{1/2}\ (1/t + \alpha)\ t - 0{,}6667/t^{1/2}\ ; \qquad (5.16)$$

$$\Phi(\alpha) = \frac{1}{3} + \frac{9}{2} I_{3/2}(\alpha+1) + \frac{1}{6} I_{1/2}(\alpha+1) + \int_0^1 h(t,\alpha)dt\,; \qquad (5.17)$$

$$h(t,\alpha) = I_{-1/2}\left(\frac{1}{t}+\alpha\right) - \frac{2}{t^{1/2}}\,. \qquad (5.18)$$

Функции $f(t, \alpha)$, $g(t, \alpha)$, $h(t, \alpha)$ уже не обладают особенностями.

Интегралы от $f(t, \alpha)$, $g(t, \alpha)$, $h(t, \alpha)$ вычислялись по формуле Гаусса с восемью точками. При этом для $\Phi(\alpha)$ получились три значения, отличающиеся в среднем друг от друга на 0,5%.

В качестве $\Phi(\alpha)$ бралось среднее арифметическое вычисленных трех значений. $\Phi(\alpha)$ вычислялось в восьми узловых точках на интервале $-10 < \alpha < -1$. При этом уже линейная интерполяция для промежуточных α обеспечивает точность 0,1%. Это объясняется тем, что Φ является функцией с положительной монотонно возрастающей производной и имеет очень плавный ход (рис. 6).

С табулированными $\Phi(\alpha)$ определялось по формулам J:

$$J = L(1-\varepsilon^3) + \Phi(f-\varepsilon)\beta_0^2 \text{ (аппроксимация I)}, \qquad (5.19)$$

$$J = L(1-\varepsilon^3) + \Phi(f-1)\beta_0^2 \text{ (аппроксимация II)}. \qquad (5.20)$$

После этого вычислялось θ по формуле

$$\theta = 2L - J. \qquad (5.21)$$

Затем вычислялся процент ошибки в определении величин J, θ, вычисляемых по формуле сравнительно с просчитанными вариантами:

$$\Delta \text{ в } \% = \frac{J_{сч} - J}{J_{сч}} \cdot 100\,; \qquad \Delta \text{ в } \% = \frac{\theta_{сч} - \theta}{\theta_{сч}} \cdot 100\,.$$

Результаты сравнения сведены в таблицу; они показали в весьма широкой области следующий средний процент ошибки по 12 просчитанным вариантам:

аппроксимация I J 2,9 %, аппроксимация II J 3,0 %,
аппроксимация I θ 4,1%, аппроксимация II θ 3,7 %.

4. Оценка точности аппроксимационных формул. Аналитическое исследование величины ошибки затруднительно. Таким образом, ошибка определяется сравнением с просчитанными вариантами. Однако для оценки ошибки можно применять и полуэмпирический метод, основывающийся на сравнении с одним ("наихудшим") вариантом и свойствах монотонности ошибки.

Аппроксимационная формула

$$J = L(1-\varepsilon^3) + \Phi(f-\varepsilon)\beta_0^2 \qquad (5.22)$$

носит асимптотический характер (случаи I, IV) и поэтому тем точнее, чем ближе β_0, b примыкают к асимптотической области.

Действительно, в случае I $\beta_0 \to 0$, $b \to 0$, $\varepsilon \to 0$, в случае IV $/\beta_0 = 0\,(1)$, $b \to \infty$, $\varepsilon \to 0$.

Заметим, что область применения формулы (5.22) меньше сравнительно с формулой L, полученной в разд. 3:

$$L = 2/9\,(b^3/\beta_0)\, I_{3/2}(f), \qquad (5.23)$$

где

$$\beta_0 = (1+\alpha)(b^3/3) I_{1/2}(f), \qquad \alpha = (\varepsilon + \varepsilon^2)/2, \qquad (5.24)$$

и справедливой для асимптотических областей I, II, IV.

Формула (5.22) для асимптотической области II $\beta_0 \to \infty$, $b \to 0$) уже неприменима, так как она выведена в предположении, что $\beta_0 < b$ и, в то время как в случае II $\beta_0/b \to \infty$.

