# Термодинамическое давление и его флуктуации для классического идеального газа релятивистских частиц

**Ю. Г. РУДОЙ**
*Российский университет дружбы народов*
e-mail: rudikar@mail.ru

**Ю. П. РЫБАКОВ**
*Российский университет дружбы народов*
e-mail: soliton4@mail.ru

**И. КЕЙТА**
*Институт гидродинамики Чешской АН*
e-mail: ibrahimakeita@mail.ru

УДК 536.7

**Ключевые слова:** статистическая механика Гиббса, релятивистский газ, флуктуации давления, термодинамические уравнения состояния.

**Аннотация**

Проведён полный и последовательный анализ динамических и термодинамических свойств идеального газа релятивистских частиц с законом дисперсии Лоренца—Эйнштейна и произвольным числом трансляционных степеней свободы. Применена статистическая механика Гиббса в классическом режиме существенно выше температуры квантового вырождения газа с использованием идеи квазисредних Боголюбова и обобщённой теоремы Боголюбова—Зубарева. Получены общие выражения для двух уравнений состояния газа: термического (давления) и калорического (внутренняя энергия), а также для флуктуаций этих величин: сжимаемости и теплоёмкости соответственно. Все выражения получены в замкнутой форме и подробно исследованы в низко- и высокотемпературных пределах.

**Abstract**

*Yu. G. Rudoy, Yu. P. Rybakov, I. Keita, Thermodynamic pressure and its fluctuations in a classical ideal gas of relativistic particles*, Fundamentalnaya i prikladnaya matematika, vol. 15 (2009), no. 6, pp. 167—199.

The full and consecutive analysis is carried on for the dynamic and thermodynamic properties of an ideal gas of relativistic particles with Lorentz—Einstein dispersion law and arbitrary number of translational degrees of freedom. Gibbs statistical mechanics is used along with the Bogolyubov's concept of quasiaverages and the generalized version of Bogolyubov—Zubarev theorem in the classical regime well beyond the temperature of the quantum degeneracy. The general expressions are found for a pair of equations of state, namely thermic (for the pressure) and caloric (for the inner energy); the fluctuations of these quantities are also found: the compressibility and heat capacity, respectively. All expressions are found in closed form and studied in low- and high-temperature limits.

*Фундаментальная и прикладная математика*, 2009, том 15, № 6, с. 167—199.

# 1. Введение

Важной проблемой равновесной статистической механики Гиббса [3] является вычисление равновесных термодинамических флуктуаций одной из обобщённых сил: динамического давления $P$ макроскопической системы. Согласно известной лемме Гиббса [3] (см. также, например, [11, 15, 16]), для этого необходимо знание не только динамического давления $P$, но и динамической сжимаемости $\Psi$; динамическими здесь и ниже называются величины, заданные на фазовом пространстве макроскопической системы. Если система находится в тепловом контакте с термостатом, то она является термодинамической и все динамические величины становятся стохастическими, или случайными, так что для них имеют смысл понятия средних значений и флуктуаций.

Таким образом, выражение для флуктуаций давления требует нахождения гиббсовских статистических средних $\langle P\rangle$ и $\langle\Psi\rangle$ от динамических величин $P$ и $\Psi$. Задача усреднения для $P$ сводится к вычислению статистической суммы и её производных, так что $\langle P\rangle$ относится к классу «термодинамических» средних, тогда как усреднение $\Psi$ требует независимых вычислений «нетермодинамических» средних $\langle\Psi\rangle$.

По указанной причине проблема вычисления флуктуаций давления в рамках подхода Гиббса длительное время не имела последовательного решения или нуждалась в привлечении каких-либо дополнительных предположений (см., например, обсуждение в [11,15,16], а также в [17,21,22]). Лишь недавно в [14] на основе идей метода квазисредних Боголюбова [1] (см. также [6]) с привлечением техники обобщённых функций [2] было получено полное и последовательное решение проблемы флуктуаций давления в макроскопической системе, находящейся в классическом или слабовырожденном квантовом режиме.

В качестве примера в [14] рассмотрен идеальный $f$-мерный газ частиц с $f$ трансляционными степенями свободы в нерелятивистском и ультрарелятивистском предельных случаях. В этих случаях функция Гамильтона, или кинетическая энергия $H(\boldsymbol{p})$ свободной частицы с импульсом $\boldsymbol{p}$, является однородной в смысле Эйлера. В более общем случае полная энергия $H(\boldsymbol{p})$ свободной релятивистской частицы складывается из энергии покоя $E_0 \equiv H(0)$ и кинетической энергии $H_к(\boldsymbol{p})$ (для которой $H_к(0) = 0$), причём $H(\boldsymbol{p})$ даётся соотношением Лоренца и не является однородной функцией величины импульса $p$:

$$H(p) \equiv E_0 + H_к(p) = [E_0^2 + (cp)^2]^{1/2}, \quad H(p) = E_0 h(p), \quad h(p) = 1 + h_к(p); \quad (1)$$

здесь $c$ — скорость света в вакууме, $h(p)$ и $h_к(p)$ — безразмерные энергии. Указанный более общий случай был рассмотрен в [1, 6] и особенно подробно в [2]; здесь мы даём обзор результатов для всей проблемы в целом.

Как показано в [14], динамические величины $P$ и $\Psi$ в случае идеального газа определяются только кинетической энергией $H_к(p)$, для которой обычно используются следующие приближённые выражения:

$$H_{\text{к}}^{\text{нр}}(p) \approx \frac{(cp)^2}{2E_0} \quad \text{при} \quad \frac{cp}{E_0} \ll 1, \quad \text{нерелятивистский («нр») предел;} \tag{2}$$

$$H_{\text{к}}^{\text{ур}}(p) \approx cp \quad \text{при} \quad \frac{cp}{E_0} \gg 1, \quad \text{ультрарелятивистский («ур») предел;} \tag{3}$$

в частном (но важном) случае безмассовых частиц (например, фотонов) с $E_0 = 0$ выражение (3) для $H_{\text{к}}^{\text{ур}}(p)$ становится точным.

Очевидно, в обоих предельных случаях (2) и (3) кинетическая энергия

$$H_{\text{к}}(p) = \alpha_k p^k \quad (k_{\text{ур}} = 1,\ \alpha_1 \equiv \alpha_{\text{ур}} = c;\ k_{\text{нр}} = 2,\ \alpha_2 \equiv \alpha_{\text{нр}} = (\alpha_1)^2/2E_0) \tag{4}$$

является степенной, и потому однородной (в смысле Эйлера), функцией импульса $p$ с показателем однородности $k$, равным 2 и 1 соответственно. Однако развиваемый в [1,2,6,14,21] подход сохраняет применимость и для более общих случаев, когда показатель $k$ в (4) принимает не только «предельные» значения 1 и 2, но и *любые* как натуральные, так и дробные и даже отрицательные значения.

