

Научная статья

УДК 372.853, 536.11

DOI 10.25205/2541-9447-2023-18-3-113-128

Использование систем компьютерной математики для решения некоторых задач термодинамики и статистической физики

Петр Васильевич Пипич

Высший колледж информатики Новосибирского государственного университета
Новосибирск, Россия

pipich.petr@mail.ru

Аннотация

С помощью математического пакета MathCAD получены решения задач с использованием уравнения теплового баланса, в которых теплоемкость рассчитывалась по теории Дебая, а также применялась сплайн-интерполяция экспериментальных данных по теплоемкости из справочника. Вычислена степень ионизации гелия при заданной температуре. Рассмотрен пример влияния примеси лития на степень ионизации водорода. Рассчитаны энергия и давление неона в области многократной ионизации. Построены изотермы идеального ферми-газа. Построен график функции распределения Ферми – Дирака для различных температур. Вычислена концентрация электронов и позитронов при температурах соответствующих энергии покоя электронов. Приведенные примеры можно использовать в учебном процессе.

Ключевые слова

системы компьютерной математики, уравнение теплового баланса, теория Дебая, сплайн-интерполяция, ионизация газов, идеальный ферми-газ, электрон-позитронная плазма

Для цитирования

Пипич П. В. Использование систем компьютерной математики для решения некоторых задач термодинамики и статистической физики // Сибирский физический журнал. 2023. Т. 18, № 3. С. 113–128. DOI 10.25205/2541-9447-2023-18-3-113-128

The Use of Computer Mathematics Systems for Solving Some Problems of Thermodynamics and Statistical Physics

Piotr V. Pipich

Higher College of Computer Science Novosibirsk State University
Novosibirsk, Russian Federation

pipich.petr@mail.ru

Annotation

With the help of the MathCAD mathematical package, solutions to problems using the heat balance equation were obtained, in which the heat capacity was calculated according to Debye theory, and spline interpolation of experimental data on heat capacity from the reference book was also used. The degree of helium ionization at a given temperature is calculated. An example of the influence of lithium impurity on the degree of hydrogen ionization is considered. The energy and pressure of neon in the region of multiple ionization are calculated. Isotherms of an ideal fermi gas are con-

© Пипич П. В., 2023

structed. A graph of the Fermi-Dirac distribution function for various temperatures is constructed. The concentration of electrons and positrons at temperatures corresponding to the rest energy of electrons is calculated. These examples can be used in the educational process.

Keywords

computer mathematics systems, heat balance equation, Debye theory, spline interpolation, ionization of gases, ideal fermi gas, electron-positron plasma.

For citation

Pipich P. V. The use of computer mathematics systems for solving some problems of thermodynamics and statistical physics. *Siberian Journal of Physics*, 2023, vol. 18, no. 3, pp. 113–128 (in Russ.). DOI 10.25205/2541-9447-2023-18-3-113-128

Введение

При изучении и преподавании физики преподаватели и студенты сталкиваются с тем, что существует ряд задач, простых с физической точки зрения, но относительно сложных в вычислительном отношении. Например: уравнение теплового баланса является простым, когда теплоемкость постоянна, но зависимость теплоемкости от температуры усложняет вычисления. Функция распределения Ферми – Дирака выглядит обманчиво просто до тех пор, пока не нужно определить значение химического потенциала, который выражается в неявном виде через значение интеграла, определяющего концентрацию электронов. Количество подобных примеров можно умножить. Применение специальных математических пакетов, которые оптимизированы для решения физических задач, решает проблему, не превращая семинары по физике в уроки программирования. Наиболее известными являются: Maple, Mathematica, MATLAB и MathCAD. Использование этих систем компьютерной математики позволяет органически встроить численные методы в изучение физики без нарушения программы изучения физики и обогатить содержание курса. Приведены задачи, которые нельзя решить «на бумаге», но при наличии соответствующего программного обеспечения не возникает сложностей с получением ответа. Эти примеры могут быть использованы преподавателями, ведущими семинарские занятия по физике. Наиболее низкий порог вхождения имеет MathCAD, который использован для решения задач, хотя по приведенным примерам легко воспроизвести эти решения, используя другие математические пакеты: более поздние версии MathCAD, Maple и Mathematica, имеющиеся в распоряжении преподавателя и студентов.

Теплоемкость, зависящая от температуры

Титановая и цинковая пластины, с заданными массами и начальными температурами приведены в соприкосновение. Найти равновесную температуру T_f , предварительно создав интерполяционные функции $CTi(t)$ и $CZn(t)$ с использованием табличных значений теплоемкости cTi и cZn для ряда температур, взятых из справочника [1].

Самый простой способ получить ответ на вопросы – использовать для расчетов непосредственно табличные данные. С формальной точки зрения таблицу можно назвать ступенчатой интерполяцией зависимости между температурой и теплоемкостью. Однако MathCAD дает возможность использовать более точные интерполяционные формулы. Необходимые функции $CTi(t)$ и $CZn(t)$ создаем, интерполируя с помощью функции **interp** экспериментальные данные, представленные таблицами значений T , cTi , cZn . В диапазоне температур $T = 0 \dots 400$ K используется кубическая интерполяция, а за его пределами значения молярной теплоемкости экстраполируются линейной функцией, на что указывает функция **lspline**.

$T := \begin{pmatrix} 0 \\ 20 \\ 40 \\ 80 \\ 150 \\ 250 \\ 400 \end{pmatrix}$ $cTi := \begin{pmatrix} 0 \\ 0.33 \\ 2.47 \\ 10.88 \\ 19.54 \\ 24.04 \\ 26.61 \end{pmatrix}$ $cZn := \begin{pmatrix} 0 \\ 1.76 \\ 8.06 \\ 16.87 \\ 22.70 \\ 24.84 \\ 26.40 \end{pmatrix}$ Экспериментальные значения молярных теплоемкостей титана cTi и цинка cZn для температуры T .