Попытаемся определить степень точности аппроксимационной формулы (5.22) (аппроксимация I), пользуясь некоторыми геометрическими соотношениями (см. рис. 4, 5) и соотношениями (1.26), (1.27).

Предположим, что для некоторых значений ρ_0, T_0, которым соответствуют значения (β_{00}, b_0, мы добились точности

$$\Delta = (J_{сч} - J_{апр})/\,J_{сч}.$$

Вообще говоря, для значений параметров β_0, b_0, $\beta_0 < \beta_{00}$ точность должна увеличиться.

Это следует из того, что при фиксированном b_0 и уменьшающемся β_0 и кривая, и хорда приближаются к касательной, что увеличивает точность как на участке $(0, \beta_0)$ (аппроксимация хордой), так и на участке (β_0, b_0) (аппроксимация касательной). Аналогично, если β_0 фиксировано, а b возрастает, то точность возрастает. Это следует из таких же геометрических соображений.

Обозначая через $\Delta(\beta_0, b)$ функцию относительной ошибки

$$\Delta(\beta_0, b) = (J_{сч} - J_{апр})/\,J_{сч},$$

получим таким образом неравенство

$$|\Delta(\beta_{00}, b_0)| > \Delta(\beta_0, b_0)|, \qquad \beta_{00} > \beta_0,$$

$$|\Delta(\beta_0, b_0)| > \Delta(\beta_0, b)|, \qquad b > b_0. \qquad (5.25)$$

Рассуждения являются не вполне строгими, поэтому неравенства (5.25) отражают только основную тенденцию роста Δ, но больших отклонений от нее, очевидно, не должно быть.

Таблица значений Δ

	1,545	1,545	1,998	2,074	2,159	2,492
21,78						
18,605						
17,11						
15,125						
14,31					0,5 3,7	
					−0,4 −7,7	
13,78						−1,1 2,6
						1,1 −3,2
13,005						
12,005				0,5 3,7		
				−0,5 −4,0		
10,35		0,7 4,1				
		−0,9 −4,6				
9,245	2,2 4,8					
	−2,2 −4,9					
8,405			0,7 4,6			
			−0,5 −5,8			

2,518	2,942	2,946	3,165	3,252	3,587	3,952
				3,1 −1,7		
				3,9 2,1		
		−2,7 0,7				
		3,1 −0,9				
−0,8 2,5						
1,0 −2,6						
						−9,7 −4
						16,1 6,8
	1,1 −3,7					
	−1,4 −5,0					
					−9,2 −2 9	
					15 4,8	
			−7,8 −1,0			
			11,9 1,6			

Таблица подтверждает это. Заметим, что аппроксимация II не обладает таким свойством монотонности ошибки.

Рассмотрим теперь $\Delta(\beta_0, b)$ как функцию параметров ρ, T, пользуясь соотношениями (1.26) и (1.27).

При фиксированном ρ и возрастающем T β_0 уменьшается, а b увеличивается, следовательно, точность увеличивается. При фиксированном T и уменьшающемся ρ, b увеличивается и точность увеличивается.

Таким образом, будем иметь

$$|\Delta(\rho,T_1)| < ||\Delta(\rho,T_2)|, \quad T_1 > T_2,$$
$$|\Delta(\rho_1,T)| < ||\Delta(\rho_2,T)|, \quad \rho_1 < \rho_2. \tag{5.26}$$

Таким образом, выбирая $T_{\min}$, $P_{\max}$, можем получить верхнюю оценку для ошибки $\Delta(\rho, T)$ в области $\rho \leqslant \rho_{\max}$ $T > T_{\min}$.

Таблица показывает ход ошибки по переменным β_0, b. Из таблицы видно, что аппроксимация I, соответствующая рис. 2 ($\widetilde{f} = f - \varepsilon$), удовлетворяет в основном этому требованию монотонности в отличие от аппроксимации II, которая дает тот же средний процент ошибки, но не обладает свойством монотонности и не улучшает точности при переходе в асимптотику.

В случае монотонной аппроксимации ошибку можно было бы оценивать сравнением с наихудшим вариантом.

