Математические структуры и моделирование
2001, вып. 8, с. 18–21

УДК 517.382:517.58

О НЕКОТОРЫХ ИНТЕГРАЛАХ ТЕОРИИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

С.Д. Симонженков

A method for numerical evaluation of some integrals appearing in semiconductor theory by means of the confluent hypergeometric functions is described.

Речь идет о приближенном вычислении интегралов

$$A_n(p,x) = \frac{x^n}{\Gamma(p+1)} \int\limits_0^\infty e^{-t} t^p (t^n + x^n)^{-1}\, dt, \tag{1}$$

$$B_n(p,x) = \frac{x^{2n}}{\Gamma(p+1)} \int\limits_0^\infty e^{-t} t^p (t^n + x^n)^{-2}\, dt, \tag{2}$$

где $p > -1, x > 0, n = 1, 2, \ldots$. Такие интегралы часто встречаются в анализе и приложениях. Например, при $n = 1, 2, 3$ они использовались и табулировались в задачах теории полупроводников [1–3]. Для $n = 1, 2$ известны их аналитические представления в виде некоторых специальных функций (см., например, [4], формулы $2.3.6.9 - 15, 2.3.7.8 - 13$), однако для практических вычислений такие представления не всегда приемлемы ввиду громоздкости и разнородности.

С помощью интегрирования по частям нетрудно проверить, что

$$B_n(p,x) = \left(1 - \frac{p+1}{n}\right) A_n(p,x) + \frac{p+1}{n} A_n(p+1,x),$$

поэтому достаточно уметь находить интегралы (1). В данной работе их предлагается вычислять на основе функции

$$I(p,z) = \frac{z}{\Gamma(p+1)} \int\limits_0^\infty \frac{e^{-t} t^p}{t+z}\, dt, \ \ |\arg z| < \pi$$

следующим образом. При $x = const$ разложим дробь $x^n/(t^n + x^n)$ на сумму простейших дробей вида $a_k/(t + z_k)$ с некоторыми комплексными a_k, z_k. Окажется, что будет иметь место равенство

$$\frac{x^n}{t^n + x^n} = \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{z_k}{t + z_k}, \ \ z_k = x \exp\left(\frac{2k+1-n}{n} \pi i\right),$$

Омский государственный педагогический университет

поэтому

$$A_n(p,x) = \frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1} I(p,z_k). \tag{3}$$

Так как интегралы $I(p,z), I(p,\bar{z})$ комплексно сопряженные, то в этой сумме на самом деле участвуют лишь действительные части слагаемых:

$$A_n(p,x) = \frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1} ReI(p,z_k).$$

Способ вычисления интегралов $I(p,z_k)$ зависит от параметров x,p,n. При $p = 0,1,2,...$ имеет место равенство

$$I(p,z) = ze^z E_{p+1}(z),$$

где $E_{p+1}(z)$ – стандартные интегральные показательные функции, методы вычисления которых достаточно хорошо разработаны. Известна, например, техника Гаучи [5], описание которой можно найти в справочнике Люка [6, с.106-107]. Поэтому в данной работе рассматривается случай, когда p не является целым числом.

Пусть $p \neq 0,1,2,....$ Предлагаются представления

$$I(p,z) = z^{p+1}U(p+1;p+1;z), \tag{4}$$

$$I(p,z) = \frac{z}{p}[F(1;1-p;z) - z^p e^z \Gamma(1-p)], \tag{5}$$

где F,U – вырожденные гипергеометрические функции соответственно первого и второго рода. Равенство (4) выгодно использовать при больших x, когда точки z_k далеки от разреза комплексной плоскости вдоль отрицательной вещественной полуоси. В реальных приложениях интегралов (1), (2) параметр n обычно невелик (не более 4), поэтому основную роль играет x. Мы предлагаем применять (4) при $x \geq 4$. Если $x < 4$, то выгоднее использовать (5), при этом в силу соотношения

$$I(p+1,z) = \frac{z}{p+1}[1 - I(p,z)]$$

достаточно ограничиться областью $-1 < p < 0$.

Таким образом, вычисление интегралов (1), (2) сводится к вычислению гипергеометрических функций $F(a;c;z)$, $U(a;c;z)$. В расчетах на ЭВМ их нахождение удобно осуществлять с помощью соответствующих процедур. Чаще всего используются конечно-разностные методы, когда F,U рассматриваются как начальные значения минимальных решений $\{f_n\}$ соответствующих разностных уравнений вида

$$y_{n+1} + a_n y_n + b_n y_{n-1} = 0,\ b_n \neq 0\ \forall n \geq 1. \tag{6}$$

Тогда при наличии дополнительного соотношения

$$\sum_{n\geq 0} c_n f_n = S \neq 0 \tag{7}$$

f_0 (а следовательно, и искомая функция) может быть найдено устойчивой обратной рекурсией на основе, например, алгоритма Миллера. Поэтому приведем соответствующие коэффициенты в (6) и (7).

Пусть a, c, z – комплексные числа, причем $a, c \neq 0, -1, -2, ..., z \neq 0$. Последовательность

$$f_n = \frac{(-z)^n (a)_n}{n!(c)_n} F(a+n; c+n; z), \ n \geq 0$$

образует минимальное решение уравнения (6) с коэффициентами

$$a_n = -\frac{n+c-1-z}{n+1}, \ b_n = -\frac{z(n+a-1)}{n(n+1)},$$

при этом в (7) $c_n = S = 1$. Здесь, как и ниже, $(a)_n$ означает символ Похгаммера.