$TTi := 20$ $TZn := 400$ Начальные температуры титана и цинка

$\mu Ti := 0.0479$ $\mu Zn := 0.06537$ Молярные массы титана и цинка

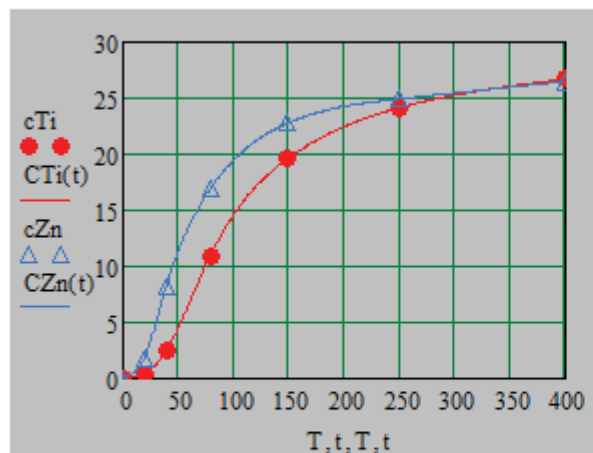
$mTi := 0.200$ $mZn := 0.300$ Массы титановой и цинковой пластины

$CTi(t) := \text{interp}(\text{lspline}(T, cTi), T, cTi, t)$ Создание интерполяционных функций $CTi(t)$, $CZn(t)$ по экспериментальным значениям теплоемкости cTi , cZn

$CZn(t) := \text{interp}(\text{lspline}(T, cZn), T, cZn, t)$

$t := 0..400$ -значения температуры необходимые для построения графика

Зависимость от температуры t интерполяционных функций $CTi(t)$ и $CZn(t)$ и массива экспериментальных значений cTi и cZn .



$dQ := 5$ -порция тепла которой обменивается титан и цинк на каждом шаге вычислений

$Tf := \text{while } TTi < TZn$

$$\begin{cases} TTi \leftarrow TTi + \frac{\mu Ti \cdot dQ}{mTi \cdot CTi(TTi)} \\ TZn \leftarrow TZn - \frac{\mu Zn \cdot dQ}{mZn \cdot CZn(TZn)} \end{cases}$$

$Tf = 261.731$ -установившаяся температура

Вычисление равновесной температуры Tf с помощью root

$$\text{root} \left(\frac{mTi}{\mu Ti} \cdot \int_{TTi}^{Tf} CTi(T) dT - \frac{mZn}{\mu Zn} \cdot \int_{Tf}^{TZn} CZn(T) dT, Tf, TTi, TZn \right) = 261.721$$

Рис. 1. Вычисление равновесной температуры после приведения в контакт титановой и цинковой пластин

Fig. 1. Calculation of the equilibrium temperature after bringing titanium and zinc plates into contact

Если зависимость теплоемкости от температуры известна, т. е. известны функции $C_1(T)$ и $C_2(T)$ и заданы начальные температуры T_1 и T_2 тел массой m_1 и m_2 , то необходимо решить

уравнение теплового баланса для нахождения конечной температуры T_f . Уравнение теплового баланса является выражением закона сохранения энергии:

$$m_1 \cdot \int_{T_1}^{T_f} C_1(T) dT = m_2 \cdot \int_{T_f}^{T_2} C_2(T) dT.$$

Решение задачи получено двумя способами: 1) программным, в котором пластины обмениваются «квантами тепла» dQ до тех пор, пока температуры пластин не выравняются; 2) путем решения уравнения теплового баланса с неизвестной температурой T_f на верхнем и нижнем пределах интегрирования. Решение уравнения осуществляется с помощью функции **root**. Функция **root** работает следующим образом: для решения уравнения $f(x) = 0$ корень которого находится на отрезке $[a, b]$ записываем через запятую в качестве аргументов **root** в скобках правую часть уравнения $f(x)$, обозначение переменной x и границы отрезка a и b :

$$\text{root}(f(x), x, a, b) = .$$

Полное решение задачи представлено на рис 1.

Вычисления с помощью теории теплоемкости Дебая

Найти конечную температуру T_f после соприкосновения алюминиевой и медной пластин, начальные температуры которых $T_1 = 100 \text{ K}$ и $T_2 = 400 \text{ K}$.

Теория теплоемкости Дебая для алюминия и меди очень хорошо согласуется с опытом. Но расчеты с использованием интерполяционной формулы Дебая требуют применения вычислительной техники, а именно: необходимо решить уравнение теплового баланса с теплоемкостью, выражающейся формулой Дебая:

$$m_1 \cdot \int_{T_1}^{T_f} C_1(T) dT = m_2 \cdot \int_{T_f}^{T_2} C_2(T) dT, \quad C_{1,2}(T) = \frac{9 \cdot R}{\mu_{1,2}} \left(\frac{T}{\theta_{1,2}} \right)^3 \int_0^{\frac{\theta}{T_{1,2}}} \frac{x^4 \cdot e^x}{(e^x - 1)^2} dx.$$

На рис. 2 представлено решение T_f уравнения теплового баланса программным методом и с использованием решения уравнения, содержащего неизвестную на верхнем и нижнем пределах интегрирования T_f с помощью функции **root**.

Следующий пример иллюстрирует решение системы нелинейных уравнений. В данном случае для решения системы необходимо записать уравнения в блоке *Given – Find*, предварительно указав ожидаемые предположительные значения корней (*guess values*). В ряде случаев подбор *guess values* требует значительных усилий, и поэтому легкость решения систем уравнений с помощью компьютера часто оказывается иллюзорной.

