

УДК 519.6+536.7

В.С. СЕКЕРЖИЦКИЙ, А.И. СЕРЫЙ

Брест, БрГУ имени А. С. Пушкина

**ОБ ИСПОЛЬЗОВАНИИ ПРОГРАММЫ MATHCAD ДЛЯ
ВЫЧИСЛЕНИЯ ХИМИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА ГАЗА
НЕРЕЛЯТИВИСТСКИХ ФЕРМИОНОВ**

Задача о вычислении химического потенциала Ферми-газа в общем случае (т.е. для произвольных соотношений между тепловой энергией и энергией Ферми) аналитически не решается. В качестве примера рассмотрим систему нерелятивистских фермионов (нерелятивистский электронный газ),

когда энергию покоя частиц можно не учитывать. Хорошо известные предельные случаи вместе с общим отражены в таблице 1. В качестве источника можно использовать [1, с. 204, 278–281; 2, с. 194–196, 201].

Таблица 1 – Формулы для нахождения химического потенциала

Случай	Формула	Условие применимости
1. Крайне вырожденный	$\varepsilon_F \equiv \mu_0 = \frac{(3\pi^2)^{2/3} \hbar^2 n^{2/3}}{2m}$	$T = 0$
2. Вырожденный	$\mu_1 = \mu_0 \left(1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\mu_0} \right)^2 \right)$	$kT/\mu_0 \ll 1$
3. Невырожденный	$\mu_2 = -kT \ln \left(\left(\frac{kT}{\mu_0} \right)^{3/2} \frac{3\pi^{1/2}}{4} \right)$	$kT/\mu_0 \gg 1 \Rightarrow \exp(-\frac{\mu_2}{kT}) \gg 1$
4. Общий	нахождение $\mu_3 = -kT \ln x$, где x – корень уравнения $\left(\frac{kT}{\mu_0} \right)^{3/2} = 3 \int_0^{+\infty} \frac{t^2 dt}{x e^{t^2} + 1}$	в остальных случаях

В последнем случае оказывается важным вопрос о предварительном преобразовании интеграла перед его вычислением (замена переменных, предварительное интегрирование по частям), т.к. это существенно влияет на возможность получения правильного результата.

В таблице 2 приведены результаты расчетов, выполненных в программе MathCAD 14 при концентрации электронов $n_e = 10^{23} \text{ см}^{-3}$. При этом уравнение для μ_3 лучше преобразовать к виду

$$\left(\frac{\mu_0}{kT} \right)^{3/2} - \frac{3}{2} \int_0^{+\infty} \ln(xe^{-t^2} + 1) dt = 0, \mu_3 = kT \ln x \quad (1)$$

Кроме того: 1) преобразования, предлагаемые в [1, с. 596–597; 2, с. 201–202], для общего случая непригодны, т.к. условие $kT/\mu_0 \ll 1$, вообще говоря, не выполняется; 2) при $T \sim 10^2 \text{ К}$ и ниже даже при вычислениях по формуле (1) MathCAD выдает сообщение об ошибке, но это не является проблемой, т.к. даже при $T \sim 10^3 \text{ К}$ (когда уже нет сообщений об ошибке) результаты расчетов показывают, что можно применять формулу для μ_2 .

Таблица 2 – Величина химического потенциала (в эВ), вычисленная в MathCAD 14 по формулам для μ_1 , μ_2 , μ_3 (см. таблицу 1)

Температура, К	μ_1	μ_2	μ_3
10^3	7,855	0,5588	7,855
$2 \cdot 10^3$	7,853	0,9383	7,853
$4 \cdot 10^3$	7,844	1,518	7,844
$6 \cdot 10^3$	7,828	1,963	7,828
$8 \cdot 10^3$	7,806	2,32	7,806
10^4	7,778	2,611	7,777
$2 \cdot 10^4$	7,545	3,431	7,517
$4 \cdot 10^4$	6,612	3,278	6,327
$6 \cdot 10^4$	5,058	1,773	4,3
$8 \cdot 10^4$	2,881	-0,6111	1,592
10^5	0,08232	-3,648	-1,671
$2 \cdot 10^5$	-23,24	-25,22	-23,81
$4 \cdot 10^5$	-116,5	-86,27	-85,27
$6 \cdot 10^5$	-272	-160,8	-160
$8 \cdot 10^5$	-489,7	-244,2	-243,5
10^6	-769,5	-334,1	-333,5

Как и должно быть, значение μ_3 при $kT/\mu_0 \ll 1$ близко к μ_1 , а при $kT/\mu_0 \gg 1$ близко к μ_2 . Соответствующие ячейки закрашены.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Румер, Ю. Б. Термодинамика, статистическая физика и кинетика: учебное пособие / Ю. Б. Румер, М. Ш. Рывкин. – 2-е изд., испр. и доп. – Новосибирск : Изд-во Новосиб. ун-та, 2000. – 608 с.
2. Ландау, Л. Д. Теоретическая физика : учеб. пособие для вузов : в X т. / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – 5-е изд., стереот. – М. : Физматлит, 2001. – Т. V : Статистическая физика. Ч. I. – 616 с.