Можно показать, что в случае (1) полученные в [14] соотношения для давления $P$ и сжимаемости $\Psi$ с предельными (однородными) выражениями для функции $H_{\text{к}}(p)$ вида (4) сохраняют свой вид, если формально ввести в этих выражениях вместо одного постоянного показателя $k$ два переменных (зависящих от импульса $p$) эффективных «показателя однородности»:

$$k(p) = 1 + [h(p)]^{-1}, \quad m(p) = 1 + [h(p)]^{-2} \quad (1 \ll k(p),\ m(p) \ll 2). \tag{5}$$

Очевидно, что при всех $p$ показатели (5) строго ограничены: как сверху — «нерелятивистским» значением $k_{\text{нр}} = 2$ при $cp/E_0 \to 0$, когда $h_{\text{к}}(p) \to 0$, $h(p) \to 1$, так и снизу — «ультрарелятивистским» значением $k_{\text{ур}} = 1$ при $cp/E_0 \to \infty$, когда $h_{\text{к}}(p) \to \infty$ и $h(p) \to \infty$, причём $k = m \equiv 1$ в случае $E_0 = 0$ (более подробно см. раздел 3).

## 2. Функция Гамильтона и её связь с квазидинамическими величинами: давлением и сжимаемостью

Рассмотрим, следуя [11,15,16], макроскопическую систему с фиксированным числом $N$ одинаковых $f$-мерных частиц, находящуюся в классическом режиме (т. е. при достаточно высоких температурах и/или низких плотностях) и описываемую функцией Гамильтона $H_N(q,p;a) \equiv H_N(\Gamma;a)$. Здесь $\Gamma = \Gamma_q + \Gamma_p$ — $2fN$-мерное фазовое пространство координат $q$ и импульсов $p$ всех частиц системы; $\{a\}$ — набор механических внешних параметров, из которых будет рассмотрен только объём $V$.

Это означает, что координатная часть $\Gamma_q$ пространства $\Gamma$ для одной частицы ограничена фиксированным объёмом $V$, т. е. система находится внутри сосуда произвольной формы (для простоты — $f$-мерного куба) с непроницаемыми для частиц гладкими стенками. Предположим также, что система находится в тепловом равновесии с термостатом при фиксированной абсолютной температуре $T = 1/k_\mathrm{B}\beta$ ($k_\mathrm{B}$ — постоянная Больцмана). Последнее условие делает динамическую систему термодинамической, т. е. способной к случайному обмену энергией с термостатом в виде теплоты; при этом $V$ и $T$ (или $\beta$) являются для системы внешними параметрами (механическим и термическим соответственно).

В статистической механике Гиббса подобная система описывается стационарной функцией плотности распределения по состояниям в фазовом пространстве Г. Эта функция предполагается нормируемой и имеет экспоненциальный, или канонический, вид

$$\rho_N(\Gamma;\beta,V) = Z_N^{-1}(\beta,V)\exp[-\beta H_N(\Gamma;V)], \tag{6}$$

$$H_N(\Gamma;V) = H_N(\Gamma) + \varepsilon U(\Gamma;V), \tag{7}$$

где $U(\Gamma;V)$ — внешний по отношению к системе сингулярный потенциал стенок сосуда, равный нулю всюду внутри объёма $V$ сосуда, но принимающий сколь угодно большие значения вне сосуда и на поверхности его стенок. Формальный параметр $\varepsilon \geqslant 0$ может быть произвольным, и лишь предел $\varepsilon \to 0$ соответствует пределу $V \to \infty$, т. е. переходу к неограниченной («свободной») системе, описываемой функцией Гамильтона $H_N(\Gamma)$.

Нормировочный множитель для распределения (6)

$$Z_N(\beta,V) = \int d\Gamma \exp[-\beta H_N(\Gamma;V)] \tag{8}$$

является для данной системы статистической суммой, где интегрирование по $d\Gamma = d\Gamma_q\, d\Gamma_p$ предполагается выполненным по всему фазовому пространству $\Gamma$ системы $N$ частиц с $f$ измерениями по $q$ и $p$ у каждой. В дальнейшем мы будем опускать индекс $N$ у величин $H_N$, $\rho_N$ и $Z_N$, считая их аддитивными; в силу одинаковости частиц $Z_N = Z^N$ для идеальной системы, а все средние динамические величины (энергия, давление, сжимаемость и т. п.) пропорциональны $N$.

Ограничение координатной части $\Gamma_q$ объёмом $V$ для каждой из $N$ частиц в (8) происходит автоматически за счёт наличия в (7) сингулярного слагаемого $U(\Gamma;V)$. При этом входящий в (8) «режущий» множитель $\exp[-\beta U(\Gamma;V)]$ играет роль проекционного оператора на указанную часть $\Gamma_q$. Что касается импульсной части $\Gamma_p$, то, как правило, функция $H(q,p)$ является растущей функцией импульса $p$ (во всяком случае при больших $p$). Поэтому интегрирование по $p$ можно с точностью до экспоненциально малых поправок распространить до сколь угодно больших значений.

Любая функция $X(\Gamma;\beta,V)$, заданная на фазовом пространстве системы $\Gamma$, является случайной при тепловом контакте. Среднее значение такой функции здесь и всюду ниже определяется как гиббсовское, или каноническое, среднее с функцией распределения (6):

$$X(\beta,V) \equiv \langle X(\Gamma;\beta,V)\rangle = \int d\Gamma X(\Gamma;\beta,V)\rho_N(\Gamma;\beta,V). \tag{9}$$

Согласно Гиббсу [3], обобщённая сила $A(\Gamma;a)$, сопряжённая внешнему механическому параметру $a$ (в частности, объёму), определяется как производная $[-\partial H(\Gamma;a)/\partial a]$. Обычно параметр $a$ входит в функцию Гамильтона линейно, т. е. $H(\Gamma;a) = H(\Gamma) - A(\Gamma)a$ и $A(\Gamma;a)$ фактически не зависит от величин $a$, так что

$$\frac{\partial A(\Gamma)}{\partial a} = -\frac{\partial^2 H(\Gamma;a)}{\partial a^2} = 0.$$

Это означает, что обобщённая сила $A(\Gamma)$ может быть определена независимо от наличия или отсутствия механически сопряжённого поля $a$. Среднее значение $A(\beta,V,a) \equiv \langle A(\Gamma)\rangle$ приобретает зависимость от $\beta$, $V$ и $a$ благодаря наличию этих переменных в функции распределения (5), а зависимость от внешнего поля $A$ появляется за счёт дополнительного слагаемого $[-\beta A(\Gamma)a]$ в показателе экспоненты.

Однако в интересующем нас случае это не так: как видно из (7), внешний параметр $a = V$ входит в $H(\Gamma;V)$ посредством потенциала $U(\Gamma;V)$ существенно нелинейным (более того, даже сингулярным!) образом. Поэтому сопряжённая объёму обобщённая сила — динамическое давление $P(\Gamma;V)$ — будет зависеть от значения параметра $V$, причём очевидно, что $P(\Gamma;V) \to 0$ при $V \to \infty$ («нет стенок — нет давления»).