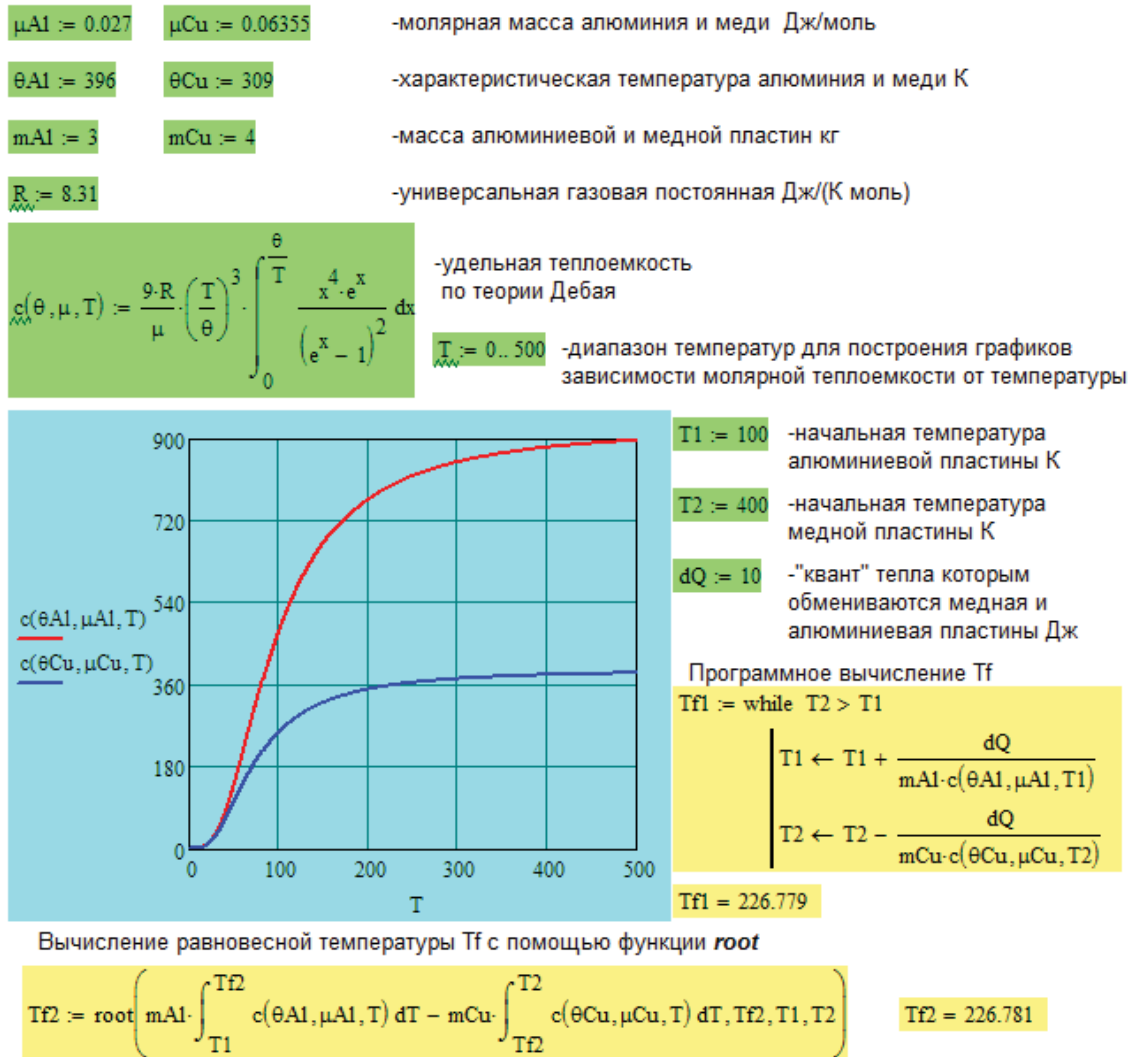


Рис. 2. Вычисление установившейся температуры при контакте алюминиевой и медной пластин
 Fig. 2. Calculation of the steady-state temperature at the contact of aluminum and copper plates

Ионизация гелия

Вычислить концентрации атомов и ионов гелия при температуре $T = 5$ эВ и общей концентрации атомов и ионов гелия $N = 10^{17} \text{ см}^{-3}$.

Для вычисления степени ионизации газа используется формула Саха:

$$\frac{n \cdot n_{i+1}}{n_i} = \frac{g_e \cdot g_{i+1}}{g_i} \cdot \left(\frac{2 \cdot \pi \cdot m \cdot k \cdot T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{\frac{-I_i}{k \cdot T}}.$$

Если температура выражается в электрон-вольтах, то формула Саха приобретает вид:

$$\frac{n \cdot n_{i+1}}{n_i} = \frac{g_e \cdot g_{i+1}}{g_i} \cdot 3 \cdot 10^{21} \cdot T^{\frac{3}{2}} \cdot e^{\frac{-I_i}{k \cdot T}}.$$

Индекс i обозначает кратность иона, $i = 0$ относится к атому, I_i – потенциал ионизации i -го иона. Поскольку гелий может находиться в виде атомов и однократных, и двукратных ионов, то для вычисления степени ионизации необходимо использовать формулу Саха два раза, а также написать выражение для концентрации электронов и суммарной концентрации атомов и ионов гелия. В результате получится система четырех уравнений, показанная на рис. 3.

$I_1 := 24.48$ -потенциал ионизации атома гелия	$T := 5$ -температура гелия в эВ
$I_2 := 54.16$ -потенциал ионизации иона гелия	$g_0 := 1$ -статистический вес атома He I
$N := 10^{17}$ -общая концентрация атомов и ионов гелия	$g_1 := 2$ -статистический вес иона He II
$n_0 := 10^{12}$ -предположительная концентрация He I	$g_2 := 1$ -статистический вес иона He III
$n_1 := 10^{16}$ -предположительная концентрация He II	
$n_2 := 10^{17}$ -предположительная концентрация He III	
$n := 2 \cdot N$ -предположительная концентрация электронов	

Given

$$\frac{n \cdot n_1}{n_0} = \frac{2 \cdot g_1}{g_0} \cdot 3 \cdot 10^{21} \cdot T^{\frac{3}{2}} \cdot e^{\frac{-I_1}{T}}$$

$$\frac{n \cdot n_2}{n_1} = \frac{2 \cdot g_2}{g_1} \cdot 3 \cdot 10^{21} \cdot T^{\frac{3}{2}} \cdot e^{\frac{-I_2}{T}}$$

$$n_0 + n_1 + n_2 = N \quad n = n_1 + 2 \cdot n_2$$

$$\text{Find}(n_0, n_1, n_2, n) = \begin{pmatrix} 3.786 \times 10^{12} \\ 2.124 \times 10^{16} \\ 7.875 \times 10^{16} \\ 1.787 \times 10^{17} \end{pmatrix}$$

- концентрация атомов He I
- концентрация однократных ионов He II
- концентрация двукратных ионов He III
- концентрация электронов

Рис. 3. Вычисление концентрации атомов и ионов гелия с помощью формулы Саха

Fig. 3. Calculation of the concentration of helium atoms and ions using the Saha formula

Влияние примесей на степень ионизации водорода

Рассмотреть влияние 10 % примеси лития на степень ионизации водорода при температуре 0,35 эВ.

Для нахождения концентрации водорода и лития необходимо решить систему двух уравнений Саха – Больцмана:

$$\frac{n_1 \cdot (n_1 + n_2)}{N_1 - n_1} = \frac{g_{1i} \cdot g_e}{g_1} \cdot \left(\frac{2 \cdot \pi \cdot m \cdot k \cdot T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{\frac{-I_1}{k \cdot T}},$$

$$\frac{n_2 \cdot (n_1 + n_2)}{N_2 - n_2} = \frac{g_{2i} \cdot g_e}{g_2} \cdot \left(\frac{2 \cdot \pi \cdot m \cdot k \cdot T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{\frac{-I_2}{k \cdot T}},$$

где m – масса электрона, k – постоянная Больцмана, h – постоянная Планка, остальные обозначения разъяснены на рис. 4. Система уравнений была несколько изменена: комбинация постоянных заменена численным значением, потенциал ионизации и температура выражены в электрон-вольтах.