5. Окончательные формулы. Переходя к переменным ρ, T, получаем следующие выражения для L, θ в функции от ρ, T

$$I_{1/2}(f) = \alpha_1 (\rho / T^{3/2}) (1 + 0{,}5\, \alpha_2 \rho^{1/3} / T + \alpha_2 \rho^{2/3}\, T^2. \tag{5.27}$$

Это уравнение служит для определения величины /, которая входит в дальнейшие формулы.

Для довольно широкой области ρ, T для f можно дать явное выражение

$$f = \ln(2/\sqrt{\pi}) + \ln\alpha_1 + \ln\rho - {}^3/_2 \ln T - [\,1 + 0{,}5\, \alpha_2\, \alpha_2\, \rho^{1/3} / T + \alpha_2 \rho^{2/3}\, T^2], \tag{5.28}$$

которое легко следует из асимптотики $I_{1/2}(f)$:

$$L = (2/3\alpha_1)(T^{3/2}/\rho) I_{3/2}(f), \tag{5.29}$$

или

$$L = (1 + 0{,}5\, \alpha_2 \rho^{1/3} / T + \alpha_2 \rho^{2/3}\, T^2)^{-1} k(f), \tag{5.30}$$

где

$$k(f) = {}^2\!/_3\ I_{3/2}(f)\,/\,\mathrm{I}_{1/2}(f) \tag{5.31}$$

при $f \ll 0$ $k \to 1$. Поэтому в этом случае для L можно пользоваться более грубой, но достаточно точной формулой

$$L = [1 + 0{,}5\,\alpha_2\,(\rho^{1/3}/T + \alpha_2\,\rho^{2/3}\,T^2)]^{-1}. \tag{5.32}$$

Для J, θ получаем выражение

$$J = L\,[1 - a_2^3\,\rho/T^3] + c_1^2\,T^{-3/2}\,\Phi(f - \alpha_2\,\rho^{1/3}/T), \tag{5.33}$$

$$\theta = L\,[1 + a_2^3\,\rho/T^3] - c_1^2\,T^{-3/2}\,\Phi(f - \alpha_2\,\rho^{1/3}/T). \tag{5.33}$$

Отсюда P, E выражаются следующим образом:

$$P = c \cdot \rho\,(L + 1/Z), \tag{5.35}$$

$$E = {}^3/_2\ c \cdot \rho\,(\theta + 1/Z). \tag{5.36}$$

Константы α_1, c_1, c_2, имеют следующие значения (см. (1.26) и (1.27)) :

$$c = NkT\,(Z/A)$$

$$c_1 = \frac{4\pi e^3 (2m)^{3/4}}{h^{3/2} k^{3/4}} Z, \quad \bar{c}_2 = \frac{4\pi (2m)^{3/4} \cdot e \cdot k^{1/4}}{h^{3/2}} \left(\frac{4}{3}\pi N\right)^{-1/3} A^{1/3};$$

$$c_2 = c_1\, c_2^3; \tag{5.37}$$

$$\alpha_1 = 3\,c_1^2 / c_2; \qquad \alpha_2 = c_1^{4/3}.$$

6. Приложения. Результаты счета сведены в таблицу, в которой показана Δ (относительная ошибка) в функции от β_0, b. В каждой клетке расположены четыре величины в следующем

J_{I}	J_{II}
θ_{I}	θ_{II}

,

где значок I относится к первой аппроксимации, значок II – ко второй.
На графике (рис. 6) представлена функция

$$\Phi(\alpha) = \frac{2}{3} \int_0^1 I_{3/2}\left(\frac{1}{t} + \alpha\right) t^2 dt.$$

ЛИТЕРАТУРА

1. *Thomas.* // Proc. Cambridge Philos. Soc. 1927. Vol. 23, pt 5.
2. *Fermi E.* // Atti Accad. Lincei. Rend. Cl. fis. mat. 1927. Vol. 6. P. 602; Ztschr. Phys. 1928. Bd. 48. S. 73.
3. *Feynman R.P., Metropolis N.E., Teller* // Phys. Rev. 1949. Vol. 75. P. 1561.
4. *Brachman.* // Ibid. 1951. Vol. 84. P. 1263.