Из общих принципов статистической механики Гиббса следует, что вид функции $P(\Gamma;V)$ должен зависеть не от конкретного вида потенциала стенки $U(\Gamma;V)$, но только от вида «свободной» функции Гамильтона $H(\Gamma)$ из (7) при $\varepsilon = 0$ (то же справедливо и для $\Psi(\Gamma;V)$). С учётом этих соображений корректными определениями давления и сжимаемости следует считать предложенные в [14] определения этих величин как *квазидинамических* в смысле Боголюбова:

$$P(\Gamma;V) = \lim_{\varepsilon\to 0}\left[-\frac{\partial H_N(\Gamma;V)}{\partial V}\right], \tag{10}$$

$$\Psi(\Gamma;V) = \lim_{\varepsilon\to 0}\left[-\frac{\partial^2 H_N(\Gamma;V)}{\partial V^2}\right], \quad \Psi(\Gamma;V) \neq \frac{\partial P(\Gamma;V)}{\partial V}. \tag{11}$$

Эти определения следуют основной идее метода квазисредних Боголюбова [1], согласно которому для снятия имеющегося вырождения «свободной» системы (в данном случае пространственного) необходимо «виртуально» ввести в функцию Гамильтона соответствующий физический «источник» (в данном случае потенциал стенок $U(\Gamma;V)$), снимающий это вырождение. После вычисления производных от $H_N(\Gamma;V)$ по $V$ этот источник следует аннулировать, и если при этом результат отличен от нуля, то это означает его неаналитичность по параметру $\varepsilon$; иными словами, операции дифференцирования по $V$ и предельного перехода по $\varepsilon$ неперестановочны между собой.

В этом контексте определения (10) и (11) целесообразны, поскольку вычисление производных по $V$ от полной функции Гамильтона вида (7) из-за наличия сингулярного слагаемого $U(\Gamma;V)$ не является математически корректной операцией и должно быть каким-либо образом «регуляризовано». Математически это соответствует тому, что дифференцирование сингулярных, или обобщённых, функций сводится к дифференцированию их регулярных «носителей» (см., например, [2]), для чего необходимо перейти от самих функций к хорошо определённым функционалам от них (в данном случае к статистической сумме).

По-видимому, именно недооценкой указанных обстоятельств были обусловлены математические трудности в [17, 21, 22] (см. также [11, 15]). Авторы этих работ пытались провести необходимую регуляризацию, сначала моделируя тем или иным образом «реальный» потенциал стенки, а затем переходя к сингулярному пределу «бесконечно высокой» стенки; в результате, однако, для $\Psi(\Gamma; V)$ получались расходящиеся выражения. Как показано в [14], избежать подобных трудностей позволяет использование в этой проблеме идей метода квазисредних Боголюбова [1]. Именно этот метод представляет собой физически естественную, математически корректную (и при этом достаточно универсальную) процедуру подобной регуляризации для широкого класса физических задач с различным характером «вырождения».

## 3. Динамические уравнения состояния

Детали вычислений, дающих конструктивную реализацию определений (10) и (11), можно найти в приложении к [14]; их основной результат состоит в следующем. Пусть макроскопическая динамическая система ограничена конечным объёмом $V$ и описывается функцией Гамильтона вида (7). Тогда явные выражения для $P(q,p;V)$ и $\Psi(q,p;V)$ определяются только «свободной» частью функции Гамильтона $H(q,p)$ и не зависят от конкретного вида «потенциала стенок» $U(\Gamma; V)$:

$$P_N(q,p;V) = -\frac{1}{fV}\left[\mathrm{D}_\lambda H_N\left(\lambda q, \frac{p}{\lambda}\right)\right]\Big|_{\lambda=1}, \tag{12}$$

$$\Psi_N(q,p;V) = \frac{1}{V}P_N(q,p;V) + \left(\frac{1}{fV}\right)^2\left[\mathrm{D}_\lambda(\mathbf{1}+\mathrm{D}_\lambda)H_N\left(\lambda q, \frac{p}{\lambda}\right)\right]\Big|_{\lambda=1}. \tag{13}$$

Здесь $\mathrm{D}_\lambda \equiv \mathrm{d}/\mathrm{d}\lambda$, а $\mathbf{1} \equiv \mathrm{D}_\lambda^0$ символически обозначает операторную единицу в семействе операторов $\{\mathrm{D}_\lambda^n\}$ ($n \geqslant 0$ — целое) $n$-кратного дифференцирования по $\lambda$, после проведения которого следует всюду положить $\lambda = 1$. Выражения (12) и (13) хорошо определены для достаточно «гладких» функций Гамильтона $H(q,p)$, а именно дважды дифференцируемых по своим аргументам $p$ и $q$. Величина $\lambda$ является параметром канонического масштабного преобразования, сохраняющего элемент фазового объёма $d\Gamma$: оно устанавливает связь между изменением объёма и эквивалентным ему изменением координат, причём условие каноничности требует и соответствующего изменения импульсов.

Заметим, что выражение (12) известно как теорема Боголюбова—Зубарева [1, 6], а выражение (13) было впервые получено в [14]. Выражения (12) и (13) естественно называть *динамическими уравнениями состояния*, поскольку они связывают между собой (квази)динамические величины — давление $P$ и сжимаемость $\Psi$ — с основной характеристикой динамической системы — функцией Гамильтона $H$.

Существенно, что в динамические уравнения состояния (12) и (13) не входит внешний тепловой параметр — температура $T$, однако эти уравнения содержат явную зависимость от внешнего механического параметра — объёма $V$; подчеркнём, что динамические функции $H$, $P$ и $\Psi$ заданы на фазовом пространстве $\Gamma$ системы. Все функции, входящие в (12) и (13), являются аддитивными относительно составляющих систему частиц, так что их средние значения пропорциональны числу частиц $N$.

С другой стороны, функции (12) и (13) имеют различный характер поведения относительно объёма $V$, а именно $H(q,p) = O(V^0)$, $P(q,p;V) = O(V^{-1})$, $\Psi(q,p;V) = O(V^{-2})$. Действительно, внешний параметр $V$ входит в правые части (12) и (13) только в виде множителя $V^{-1}$ и $V^{-2}$, поэтому в пределе $V \to \infty$ (т. е. для «свободной» системы) величины $P$ и $\Psi$ действительно стремятся к нулю, тогда как $H$ остаётся в этом пределе неизменной величиной[1].

В условиях теплового контакта динамической системы с термостатом функции $H$, $P$ и $\Psi$ становятся *случайными*, и при наличии теплового равновесия в соответствии с общим определением (9) можно усреднить обе части динамических уравнений состояния (12) и (13). Эта процедура приводит к *термодинамическим уравнениям состояния*, причём среднее значение функции $P$ из (12) всегда является термодинамическим средним (определение см. ниже после формулы (34)), тогда как для среднего значения функции $\Psi$ из (13) это не всегда так. Заметим, что усреднение уравнения (12) приводит к так называемой *теореме вириала*, или термокалорическому уравнению состояния, связывающему термическое $P(T,V)$ и калорическое $H(T,V)$ уравнения состояния.