$U1 := 13.6$	-потенциал ионизации атома H	$g1 := 2$	-статистический вес атома H I
$U2 := 5.39$	-потенциал ионизации атома Li	$g1i := 1$	-статистический вес иона H II
$N1 := 2 \cdot 10^{16}$	-общая концентрация атомов и ионов H	$g2 := 2$	-статистический вес атома Li I
$N2 := 2 \cdot 10^{15}$	-общая концентрация атомов и ионов Li	$g2i := 1$	-статистический вес иона Li II
$T := 0.35$	-температура смеси H, Li в эВ	$g_e := 2$	-статистический вес электрона

$$f1(T) := \frac{g1i \cdot g_e}{g1} \cdot 3 \cdot 10^{21} \cdot T^{\frac{3}{2}} \cdot e^{\frac{-U1}{T}}$$

$$n11(T) := \frac{-f1(T)}{2} + \sqrt{\left(\frac{f1(T)}{2}\right)^2 + f1(T) \cdot N1}$$

$$f2(T) := \frac{g2i \cdot g_e}{g2} \cdot 3 \cdot 10^{21} \cdot T^{\frac{3}{2}} \cdot e^{\frac{-U2}{T}}$$

$$n22(T) := \frac{-f2(T)}{2} + \sqrt{\left(\frac{f2(T)}{2}\right)^2 + f2(T) \cdot N2}$$

$$n11(0.35) = 1.286 \times 10^{10}$$

- концентрация ионов H II чистого водорода

$$n22(0.35) = 4.45 \times 10^{14}$$

- концентрация ионов Li II чистого лития

$$n1 := 2 \cdot 10^9$$

-предположительная концентрация ионов водорода H II

$$n2 := 2 \cdot 10^{14}$$

-предположительная концентрация ионов лития Li II

Given

$$\frac{n1 \cdot (n1 + n2)}{N1 - n1} = \frac{g1i \cdot g_e}{g1} \cdot 3 \cdot 10^{21} \cdot T^{\frac{3}{2}} \cdot e^{\frac{-U1}{T}}$$

$$\frac{n2 \cdot (n1 + n2)}{N2 - n2} = \frac{g2i \cdot g_e}{g2} \cdot 3 \cdot 10^{21} \cdot T^{\frac{3}{2}} \cdot e^{\frac{-U2}{T}}$$

$$\text{Find}(n1, n2) = \begin{pmatrix} 3.719 \times 10^5 \\ 4.45 \times 10^{14} \end{pmatrix}$$

- концентрация ионов водорода H II

- концентрация ионов лития Li II

Рис. 4. Вычисление степени ионизации водорода при наличии 10 % примеси лития
Fig. 4. Calculation of the degree of hydrogen ionization in the presence of 10 % lithium impurity

Для решения системы нелинейных уравнений необходимо указать предполагаемые корни, что является трудной задачей. Для выяснения влияния примеси на степень ионизации водорода были предварительно вычислены концентрации ионов водорода и лития без примесей. Сравнивая решение системы со значением концентрации ионов в чистом водороде, можно сделать вывод, что 10 % примеси лития более чем на четыре порядка понижает степень ионизации водорода.

Приближенный метод расчета в области многократной ионизации

Вычислить степень ионизации неона при температуре $T = 23$ эВ. Найти внутреннюю энергию и давление.

В основе предлагаемого метода расчета положена идея [2] о замене формулы Саха:

$$\frac{n_e \cdot n(m+1)}{n(m)} = \frac{g(m+1)}{g(m)} \cdot 6 \cdot 10^{21} \cdot T^{1.5} \cdot e^{\frac{-I(m+1)}{T}},$$

где n_e – концентрация электронов дифференциальным уравнением. В тексте используются обозначения принятые в [2], а в скриншоте рис. 5 компьютерного решения применяются отличные от текста обозначения, которые оговорены. Будем считать концентрацию ионов $n(m)$ и потенциал ионизации $I(m)$ непрерывными функциями m . Ввиду непрерывности $n(m)$, используем формулу:

$$n(m+1) = n(m) + \frac{dn(m)}{dm}.$$

Кроме того, отношение статистических весов $g(m+1)/g(m)$ ионов будем считать равным единице. Дифференциальное уравнение, заменяющее формулу Саха, будет иметь вид:

$$\left(1 + \frac{dn(m)}{dm}\right) \cdot n_e = 6 \cdot 10^{21} \cdot T^{1.5} \cdot e^{\frac{-I(m+1)}{T}}.$$

Условие сохранения числа частиц N и числа зарядов n имеет вид:

$$\int n(m) dm = N, \quad \int m \cdot n(m) dm = n_e.$$

Среднее число ионов, равное среднему числу электронов, считается равным значению m , при котором функция распределения имеет максимум:

$$\bar{m} = \frac{m \cdot n(m) dm}{\int n(m) dm} = \frac{n_e}{N}.$$

С учетом того, что в точке максимума производная равна нулю, имеем:

$$\bar{m} = \frac{6 \cdot 10^{21} \cdot T^{1.5} \cdot e^{\frac{-I(\bar{m}+0.5)}{T}}}{N}.$$

Решая это уравнение, найдем $\bar{m}(T, n)$. Зная степень ионизации газа, а следовательно, и число частиц, можно определить с приемлемой точностью давления внутреннюю энергию:

$$p = n(1 + \bar{m}) \cdot k \cdot T, \quad \varepsilon = \frac{3}{2} N(1 + \bar{m}) \cdot k \cdot T + N \cdot Q(\bar{m}),$$

где $Q(\bar{m})$ – средняя энергия ионизации, $Q_m = I_1 + I_2 + \dots + I_m$. Для нахождения $I(m)$ и $Q(m)$ используем сплайн-интерполяцию.