Пусть теперь

$$a, a+1-c \neq 0, -1, -2, ...; z \neq 0, \ |\arg z| < \pi.$$

Тогда последовательность

$$f_n = z^a (a)_n (a+1-c)_n U(a+n; c; z)/n!$$

является минимальным решением уравнения (6) с коэффициентами

$$a_n = -\frac{2n+2a-c+z}{n+1}, b_n = \frac{n-1+a}{n}\frac{n+a-c}{n+1},$$

равенство (7) имеет место при $c_n = S = 1$.

В качестве примера рассмотрим вычисление интегралов

$$A_2(p, \frac{\pi}{2}t^2), \ p = \pm\frac{1}{2}, \ t = \frac{1}{2}, 1, \frac{5}{4}, \frac{10}{7}, \frac{5}{3}, 2.$$

В целях контроля используются равенства

$$A_2(-\frac{1}{2}, \frac{\pi}{2}t^2) = \pi t f(t), \ A_2(\frac{1}{2}, \frac{\pi}{2}t^2) = \pi t^3 g(t), \tag{8}$$

где

$$f(t) = \left[\frac{1}{2} - S(t)\right] \cos\frac{\pi}{2}t^2 - \left[\frac{1}{2} - C(t)\right] \sin\frac{\pi}{2}t^2,$$

$$g(t) = \left[\frac{1}{2} - C(t)\right] \cos\frac{\pi}{2}t^2 + \left[\frac{1}{2} - S(t)\right] \sin\frac{\pi}{2}t^2$$

– вспомогательные функции для вычисления интегрального косинуса и синуса $C(t)$, $S(t)$. Функции $f(t)$, $g(t)$ затабулированы, их значения брались из таблицы 7.8 справочника [7]. Результаты вычислений согласно (3)-(5) приведены ниже.

t	$x = \frac{\pi}{2}t^2$	$A_2(-\frac{1}{2}, x)$	$A_2(\frac{1}{2}, x)$
1/2	0,39269908	0,62707	0,21422
1	1,5707963	0,87931	0,60936
5/4	2,4543692	0,93027	0,77335
10/7	3,2057067	0,95209	0,81124
5/3	4,3633230	0,97020	0,87434
2	6,2831854	0,98385	0,92744

Значения гипергеометрических функций в (4),(5) вычислялись по алгоритму Миллера в нелинейной версии Гаучи с погрешностью 10^{-5}. Результаты, представленные в таблице, совпадают в пределах такой точности с контрольными согласно (8).

В заключение несколько замечаний по поводу используемых фактов. Равенство (4) — это следствие из интегрального представления для функции U; см., например, [7], 13.2.5. Равенство (5) вытекает из (4), связи между функциями F и U и того факта, что $F(a; a; z) = e^z$. О методах вычисления специальных функций на основе линейных рекуррентных соотношений см. [6, гл.12].

Литература

1. Dingle R., Doreen A., Roy K. *The integrals*
$$A_p(x) = (p!)^{-1}\int\limits_0^\infty \varepsilon^p(\varepsilon + x)^{-1}e^{-\varepsilon}\,d\varepsilon, B_p = (p!)^{-1}\int\limits_0^\infty \varepsilon^p(\varepsilon + x)^{-2}e^{-\varepsilon}\,d\varepsilon$$
and their tabulation // Appl. Sci. Res. 1956. V.6. №4. P.144-153.
2. Dingle R., Doreen A., Roy K. *The integrals*
$$C_p(x) = (p!)^{-1}\int\limits_0^\infty \varepsilon^p(\varepsilon^2 + x^2)^{-1}e^{-\varepsilon}\,d\varepsilon, D_p(x) = (p!)^{-1}\int\limits_0^\infty \varepsilon^p(\varepsilon^2 + x^2)^{-2}e^{-\varepsilon}\,d\varepsilon$$
and their tabulation // Appl. Sci. Res. 1956. V.6. №4. P.155-161.
3. Dingle R., Doreen A., Roy K. *The integrals*
$$E_p(x) = (p!)^{-1}\int\limits_0^\infty \varepsilon^p(1 + x\varepsilon^3)^{-1}e^{-\varepsilon}\,d\varepsilon, F_p(x) = (p!)^{-1}\int\limits_0^\infty \varepsilon^p(1 + x\varepsilon^3)^{-2}e^{-\varepsilon}\,d\varepsilon$$
and their tabulation // Appl. Sci. Res. 1956. V.6. №4. P.245-252.
4. Прудников А.П. и др. *Интегралы и ряды. Элементарные функции.* М.: Наука, 1981. 800 с.
5. Gautschi W. *Recursive computation of certain integrals* // J. Asoc. Comput. Mach. 1961. V.8. P.21-40.
6. Люк Ю. *Специальные математические функции и их аппроксимации.* М.: Мир, 1980. 608 с.
7. *Справочник по специальным функциям* / Под ред. М.Абрамовица и И.Стиган. М.: Наука, 1979. 830 с.