Для неидеальной макроскопической системы функция Гамильтона $H(q,p)$ обычно может быть представлена в виде суммы трех слагаемых: энергии покоя $E_0$, кинетической $H_{\text{к}}(p)$ и потенциальной $H_{\text{п}}(q)$ энергий. В свою очередь, эти энергии обычно также являются аддитивными функциями по всем частицам ($E_0$ и $H_{\text{к}}(p)$) и их парам ($H_{\text{п}}(q)$). Заметим, что постоянная энергия $E_0$ не даёт вклада в динамические уравнения состояния системы (12) и (13) для давления и сжимаемости, что физически вполне обоснованно.

## Однородный случай

В [14] в качестве примера был рассмотрен частный случай, когда обе энергии $H_{\text{к}}(p)$ и $H_{\text{п}}(q)$ являются *однородными* (в смысле Эйлера) функциями своих аргументов с показателями $k$ и $l$ соответственно. Это означает, что

$$H_{\text{п}}(\lambda q) = \lambda^l H_{\text{п}}(q), \quad H_{\text{к}}(\lambda^{-1} p) = \lambda^{-k} H_{\text{к}}(p), \tag{14}$$

[1] Ясно, что дифференцирование по $q$ и/или $p$ не может изменить характер поведения по $V$ правых частей уравнений (12) и (13).

так что выражения (12) и (13) принимают вид

$$P(q,p;V) = \frac{1}{fV}[kH_{\text{к}}(p) - lH_{\text{п}}(q)], \tag{15}$$

$$\begin{gathered} \Delta\Psi(q,p;V) = \left(\frac{1}{fV}\right)^2 [k^2 H_{\text{к}}(p) + l^2 H_{\text{п}}(q)], \\ \Delta\Psi(q,p;V) \equiv \Psi(q,p;V) - \frac{1}{V}P(q,p;V). \end{gathered} \tag{16}$$

«Однородные» выражения (15) и (16) обладают следующими полезными свойствами.

1. При любых $k$ и $l$ обе энергии $H_{\text{к}}(p)$ и $H_{\text{п}}(q)$ входят в правые части (15) и (16) *линейно*, причём каждое дифференцирование по $\lambda$ увеличивает на единицу степень показателей $k$ и $l$, входящих в виде множителей перед $H_{\text{к}}(p)$ и $H_{\text{п}}(q)$.
2. Физическая размерность выражения (15) для давления соответствует объёмной плотности энергии, а выражения (16) для динамической сжимаемости — объёмной плотности давления, поскольку каждое дифференцирование по $\lambda$ приводит к увеличению на единицу степени множителя $1/V$.
3. Существуют условия, при которых давление $P(q,p;V)$, а также сжимаемость $\Psi(q,p;V)$ пропорциональны полной энергии $H(q,p) = H_{\text{к}}(p) + H_{\text{п}}(q)$. При этих условиях согласно (15) и (16) среднее значение $\langle\Psi\rangle$ пропорционально $\langle P\rangle$ и/или $\langle H\rangle$, т. е. является термодинамическим, и его вычисление не представляет никакой дополнительной проблемы. Очевидно, указанные условия выполняются только в двух случаях: при $k = -l$ или при $l = 0$, причём само значение $k$ может быть произвольным.

В данной работе мы ограничиваемся случаем *идеальной* динамической системы с $l = 0$, когда отсутствует зависящая от координат потенциальная энергия $H_{\text{п}}(q)$ взаимодействия между частицами. Полная энергия $H(q,p)$ такой системы, помимо постоянного слагаемого $E_0$, содержит зависящую только от импульсов частиц кинетическую энергию $H_{\text{к}}(p)$:

$$H_{\text{п}}(q) = 0, \quad H(\Gamma) \equiv H(q,p) = E_0 + H_{\text{к}}(p). \tag{17}$$

В случае если функция $H_{\text{к}}(p)$ однородна (в смысле Эйлера) с показателем $k$, выражения (15) и (16) принимают следующий простой вид:

$$P(p;V) = \kappa\mathcal{H}_{\text{к}}(p;V), \quad \kappa = \frac{k}{f}, \quad \mathcal{H}_{\text{к}}(p;V) \equiv \frac{H_{\text{к}}(p)}{V}, \tag{18}$$

$$\Delta\Psi(q,p;V) = \frac{1}{V}\kappa P(p;V) = \frac{1}{V}\kappa^2\mathcal{H}_{\text{к}}(p;V). \tag{19}$$

Отметим, что в выражения (18) и (19) входит постоянная $\kappa = k/f$, равная отношению показателя однородности $k$ к числу степеней свободы $f$. Величина $\kappa$ характеризует данную динамическую систему при описании её динамических и термодинамических свойств как в классическом, так и в квантовом режимах; таким образом, $\kappa$ является своего рода «показателем подобия» системы.

При данном значении $f$ величина $\kappa$ может изменяться от $\kappa_{\text{нр}} = k_{\text{нр}}/f = 2/f$ до $\kappa_{\text{ур}} = k_{\text{ур}}/f = 1/f$ (см. (2)—(4)), причём обычно $1 \leqslant k \leqslant 2$, $1 \leqslant f \leqslant 3$ и $1/3 \leqslant \kappa \leqslant 2$. В некоторых моделях «идеального газа» (используемых, например, в космологии) интервалы изменения параметров $k$, $f$ и $\kappa = k/f$ могут быть иными как по величине, так и, вообще говоря, по знаку, однако выражения (18) и (19) сохраняют применимость и для этих случаев. Заметим, что если при этом плотность энергии положительна, то флуктуации давления также положительны (независимо от знака $\kappa$); таким образом, система может быть механически устойчива, даже если давление отрицательно, как это имеет место в случае $\kappa < 0$ благодаря $k < 0$ ($f > 0$ всегда).

## Неоднородный случай

Более общий случай (17) идеального газа с *неоднородной* функцией Гамильтона вида (1), описывающей общий релятивистский закон связи кинетической энергии и импульса, рассматривался в [12,13] и особенно детально в [8]. В этом случае выражения (14)—(16) (и, соответственно, (18) и (19)) уже неприменимы, и для получения явного вида динамических уравнений состояния следует вернуться к исходным выражениям (12) и (13).

Введём безразмерную переменную $\xi$, для которой в соответствии с (1) имеем[1]

$$h(\xi) = 1 + h_{\text{к}}(\xi) = (1+\xi^2)^{1/2}, \quad \xi = \frac{cp}{E_0} \quad (E_0 \neq 0), \quad H(\xi) = E_0 h(\xi). \tag{20}$$

Тогда вместо (18) и (19) получаем динамические уравнения состояния следующего вида:

$$P(\xi;V) = \frac{E_0}{fV}\,\frac{h^2(\xi)-1}{h(\xi)} = \mathcal{H}(\xi;V)\mu^{(-)}(\xi), \tag{21}$$

$$\Delta\Psi(q,p;V) = E_0\left(\frac{1}{fV}\right)^2 \frac{h^4(\xi)-1}{h^3(\xi)} = \frac{1}{V}P(\xi;V)\mu^{(+)}(\xi) = \frac{1}{V}\mathcal{H}(\xi;V)\mu^{(-)}(\xi)\mu^{(+)}(\xi). \tag{22}$$

Здесь с учётом определения (18) для $\mathcal{H}_{\text{к}}(p;V)$ введена объёмная плотность полной энергии $\mathcal{H}(\xi;V) = (E_0/V) + \mathcal{H}_{\text{к}}(p;V)$.