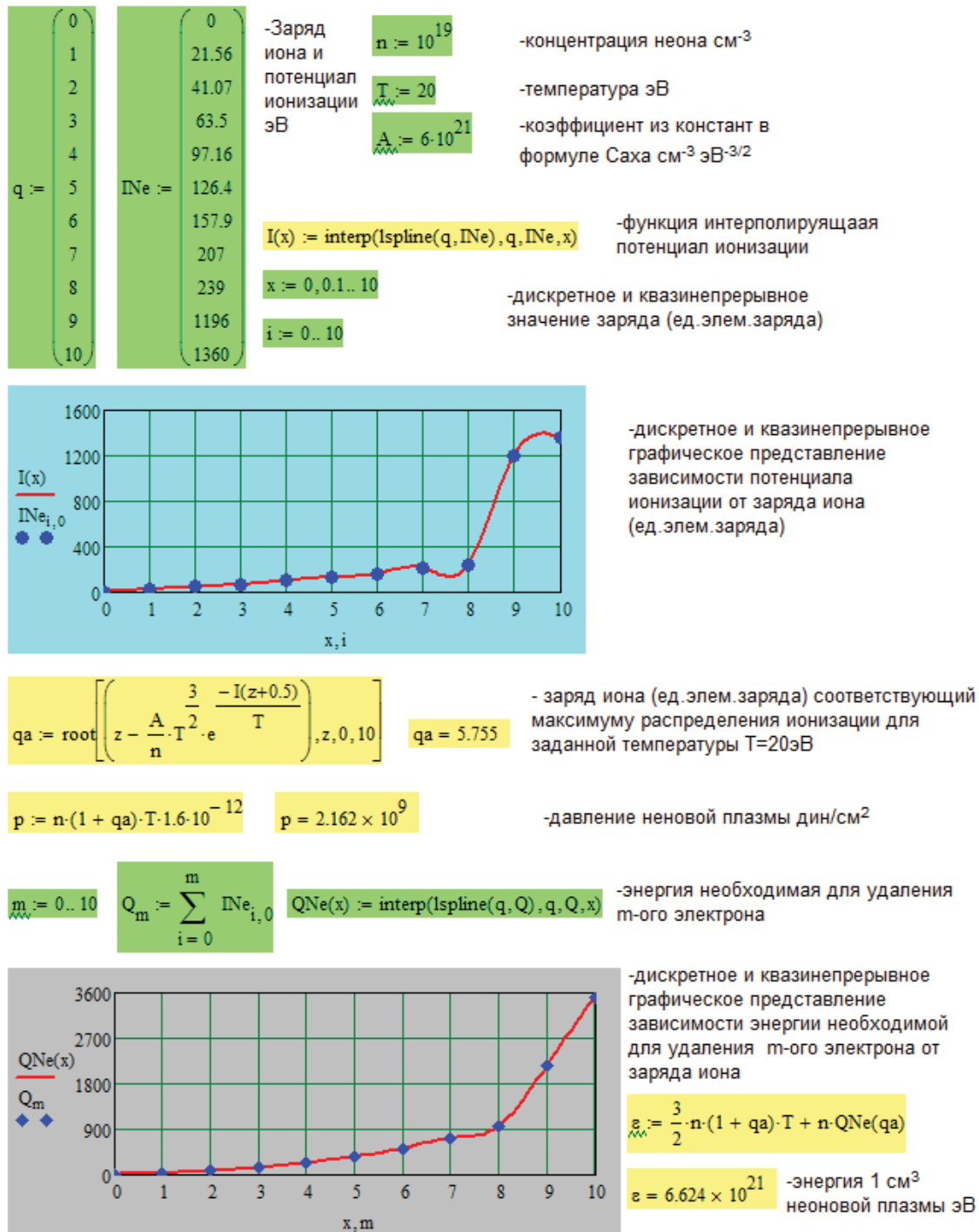


Рис. 5. Вычисление давления и энергии неона при многократной ионизации

Fig. 5. Calculation of neon pressure and energy during multiple ionization

Изотермы электронного газа

Построить изотермы электронного газа. Количество электронов $N = 8.5 \cdot 10^{28}$, температуры $T_1 = 2 \cdot 10^4$ K, $T_2 = 5 \cdot 10^4$ K, $T_3 = 9 \cdot 10^4$ K.

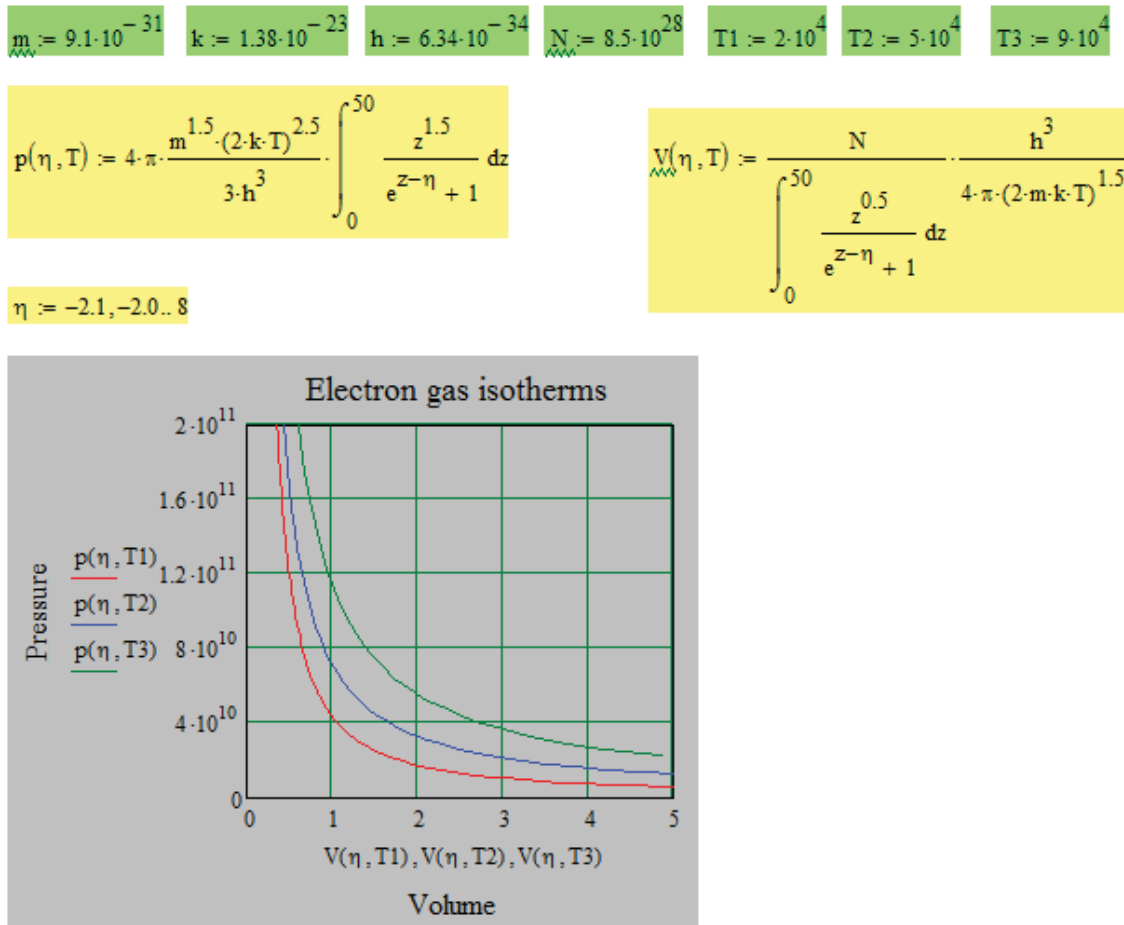


Рис. 6. Построение изотерм электронного газа при различных температурах
Fig. 6. Construction of electron gas isotherms at different temperatures

