93-300

сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р4-93-300

В.К.Лукьянов

ОБ ОДНОМ РАЗЛОЖЕНИИ ФЕРМИ-ФУНКЦИИ

1993

В ряде разделов физики используется ферми-функция

$$F(x)=\frac{1}{1+e^{\frac{x-a}{y}}}, \tag{1}$$

которая, в частности, характеризует распределение частиц в статистике Ферми-Дирака. При $x<a$ она близка к 1, а при $x>a$ стремится к нулю. В ядерной физике ферми-функция задает, например, распределение заряда или потенциала ядра, при этом a имеет смысл радиуса ядра, а y - диффузности его поверхности. Естественно, что эту функцию часто приходится использовать в расчетах и оценках, в том числе интегрировать с другими функциями (назовем их совокупно $\varphi(x)$), характеризующими данную физическую систему и по этой причине заданными в той же области пространства с размерами порядка a.

Типичным соотношением параметров в (1) является $y\ll a$, то есть существует малый параметр y (точнее $\frac{y}{a}\ll 1$), по которому можно раскладывать ферми-функцию в ряд. При $y=0$ она превращается в ступенчатую функцию

$$F(x,a,y=0)=\Theta(R-x)=\begin{cases}1, & \text{при } R-r>0\,,\\ 0, & \text{при } R-r<1\,.\end{cases} \tag{2}$$

Ниже мы найдем следующие члены такого разложения, которые оказываются производными от δ-функции. Подобное разложение в ряд сингулярных функций имеет смысл только под знаком интеграла, поэтому начнем с преобразования типичного интеграла

$$I=\int_0^\infty\frac{\varphi(x)dy}{1+e^{\frac{x-a}{y}}}=\int_{-\infty}^\infty\frac{\Theta(x)\varphi(x)dx}{1+e^{\frac{x-a}{y}}}. \tag{3}$$

Введем замену переменных $z=\frac{x-a}{y}$ и приведем (3) к виду

$$I=y\int_0^\infty\frac{\Theta(a+yz)\varphi(a+yz)-\Theta(a-yz)\varphi(a-yz)}{1+e^z}dz+y\int_0^\infty\Theta(a-yz)\varphi(a-yz)dz. \tag{4}$$

Положив теперь $r=yz$ и затем $a-r=x$, перепишем (4) как

$$I=\int_0^\infty\Theta(a-x)\varphi(x)dx+y\Phi(y)\,. \tag{5}$$

Сравнивая (5) и (3), убеждаемся, что Θ-функция есть действительно первый член разложения ферми-функции по y. Разложим теперь оставшуюся часть

$$\Phi(y)=\int_0^\infty\frac{\Theta(a+yz)\varphi(a+yz)-\Theta(a-yz)\varphi(a-yz)}{1+e^z}dz= \tag{6}$$

$$=\Phi(0)+y\Phi_y^{(1)}(0)+\cdots+\frac{y^n}{n!}\Phi_y^{(n)}(0)+\cdots$$

Здесь производная Φ по dy имеет вид

$$\Phi_y^{(n)}=\int_0^\infty \frac{\Theta(a+yz)\varphi^{(n)}(a+yz)-(-1)^n\Theta(a-yz)\varphi^{(n)}(a-yz)}{1+e^z}z^n dz+X_1-X_2, \quad (7)$$

где

$$X_1=\sum_{m=1}^n C_n^m\int_0^\infty \frac{\delta^{(m-1)}(a+yz)\varphi^{(n-m)}(a+yz)}{1+e^z}z^n dz, \quad (8)$$

$$X_2=(-1)^n\sum_{m=1}^n C_n^m\int_0^\infty \frac{\delta^{(m-1)}(a-yz)\varphi^{(n-m)}(a-yz)}{1+e^z}z^n dz, \quad (9)$$

а C_n^m-биноминальные коэффициенты. Легко видеть, что $X_1=0$, так как сингулярность подынтегральной $\delta^{(m-1)}$-функции лежит вне области интегрирования. Относительно X_2 можно убедиться, вычисляя его с помощью $\delta^{(m-1)}$-функции, что он вносит экспоненциальный вклад $O(e^{(-\frac{a}{y})})$.

В итоге в (7) остается только первое слагаемое, так что при $y=0$ имеем:

$$\Phi_y^{(n)}(0)=\int_0^\infty \frac{\Theta(a)\varphi^{(n)}(a)-(-1)^{(n)}\Theta(a)\varphi^{(n)}(a)}{1+e^z}z^n dz\,. \quad (10)$$

Отсюда следует, что в разложении (6) участвуют только нечетные элементы с $n=2k+1$ $(k=0,1,2\ldots)$:

$$\Phi_y^{(2k+1)}(0)=2J_{2k+1}\cdot\varphi^{(2k+1)}(a), \quad (11)$$

где интеграл

$$J_{2k+1}=\int_0^\infty \frac{z^{2k+1}}{1+e^z}dz \quad (12)$$

выражается через известные числа Бернулли B_{2k+2}. Подставляя (6) и (11) в (5) и используя определение

$$\int_0^\infty \varphi(x)\delta^{(n)}(x-a)dx=(-1)^n\varphi^{(n)}(a), \quad (13)$$

получим искомое выражение для I в виде ряда

$$I=\int_0^\infty \frac{\varphi(x)dx}{1+e^{\frac{x-a}{y}}}=\int_0^\infty \Theta(a-x)\varphi(x)dx-y^2 2J_1\int\delta^{(1)}(x-a)\varphi(x)dx- \quad (14)$$

$$\cdots-y^{2k+2}\frac{2J_{2k+1}}{(2k+1)!}\int\delta^{(2k+1)}(x-a)\varphi(x)dx-\cdots$$

Освобождаясь здесь от интегралов, запишем ферми-функции в виде степенного ряда по параметру диффузности y:

$$\frac{1}{1+e^{\frac{x-a}{y}}}=\Theta(a-x)-\sum_{k=0}^\infty A_{2k+1}y^{2k+2}\delta^{(2k+1)}(x-a), \quad (15)$$

где коэффициенты разложения есть сингулярные функции, а

$$A_{2k+1}=\frac{2(2^{2k+1}-1)\pi^{2k+2}}{(2k+2)!}|B_{2k+2}|. \quad (16)$$

Приведем несколько первых членов ряда (15):

$$\frac{1}{1+e^{\frac{x-a}{y}}}=\Theta(a-x)-1.645y^2\delta^{(1)}(x-a)-1.894y^4\delta^{(3)}(x-a)-2.098y^6\delta^{(5)}(x-a)-\cdots \quad (17)$$

Итак, получено удобное для практического использования разложение ферми-функции в ряд (15) по параметру диффузности, где членами являются нечетные производные от δ-функции. Точность разложения определяется экспоненциальной малостью $O(e^{-\frac{a}{y}})$. Последнее условие, в принципе, ограничивает класс функций $\varphi(x)$, используемых под интегралом вместе с ферми-функцией вида (15). Так, для быстро осциллирующих $\varphi(x)$ интеграл с ферми-функцией сам по себе есть экспоненциально малая величина, зависящая от параметра, определяющего частоту осцилляций. Поэтому если для его расчета использовать представление (15), то точность последнего может оказаться недостаточной. В остальных же случаях точность проверяется сходимостью получаемого с помощью (15) ряда.

Рукопись поступила в издательский отдел
2 августа 1993 года.