Иногда удобнее вместо (21) и (22) использовать представления, обобщающие (18) и (19):

$$P(\xi;V) = \mathcal{H}_{\text{к}}(\xi;V)\kappa^{(+)}(\xi), \quad \mathcal{H}_{\text{к}}(\xi;V) = \mathcal{H}(\xi;V) f \kappa^{(-)}(\xi), \tag{23}$$

$$\Delta\Psi(\xi;V) = \frac{1}{V}P(\xi;V)\mu^{(+)}(\xi) = \frac{1}{V}\mathcal{H}_{\text{к}}(\xi;V)\kappa^{(+)}(\xi)\mu^{(+)}(\xi). \tag{24}$$

[1] Случай $E_0 = 0$ точно соответствует ультрарелятивистскому пределу и является однородным с $k = 1$.

Входящие в (21)—(24) безразмерные множители $\mu^{(\pm)}(\xi)$ и $\kappa^{(\pm)}(\xi)$ имеют смысл обобщённых «показателей однородности» и зависят (хотя и весьма слабо) от переменной $\xi$ посредством функции $h(\xi)$:

$$f\kappa^{(\pm)}(\xi) = 1 \pm [h(\xi)]^{-1}, \quad f\mu^{(\pm)}(\xi) = 1 \pm [h(\xi)]^{-2}, \quad f\nu^{(\pm)}(\xi) = 1 \pm [h(\xi)]^{-4};$$
$$f\kappa^{(+)}(\xi)\kappa^{(-)}(\xi) = \mu^{(-)}(\xi), \quad \mu^{(-)}(\xi)\mu^{(+)}(\xi) = f\nu^{(-)}(\xi), \quad h_{\text{к}}(\xi) = h(\xi)f\kappa^{(-)}(\xi). \tag{25}$$

Очевидно, что основную роль в динамическом описании системы играет функция $h_{\text{к}}(\xi) = 1 - h(\xi)$, которая обладает следующими свойствами: $h_{\text{к}}(\xi)$ и её производные $h'_{\text{к}}(\xi) = \xi[h(\xi)]^{-1}$ и $h''_{\text{к}}(\xi) = [h(\xi)]^{-3}$ при всех $0 \leqslant \xi < \infty$ знакопостоянны (все три неотрицательны) и монотонны: $h_{\text{к}}(\xi)$ и $h'_{\text{к}}(\xi)$ возрастают от 0 до $\infty$ и до 1 соответственно, а $h''_{\text{к}}(\xi)$ убывает от 1 до 0.

Функция $h'''_{\text{к}}(\xi)$ также знакопостоянна (неположительна), но уже не монотонна: она имеет минимум при $\xi_0 = 1/2$ и достигает максимума, равного нулю, в обоих пределах: при $\xi = 0$ и $\xi \to \infty$. Наконец, функция $h''''_{\text{к}}(\xi)$ не является уже ни знакопостоянной, ни монотонной: она возрастает от минимального значения, равного $-3$ при $\xi = 0$, меняет знак при $\xi_0 = 1/2$ и, пройдя через положительный максимум, убывает до нуля при $\xi \to \infty$.

Представляют интерес разложения для функций $h_{\text{к}}(\xi)$ и $1/h_{\text{к}}(\xi)$ в предельных случаях: в нерелятивистском ($^{\text{нр}}$) пределе ($\xi \to 0$) и в ультрарелятивистском ($^{\text{ур}}$) пределе ($\xi \to \infty$). Низшие поправки к «однородным» формулам (2) и (3) имеют вид

$$h_{\text{к}}(\xi) \approx h_{\text{к}}^{\text{нр}}(\xi)\left[1 - \frac{\xi^2}{4}\right] = h_{\text{к}}^{\text{нр}}(\xi)\left[1 - \frac{h_{\text{к}}^{\text{нр}}(\xi)}{2}\right], \quad h_{\text{к}}^{\text{нр}}(\xi) = \frac{\xi^2}{2} \quad (\xi \to 0),$$
$$\frac{1}{h_{\text{к}}(\xi)} = [h_{\text{к}}^{\text{ур}}(\xi)]^{-1}\left[1 - \frac{\xi^2}{2}\right] = [h_{\text{к}}^{\text{ур}}(\xi)]^{-1}\left[1 - \frac{[h_{\text{к}}^{\text{ур}}(\xi)]^{-2}}{2}\right], \tag{26}$$
$$[h_{\text{к}}^{\text{ур}}(\xi)]^{-1} = \xi^{-1} \quad (\xi \to \infty).$$

Заметим, что $h_{\text{к}}^{\text{нр}}(0) = 1/h_{\text{к}}^{\text{ур}}(\infty) = 0$, что и позволяет рассматривать эти величины как малые в соответствующих областях изменения переменной $\xi$.

Соответственно поведение функций $\kappa^{(\pm)}(\xi)$ и $\mu^{(\pm)}(\xi)$ таково: все четыре функции при $\xi \to \infty$, $h(\xi) \to 0$ стремятся к одному и тому же предельному значению $\kappa_{\text{ур}} = 1/f$, однако при $\xi = 0$, $h(\xi) = 1$ пределы для них совпадают уже только для каждой из пар: $\kappa^{(\pm)}(0) = \mu^{(\pm)}(0) = \kappa_{\text{ур}} \pm (1/f)$, так что $\kappa^{(+)}(0) = \mu^{(+)}(0) = \kappa_{\text{нр}} = 2/f$, тогда как $\kappa^{(-)}(0) = \mu^{(-)}(0) = 0$.

Кроме того, пары функций $\left(\kappa^{(+)}(\xi), \mu^{(+)}(\xi)\right)$ и $\left(\kappa^{(-)}(\xi), \mu^{(-)}(\xi)\right)$ обладают схожими общими свойствами: обе функции $\kappa^{(+)}(\xi)$ и $\mu^{(+)}(\xi)$ положительны и монотонно убывают с ростом $\xi$ (от $\kappa_{\text{нр}}$ при $\xi = 0$ до $\kappa_{\text{ур}}$ при $\xi \to \infty$)[1], тогда как обе функции $\kappa^{(-)}(\xi)$ и $\mu^{(-)}(\xi)$ неотрицательны и монотонно возрастают (от 0 при $\xi = 0$ до $\kappa_{\text{ур}}$ при $\xi \to \infty$).

[1] В указанных предельных случаях уравнения (23) и (24) переходят в свои «однородные» аналоги (18) и (19).