Для построения изотерм используются формулы для концентрации N/V и давления электронного газа:

$$\frac{N}{V} = \frac{4 \cdot \pi \cdot (2 \cdot m \cdot k \cdot T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \cdot \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{z} dz}{e^{z-\eta} + 1}, \quad p = \frac{4 \cdot \pi \cdot m^{\frac{3}{2}} \cdot (2 \cdot k \cdot T)^{\frac{5}{2}}}{3 \cdot h^3} \cdot \int_0^{\infty} \frac{z^{\frac{3}{2}} dz}{e^{z-\eta} + 1}.$$

Эти формулы в параметрическом виде ($\eta = \mu/(k \cdot T)$ – параметр) определяют связь между давлением p и объемом V . В формулах используются общепринятые обозначения: m – масса электрона; h – постоянная Планка; k – постоянная Больцмана; μ – химический потенциал.

Ввиду наличия в подынтегральном выражении экспоненты и, как следствие, быстрой сходимости, верхний предел интегрирования заменяется конечным числом 50.

Вычисление функции Ферми – Дирака

1. Вычислить интеграл Ферми – Дирака $\theta(\eta)$ для значений параметра $-4 < \eta < 16$.
2. Вычислить значения параметра η , если значение интеграла $\theta(\eta) = 0, 0.2, 3, 20, 45$.
3. Построить график значений распределения Ферми – Дирака для температур $T1 = 5000$ K, $T2 = 10\,000$ K, $T3 = 25\,000$ K, $T4 = 50\,000$ K.

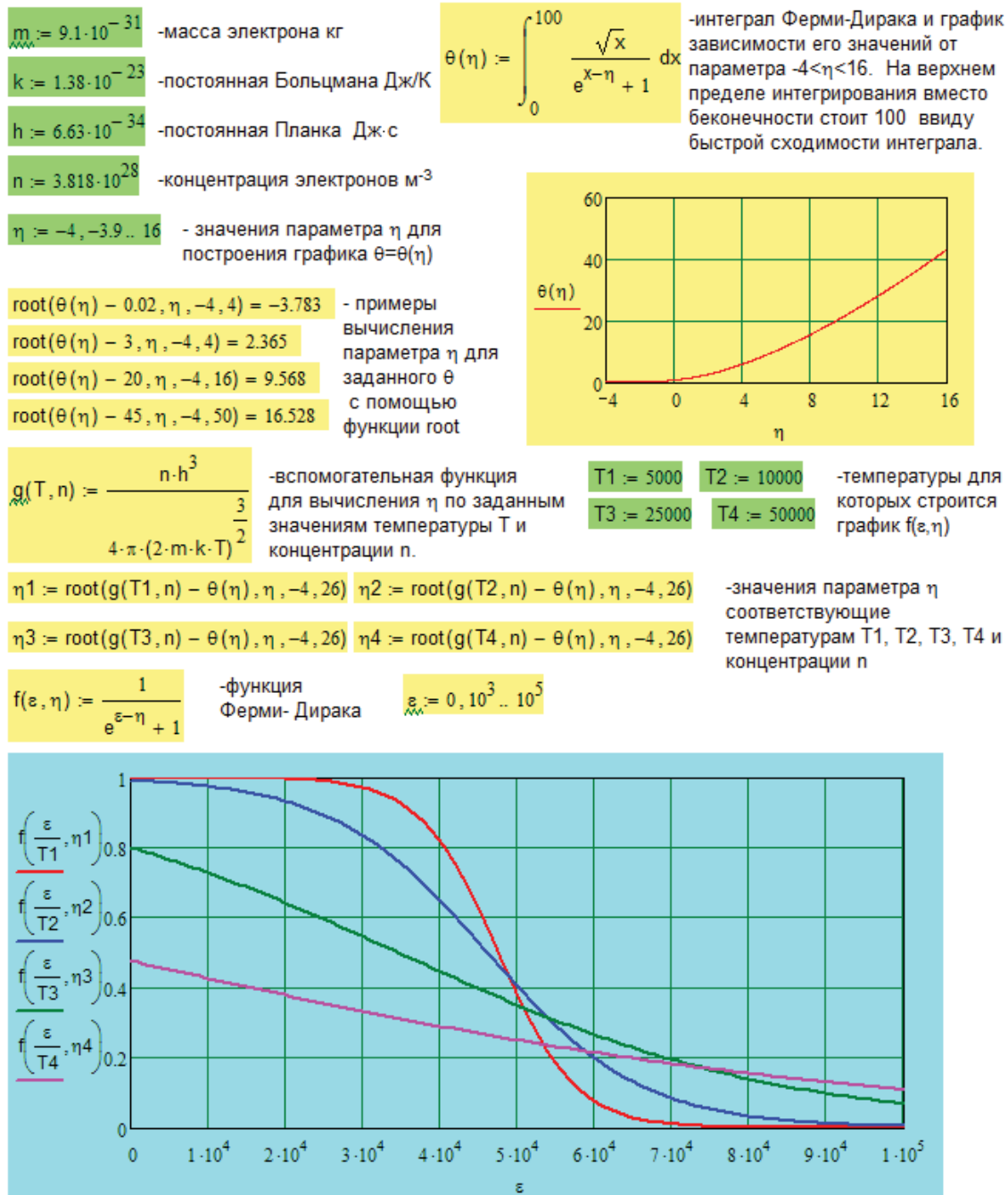


Рис. 7. Функция распределения Ферми – Дирака при различных значениях температуры

Fig. 7. Fermi - Dirac distribution function at different temperature values

Интегралом Ферми – Дирака называется функция $\theta(\eta)$, выражающаяся через интеграл, зависящий от параметра η :

$$\theta(\eta) = \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{x} dx}{e^{x-\eta} + 1} \approx \int_0^{100} \frac{\sqrt{x} dx}{e^{x-\eta} + 1}.$$

Ввиду наличия экспоненты в подынтегральном выражении и вследствие этого быстрой сходимости верхний предел можно заменить конечным числом, что важно для численного вы-

числения интеграла. В свое время этот интеграл был протабулирован, и таблицы значений приведены в ряде книг, например [3], поскольку он часто используется в расчетах термодинамических параметров газа фермионов. Однако на практике часто требуется по значению интеграла $\theta(\eta)$ найти значение параметра η . Это легко вычислить с помощью функции **root**, как показано на рис. 7.