В ряде физических задач может представлять интерес получение поправок к предельным «однородным» уравнениям (18) и (19), обусловленных переменным характером функций $\kappa^{(\pm)}(\xi)$ и $\mu^{(\pm)}(\xi)$, входящих в динамические уравнения состояния (23) и (24) для $P(\xi;V)$ и $\Psi(\xi;V)$. Для проведения подобной процедуры в духе теории возмущений при малых значениях $\xi \ll 1$ в нерелятивистском ($^{\text{нр}}$) пределе и больших значениях $\xi \gg 1$ в ультрарелятивистском ($^{\text{ур}}$) пределе удобно использовать в уравнениях (23)—(25) в качестве малого параметра не $\xi$ и $1/\xi$, а величины $h_{\text{к}}(\xi)$ и $1/h_{\text{к}}(\xi)$ соответственно.

Очевидно, что даже простейший учёт поправок на неоднородность (в смысле Эйлера) функции Гамильтона для общего релятивистского случая приводит к отклонению от присущей однородному случаю линейной зависимости между $P(\xi;V)$ и $H_{\text{к}}(\xi;V)$, а также между $\Delta\Psi(\xi;V)$ и $P(\xi;V)$.

Сопоставляя формулы (23), (24) со схожими по структуре «однородными» аналогами (18), (19), видим, что эти отклонения удобно описывать с помощью пары обобщённых показателей «однородности» $\big(\kappa^{(+)}(\xi), \mu^{(+)}(\xi)\big)$. Используя разложения (26), нетрудно получить в низшем приближении для нерелятивистского ($^{\text{нр}}$) предела

$$\begin{aligned} \kappa^{(+)}(\xi) &= \frac{1}{f}\{1 + [1 + h_{\text{к}}(\xi)]^{-1}\} \approx \kappa_{\text{нр}}\left[1 - \frac{h_{\text{к}}(\xi)}{2}\right], \\ \mu^{(+)}(\xi) &= \frac{1}{f}\{1 + [1 + h_{\text{к}}(\xi)]^{-2}\} \approx \kappa_{\text{нр}}[1 - h_{\text{к}}^{\text{нр}}(\xi)] \end{aligned} \qquad (\xi \to 0) \qquad (27)$$

и для ультрарелятивистского ($^{\text{ур}}$) предела

$$\begin{aligned} \kappa^{(+)}(\xi) &= \frac{1}{f}\{1 + h_{\text{к}}^{-1}(\xi)[1 + h_{\text{к}}^{-1}(\xi)]^{-1}\} \approx \kappa_{\text{ур}}\{1 + [h_{\text{к}}(\xi)]^{-1}\}, \\ \mu^{(+)}(\xi) &= \frac{1}{f}\{1 + h_{\text{к}}^{-2}(\xi)[1 + h_{\text{к}}^{-2}(\xi)]^{-2}\} \approx \kappa_{\text{ур}}\{1 + [h_{\text{к}}(\xi)]^{-2}\} \end{aligned} \qquad (\xi \to \infty). \quad (28)$$

С учётом (27) и (28) соотношения (23) и (24) принимают приближённый вид

$$\begin{aligned} P(\xi;V) &\approx \kappa_{\text{нр}}\mathcal{H}_{\text{к}}(\xi;V)\left[1 - \frac{h_{\text{к}}(\xi)}{2}\right], \\ \Delta\Psi(\xi;V) &\approx \kappa_{\text{нр}}^2\mathcal{H}_{\text{к}}(\xi;V)\left[1 - \frac{3}{2}h_{\text{к}}(\xi)\right] \quad (\xi \to 0); \end{aligned} \qquad (29)$$

$$\begin{aligned} P(\xi;V) &\approx \kappa_{\text{ур}}\mathcal{H}_{\text{к}}(\xi;V)\{1 + [h_{\text{к}}(\xi)]^{-1}\}, \\ \Delta\Psi(\xi;V) &\approx \kappa_{\text{ур}}^2\mathcal{H}_{\text{к}}(\xi;V) \quad (\xi \to \infty). \end{aligned} \qquad (30)$$

Выражения (26)—(30) обнаруживают тенденцию к «выполаживанию» зависимостей от $\xi$ как кинематических ($\kappa^{(+)}$, $\mu^{(+)}$), так и динамических ($h_{\text{к}}$, $P$, $\Delta\Psi$) величин. При малых (но конечных) $\xi$ все эти величины становятся *меньше* своих «однородных» пределов при $\xi = 0$, тогда как при больших (но конечных) $\xi$ — наоборот, *больше*, чем при $1/\xi = 0$.

# 4. Термодинамические уравнения состояния. Общие соотношения

Термодинамическими принято называть пару уравнений состояния — *термическое* $P = P(\beta, V)$ и *калорическое* $H = H(\beta, V)$ для давления и внутренней энергии — как функций от двух независимых термодинамических переменных, описываемых вектором $\boldsymbol{x} = (\beta, V)$. В ряде случаев представляет интерес и непосредственная взаимосвязь между $P$ и $H$; подобное уравнение состояния иногда называют *термокалорическим*.

Согласно Гиббсу [3], любому вектору $\boldsymbol{x}$ соответствует вектор $\boldsymbol{X}$ величин, термодинамически сопряжённых к $\boldsymbol{x}$, что означает наличие термодинамического потенциала $\Phi(\boldsymbol{x})$, для которого $\boldsymbol{X}(\boldsymbol{x}) = \partial\Phi(\boldsymbol{x})/\partial\boldsymbol{x}$. Для $\boldsymbol{x} = (\beta, V)$ функция $\Phi(\boldsymbol{x})$ называется *потенциалом Масье—Планка*, причём $\boldsymbol{X} = (-H, \beta P)$, так что

$$\beta P(\beta, V) = \frac{\partial\Phi(\beta, V)}{\partial V}, \tag{31}$$

$$-H(\beta, V) = \frac{\partial\Phi(\beta, V)}{\partial\beta}. \tag{32}$$

С математической точки зрения $\Phi$ является лежандр-образом энтропии $S$ по паре сопряжённых переменных $\beta$ и $H$ (здесь и далее $H$ не энтальпия, а внутренняя энергия!). Напомним, что из фундаментального уравнения термодинамики $dH(S, V) = T\,dS - P\,dV$ следует, что $dS(H, V) = \beta\,dH + \beta P\,dV$, откуда $d(S - \beta H) \equiv d\Phi(\beta, V) = -H\,d\beta + \beta P\,dV$. Ту же физическую ситуацию, что и $\Phi$, описывает и свободная энергия $F(T, V) = H(S, V) - TS = -(1/\beta)\Phi(\beta, V)$, но $H(T, V)$ получается для $F$ более сложным образом, чем $H(\beta, V)$ для $\Phi$.

Связь между термодинамикой и статистической механикой, согласно Гиббсу, устанавливается посредством следующих отождествлений термодинамических и усреднённых динамических величин:

$$\begin{gathered} \Phi(\beta, V) = \ln Z(\beta, V), \quad \boldsymbol{X}(\boldsymbol{x}) = \langle \boldsymbol{X}(\Gamma; \boldsymbol{x})\rangle, \quad \boldsymbol{x} = (\beta, V), \\ \boldsymbol{X}(\Gamma; \boldsymbol{x}) \equiv \frac{\partial}{\partial\boldsymbol{x}}[-\beta H(\Gamma; V)] = [-H(\Gamma; V), \beta P(\Gamma; V)]; \end{gathered} \tag{33}$$

средние значения понимаются здесь как канонические в смысле определения (9), а производная по $V$ понимается в смысле (10).

Соотношения (6), (8) и (9) показывают, что определённая согласно (33) функция $\Phi(\beta, V)$ действительно играет роль производящей функции для канонических средних значений динамических величин $\boldsymbol{X}(\Gamma; \boldsymbol{x})$, поскольку

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{x}}\ln Z(\beta, V) = \\ &\qquad = Z^{-1}(\beta, V)\int d\Gamma \exp[-\beta H(\Gamma; V)]\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{x}}[-\beta H(\Gamma; V)] \equiv \langle \boldsymbol{X}(\Gamma; \boldsymbol{x})\rangle. \end{aligned} \tag{34}$$

Разумеется, статистическая сумма $Z(\beta, V)$ из (4) предполагается конечной, строго положительной и достаточно гладкой (дифференцируемой) функцией своих аргументов $\beta$ и $V$, характеризующих условия теплового и механического равновесия. Очевидно, что посредством (34) могут быть получены лишь так называемые термодинамические средние, для которых динамический «прообраз» может быть представлен в виде $\boldsymbol{X}(\Gamma;\boldsymbol{x})$ из (33).

Динамическая сжимаемость $\Psi(\Gamma;V)$, определённая выше в (11) и (13), не относится к этому классу динамических величин, и её среднее значение $\Psi(\beta,V)$ или $\Delta\Psi(\beta,V)=\Psi(\beta,V)-(1/V)P(\beta,V)$ в общем случае не является термодинамическим и должно вычисляться *независимо* от $\Phi(\beta,V)$; как отмечалось выше (см. свойство 3 после уравнений (15) и (16)), исключение составляет лишь случай однородной функции Гамильтона.

Матрица размера $2\times 2$ обобщённых восприимчивостей $\boldsymbol{\chi}(\boldsymbol{x})$ равна по определению $\partial\boldsymbol{X}(\boldsymbol{x})/\partial\boldsymbol{x}$ и имеет вид $\partial^2\Phi(\boldsymbol{x})/\partial\boldsymbol{x}^2$; её диагональные компоненты прямо связаны с изотермической сжимаемостью $\chi_{\mathrm{T}}(\beta,V)$ и изохорической теплоёмкостью $C_{\mathrm{V}}(\beta,V)$ соответственно:

$$\chi_{\mathrm{T}}(\beta,V)\equiv\frac{\partial P(\beta,V)}{\partial V}=\frac{1}{\beta}\frac{\partial^2\Phi(\beta,V)}{\partial V^2},\tag{35}$$

$$C_{\mathrm{V}}(\beta,V)\equiv\frac{\partial H(\beta,V)}{\partial T}=(k_{\mathrm{B}}\beta^2)\frac{\partial^2\Phi(\beta,V)}{\partial\beta^2};\quad \frac{\partial}{\partial T}=-k_{\mathrm{B}}\beta^2\frac{\partial}{\partial\beta}.\tag{36}$$

Согласно объединённой лемме Гиббса [3] (см. также [11, 15, 16]), для любой пары сопряжённых в смысле (33) динамических величин $\boldsymbol{X}(\Gamma;\boldsymbol{x})$ и $\boldsymbol{x}$ дисперсия $\langle[\Delta\boldsymbol{X}(\Gamma;\boldsymbol{x})]^2\rangle$ выражается следующим образом:

$$\Big\langle\big(\Delta\boldsymbol{X}(\Gamma;\boldsymbol{x})\big)^2\Big\rangle\equiv\langle[\boldsymbol{X}(\Gamma;\boldsymbol{x})]^2\rangle-\langle\boldsymbol{X}(\Gamma;\boldsymbol{x})\rangle^2=\frac{\partial\langle\boldsymbol{X}(\Gamma;\boldsymbol{x})\rangle}{\partial\boldsymbol{x}}-\left\langle\frac{\partial\boldsymbol{X}(\Gamma;\boldsymbol{x})}{\partial\boldsymbol{x}}\right\rangle.$$

Тогда для пары $[-H(\Gamma),\beta]$ с учётом очевидного свойства $\partial H(\Gamma)/\partial\beta=0$, а также определения $C_{\mathrm{V}}(\beta,V)$ из (36), имеем

$$\langle(\Delta H)^2\rangle=(k_{\mathrm{B}}\beta^2)^{-1}C_{\mathrm{V}}(\beta,V);\tag{37}$$

аналогично для пары $[\beta P(\Gamma;V),V]$ с учётом определений из (36) и (11) имеем

$$\beta\langle(\Delta P)^2\rangle=\chi_{\mathrm{T}}(\beta,V)+\Psi(\beta,V).\tag{38}$$

Рассмотрим роль динамических уравнений состояния (12) и (13) — точнее, их усреднённых аналогов — в статистической механике. Прежде всего, каноническое усреднение уравнения (12) в общем виде даёт термокалорическое уравнение состояния, которое не всегда просто получить из системы уравнений состояния (31) и (32).

В частности, согласно уравнениям (18) и (23), для идеальной системы с однородной (или соответственно неоднородной) функцией Гамильтона термокалорическое уравнение состояния имеет вид

$$P(\beta,V)=\kappa\frac{1}{V}H_{\text{к}}(\beta,V),\quad P(\beta,V)=\frac{1}{fV}E_0\langle h(\xi)\{1-[h(\xi)]^{-2}\}\rangle.\tag{39}$$

Усреднение уравнения (13) даёт общее выражение для входящей в (39) величины $\Psi(\beta,V)$:

$$\Psi(\beta,V) = -\frac{1}{V}P(\beta,V) + \Delta\Psi(\beta,V). \tag{40}$$

В частном случае идеальной системы с однородной функцией Гамильтона в результате усреднения динамического уравнения состояния (19) получаем *линейную* связь $\Delta\Psi(\beta,V)$ с термодинамическими средними $P(\beta,V)$ и/или $H(\beta,V)$:

$$\Delta\Psi(\beta,V) = \kappa\frac{1}{V}P(\beta,V) = \kappa^2\left(\frac{1}{V}\right)^2 H(\beta,V). \tag{41}$$

Для идеальной системы с неоднородной функцией Гамильтона после усреднения уравнения (22) имеем

$$\Delta\Psi(\beta,V) = \left(\frac{1}{fV}\right)^2 E_0\langle h(\xi)\{1-[h(\xi)]^{-4}\}\rangle. \tag{42}$$