Распределение Ферми – Дирака $f(E)$ имеет простой вид, но включает химический потенциал μ , который содержится в неявном виде в формуле определяющей концентрацию фермионов n :

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k \cdot T}} + 1}, \quad n = 4 \cdot \pi \cdot \frac{(2 \cdot m)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \cdot \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{E} dE}{e^{\frac{E-\mu}{k \cdot T}} + 1} = 4 \cdot \pi \cdot \frac{(2 \cdot m \cdot k \cdot T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \cdot \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{x} dx}{e^{x-\eta} + 1}.$$

Для нахождения параметра $\eta = \mu/(k \cdot T)$ необходимо решить уравнение:

$$n = 4 \cdot \pi \cdot \frac{(2 \cdot m \cdot k \cdot T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \cdot \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{x} dx}{e^{x-\eta} + 1}, \quad g(T, n) = \frac{n \cdot h^3}{4 \cdot \pi \cdot (2 \cdot m \cdot k \cdot T)^{\frac{3}{2}}} = \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{x} dx}{e^{x-\eta} + 1}.$$

В дальнейшем относительно громоздкую правую часть будем обозначать как $g(T, n)$, а левую как $\theta(\eta)$, и уравнение для определения η будет иметь вид $g(T, n) - \theta(\eta) = 0$, где

$$\theta(\eta) = \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{x} dx}{e^{x-\eta} + 1}, \quad g(T, n) = \frac{n \cdot h^3}{4 \cdot \pi \cdot (2 \cdot m \cdot k \cdot T)^{\frac{3}{2}}}.$$

Для построения графика зависимости распределения Ферми – Дирака введем новую переменную $\varepsilon = E/k$, т. е. выражаем энергию в единицах температуры в К. Обозначения и значения температуры подобраны так, чтобы можно было сравнить результаты с [3].

Имея в распоряжении способ вычисления химического потенциала, по известным формулам можно вычислить значения энергии и давления электронного газа.

Вычисление концентрации электронов в собственном полупроводнике

Найти концентрацию электронов в собственном полупроводнике с параболическими зонами при температуре $T = 600$ К, если известно, что ширина запрещенной зоны при таких температурах меняется по закону $E_g = (0,26 - 2,7 \cdot 10^{-4} \cdot T)$ эВ. Использовать значения эффективных масс $m_n = 0,002 m_0$ и $m_p = 0,02 m_0$, где m_0 – масса электрона.

Для иллюстрации возможностей решения уравнений с неизвестной под знаком интеграла была взята за основу задача № 9 из [4]. Требовалось найти концентрацию электронов с учетом вырождения. Если для решения задачи в [4] использовалась формула, аппроксимирующая интеграл Ферми – Дирака с индексом 1/2, то в данной работе условие нейтральности $n = p$, где n и p – концентрации электронов и дырок, рассматривалось как уравнение с неизвестной под знаком интеграла и решалось непосредственно численными методами с помощью средств пакета MathCAD:

$$N_c \cdot \Phi_{1/2}(\zeta^*) = N_v \cdot \Phi_{1/2}(\eta^*), \text{ где } \Phi_{1/2}(\zeta^*) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{x} dx}{1 + \exp(x - \zeta^*)},$$

$$N_{c(v)} = \left(\frac{2\pi m_{n(p)} k T}{h^2} \right)^{3/2}.$$



Рис. 8. Вычисление концентрации электронов и дырок в собственном полупроводнике с параболическими зонами
 Fig. 8. Calculation of the concentration of electrons and holes in an intrinsic semiconductor with parabolic zones

При решении учитывалось, что

$$\eta^* = \frac{E_v - F}{k \cdot T} = -\zeta^* - \frac{E_g}{k \cdot T}, \quad \zeta^* = \frac{F - E_c}{k \cdot T},$$

где E_g – ширина запрещенной зоны; F – уровень Ферми; E_c – энергия дна зоны проводимости; E_v – энергия потолка валентной зоны. Для решения уравнения использовалась функция **root**, способ применения которой описан в предыдущих задачах, а подробности представлены на рис. 8. По существу сам процесс решения занимает две строки. При сравнении ответа в [4] и найденного значения концентрации n следует иметь в виду, что в [4] в ответе, по-видимому, опечатка.

Образование электронов и позитронов при $k \cdot T = m \cdot c^2$

Вычислить концентрацию электронов и позитронов при $k \cdot T = m \cdot c^2$ и построить график зависимости концентрации электронов и позитронов при $0,2 \cdot m \cdot c^2 < k \cdot T < 5 \cdot m \cdot c^2$.

При температурах, сравнимых с энергией покоя электронов $k \cdot T \approx m \cdot c^2$, столкновения частиц в веществе сопровождается образованием электрон-позитронных пар и с термодинамической точки зрения можно рассматривать реакции $e^+ + e^- = \gamma$ или $e^+ + e^- = \gamma + \gamma$, где γ – символ, обозначающий фотон; e^+ – обозначение позитрона; e^- – символ, обозначающий электрон. Химический потенциал фотонного газа μ равен 0, кроме того, концентрации электронов и позитронов равны, и поэтому имеет место равенство:

$$\mu^+ + \mu^- = 0, \quad \mu^+ = \mu^- = 0,$$

где μ^+ и μ^- – химические потенциалы позитронов и электронов. Электроны и позитроны подчиняются статистике Ферми – Дирака, поэтому их концентрация n выражается формулой:

$$n^+ = n^- = n = \frac{8 \cdot \pi}{h^3} \cdot \int_0^\infty \frac{p^2 dp}{e^{\frac{\sqrt{p^2 \cdot c^2 + m^2 \cdot c^4}}{k \cdot T}} + 1},$$

где h – постоянная Планка; k – постоянная Больцмана; T – температура в кельвинах; p – импульс; c – скорость света; m – масса электрона.

Удобно выразить температуру в единицах $m \cdot c^2$, т. е. использовать формулу $\theta = k \cdot T / m \cdot c^2$, а также $x = p / (m \cdot c)$. Тогда в новых обозначениях:

$$n^+ = n^- = n = 8 \cdot \pi \cdot \left(\frac{m \cdot c}{h}\right)^3 \int_0^\infty \frac{x^2 dx}{e^{\frac{\sqrt{1+x^2}}{\theta}} + 1}.$$

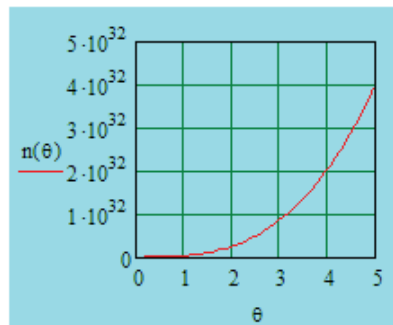
Интеграл быстро сходится ввиду наличия в подынтегральном выражении экспоненты, на рис. 8 показан график подынтегрального выражения и вычислены значения интеграла при значениях верхнего предела 10 и 100, если $\theta = 1$. Хотя значения интеграла отличаются лишь в третьем знаке после запятой, целесообразно взять верхний предел равным 100, поскольку при малых θ максимум подынтегрального выражения смещается вправо. Брать верхний предел слишком большим нецелесообразно, поскольку значение экспоненты превысит 10^{307} , что является критичным для Маткада и будет выдано сообщение об ошибке. Были вычислены концентрации электронов и позитронов в см^{-3} при значениях $\theta = 0,2, 1, 5$ и построен график зависимости концентрации от температуры. При $\theta > 0,1$ концентрация электронов превышает концентрацию электронов в веществе и выполняется равенство $n^+ = n^-$, на котором были основаны расчеты. При больших $\theta \gg 1$ можно выражение для энергии в показателе экспоненты заменить ультрарелятивистским пределом $\varepsilon = p \cdot c$ и выразить интеграл через ζ -функцию, как сделано в [5]. При $T \ll m \cdot c^2$ подынтегральное выражение быстро убывает с уменьшением температуры как $\exp(-m \cdot c^2 / (k \cdot T))$.

$m := 9.1 \cdot 10^{-28}$ -масса электрона г
 $c := 3 \cdot 10^{10}$ -скорость света см/с
 $h := 6.63 \cdot 10^{-27}$ -постоянная Планка эрг с

$$n(\theta) := 8 \cdot \pi \cdot \left(\frac{m \cdot c}{h} \right)^3 \cdot \int_0^{100} \frac{x^2}{e^{\frac{\theta}{\sqrt{1+x^2}}} + 1} dx$$

$$n(0.2) = 1.859 \times 10^{27} \quad n(1) = 2.658 \times 10^{30}$$

$$n(5) = 3.925 \times 10^{32} \quad \theta := 0.2, 0.3 \dots 5$$



Зависимость концентрации электронов и позитронов $n(\theta)$ (см⁻³) от температуры

График зависимости подынтегральной функции от x при различных $\theta=1, 2, 5$ позволяет оценить значения верхнего предела интегрирования.

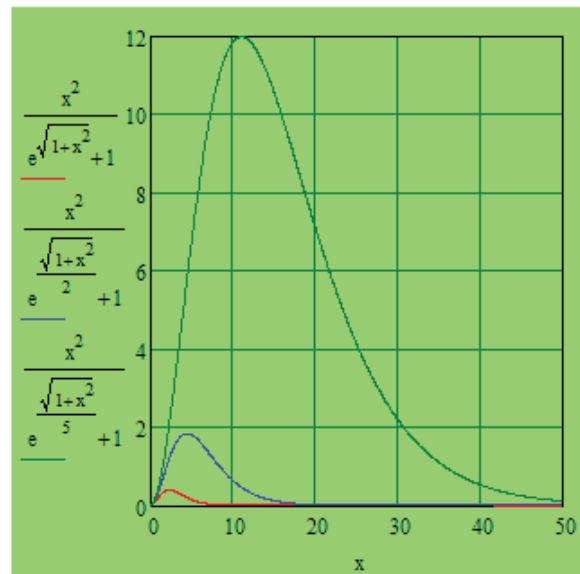


Иллюстрация влияния верхнего предела интегрирования на точность вычисления интеграла

$$\int_0^{50} \frac{x^2}{e^{\frac{\theta}{\sqrt{1+x^2}}} + 1} dx = 222.984$$

$$\int_0^{100} \frac{x^2}{e^{\frac{\theta}{\sqrt{1+x^2}}} + 1} dx = 223.675$$

Рис. 9. Вычисление концентрации электронов и позитронов при температурах, сравнимых с энергией покоя электронов

Fig. 9. Calculation of the concentration of electrons and positrons at temperatures comparable to the rest energy of electrons

Заключение

Средствами компьютерной математики можно решить ряд физических задач, вычисления в которых представляют самостоятельную проблему. С помощью MathCAD это делается компактно в максимально естественном виде. Следует подчеркнуть, что приведенные скриншоты представляют исчерпывающее решение. Кроме того, уравнения, содержащие неизвестную под знаком интеграла, встречаются во многих физических задачах. Например, в вычислениях с использованием функции распределения Ферми – Дирака в релятивистском случае, при изучении эффекта Штарка для ридберговских состояний атома водорода, в задачах, связанных с лазерным зондированием. Поэтому приведенный метод решения уравнения с неизвестной в подынтегральном выражении не ограничивается нахождением химического потенциала газа Ферми – Дирака, а имеет широкое поле применения.

Список литературы

1. Таблицы физических величин: Справочник / Под ред. акад. И. К. Кикоина. М.: Атомиздат, 1976. 1008 с.
2. **Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П.** Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Физматгиз, 1963. 632 с., с илл.
3. **Киттель Ч.** Статистическая термодинамика. М.: Наука, 1977. 336 с., с илл.
4. **Бонч-Бруевич В. Л., Звягин И. П., Карпенко И. В., Миронов А. Г.** Сборник задач по физике полупроводников. М.: Наука, 1987. 144 с.
5. **Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.** Статистическая физика. М.: Наука, 1976. Ч. 1. 584 с., с илл.

References

1. Tables of physical quantities. Guide. Ed. akad. I. K. Kikoin. M., Atomizdat, 1976, 1008 p.
2. **Zeldovich Ya. B. and Raiser Yu. P.** Physics of shock waves and high-temperature hydrodynamic phenomena. Moscow, Fizmatgiz, 1963, 632 p. with fig.
3. **Kittel Ch.** Statistical thermodynamics. Moscow, Nauka, 1977, 336 p. with fig.
4. **Bonch-Bruevich V. L. , Zvyagin I. P., Karpenko I. V., Mironov A. G.** Collection of problems in semiconductor physics. Moscow, Nauka, 1987, 144 p.
5. **Landau L. D., Lifshits E. M.** Statistical Physics. Moscow, Nauka, 1976, part 1, 584 p. with fig.

Сведения об авторе

Петр Васильевич Пипич, преподаватель

Information about the Author

Pyotr V. Pipich, Lecturer

*Статья поступила в редакцию 31.08.2023; одобрена после рецензирования 18.09.2023;
принята к публикации 26.10.2023*

*The article was submitted 31.08.2023; approved after reviewing 18.09.2023;
accepted for publication on 26.10.2023*