Для последующего построения в разделе 5 низко- и высокотемпературных разложений в рамках теории возмущений по малым параметрам в качестве термических уравнений состояния полезно использовать также усреднённые динамические уравнения (23) и (24). Тогда вместо (39) и (42) в общем случае неоднородной функции Гамильтона имеем

$$P(\beta,V) = \frac{1}{fV}E_0\langle h_\text{к}(\xi)\{1+[h(\xi)]^{-1}\}\rangle, \tag{43}$$

$$\Delta\Psi(\beta,V) = \left(\frac{1}{fV}\right)^2 E_0\langle h_\text{к}(\xi)\{1+[h(\xi)]^{-1}\}\{1+[h(\xi)]^{-2}\}\rangle. \tag{44}$$

Согласно разложениям (26) для нерелятивистского и ультрарелятивистского случаев малыми параметрами являются $h_\text{к}(\xi)$ и $h_\text{к}^{-1}(\xi)$ соответственно, так что

$$\begin{aligned}
&[h(\xi)]^{-n} = \{1+h_\text{к}(\xi)\}^{-n} = \\
&\quad = 1 - n[h_\text{к}(\xi)] + \left[\frac{n(n+1)}{2}\right][h_\text{к}(\xi)]^2 - \ldots, \quad h_\text{к}(\xi) \ll 1; \\
&[h(\xi)]^{-n} = \{1+h_\text{к}^{-1}(\xi)[1+h_\text{к}^{-1}(\xi)]^{-1}\}^{-n} = \\
&\quad = 1 - n[h_\text{к}(\xi)]^{-1} + \left[\frac{n(n+3)}{2}\right][h_\text{к}(\xi)]^{-2} - \ldots, \quad \frac{1}{h_\text{к}(\xi)} \ll 1.
\end{aligned} \tag{45}$$

## Вычисление потенциала Масье—Планка

Статистическая сумма (8) для идеальной системы (17) в общем случае произвольной «неоднородной» функции Гамильтона $H_\text{к}(p)$ имеет мультипликативный вид:

$$Z_N(\beta,V) = [Vz(\beta)]^N, \quad z(\beta) = \exp(-\beta E_0)z_\text{к}(\beta), \quad z_\text{к}(\beta) = \int d\Gamma_p \exp[-\beta H_\text{к}(p)];$$

$$\rho_\text{к}(p) = [z_\text{к}(\beta)]^{-1}\exp[-\beta H_\text{к}(p)], \quad \int d\Gamma_p \rho_\text{к}(p) = 1. \tag{46}$$

Зависимость «малой» статистической суммы $z_\text{к}$ от (обратной) температуры $\beta$ определяется видом зависимости $H_\text{к}$ от импульсов $p$. Элемент объёма $d\Gamma_p$ импульсной части фазового пространства имеет вид $A_f p^{f-1}\,dp$ ($A_1 = 1$, $A_2 = 2\pi$, $A_3 = 4\pi$), а интеграл по $dp$ в (43) берётся в пределах от 0 до $\infty$, но не всегда может быть вычислен аналитически. Заметим, что указанная задача в менее общей постановке частично рассматривалась в [5, 7, 9, 19] на основе оригинальных работ [18—20].

Для рассмотрения предельных случаев естественно ввести следующую терминологию для канонических функций распределения $\rho_\text{к}(p)$ из (4). Для общего релятивистского случая (1) это распределение является *распределением Юттнера* (1911), для нерелятивистского случая (2) — *распределением Максвелла* (1859), а для ультрарелятивистского случая (3) — *распределением Вина* (1896).

С математической точки зрения случаи (2) и (3) соответствуют нормальному (гауссову) и показательному распределениям по $f$-мерной случайной переменной $p$; общий степенной случай (4), по-видимому, не рассматривался в физических приложениях (функция $\rho_\text{к}(p)$ для этого случая соответствует гамма-распределению).

Потенциал Масье—Планка, соответствующий статистической сумме идеальной системы (4), имеет аддитивный вид относительно функций, зависящих от $V$ и $\beta$:

$$\Phi_N(\beta, V) = N[\ln V - \beta E_0 + \ln z_\text{к}(\beta)]. \tag{47}$$

В этом случае термическое уравнение состояния (31) (и его следствие (35)) при *любой*, а не только однородной, зависимости $H_\text{к}(p)$ от импульса $p$ имеет простейший вид уравнения состояния Клапейрона—Менделеева:

$$P(\beta, V) = \frac{N}{\beta V} = nk_\text{B}T, \quad n = \frac{N}{V}; \quad \chi_\text{T}(\beta, V) = -\frac{1}{V}P(\beta, V). \tag{48}$$

Тогда с учётом (40) и формулы (48) для $\chi_\text{T}(\beta, V)$ получаем для флуктуаций давления (38) идеальной системы с произвольной функцией Гамильтона $H_\text{к}(p)$

$$\langle(\Delta P)^2\rangle = \frac{1}{\beta}\Delta\Psi(\beta, V), \tag{49}$$

откуда, в частности, для однородного случая (41) с учётом формулы (43) для $P(\beta, V)$ имеем для абсолютной и относительной дисперсий

$$\langle(\Delta P)^2\rangle = \frac{1}{N}\kappa P^2(\beta, V), \quad \left\{\frac{\langle(\Delta P)^2\rangle}{P^2(\beta, V)}\right\}^{1/2} = \kappa^{1/2}N^{-1/2}. \tag{50}$$

Калорические величины (32) и (36) имеют следующий вид:

$$H(\beta) = E_0 + \langle H_\text{к}(\xi)\rangle = E_0 - N\left(\frac{\partial}{\partial\beta}\right)\ln z_\text{к}(\beta), \tag{51}$$

$$C_\text{V}(\beta) = N(k_\text{B}\beta^2)^{-1}\left(\frac{\partial^2}{\partial\beta^2}\right)\ln z_\text{к}(\beta). \tag{52}$$

Очевидно, что и средняя энергия, и теплоёмкость идеальной системы при *любой* (а не только однородной) зависимости $H_\text{к}(p)$ от импульса $p$ зависят только от температуры $\beta$ и вообще не содержат зависимости от объёма $V$. Однако вычислить величину $z_\text{к}(\beta)$ из (4) и её логарифмические производные, входящие в (51) и (52), в общем случае может оказаться затруднительно.

### «Однородный» случай

Покажем, что в этом случае указанную трудность можно обойти, используя в качестве термокалорического уравнения состояния первую из формул (39). Возможность подобного «обхода» обусловлена более простой зависимостью потенциала Масье—Планка (47) от объёма $V$ по сравнению с его зависимостью от $\beta$ для идеальной системы с произвольным видом функции Гамильтона $H_\text{к}(p)$.

Действительно, подставляя в первую из формул (39) первую из формул (48), получаем обобщённую (для произвольного значения $\kappa = k/f$) *теорему о равнораспределении* внутренней энергии и теплоёмкости системы по степеням свободы:

$$H_\text{к}(\beta) = N\frac{1}{\kappa}\frac{1}{\beta} = \frac{1}{k}Nfk_\text{B}T; \quad C_\text{V} = \frac{1}{\kappa}Nk_\text{B} = \frac{1}{k}Nfk_\text{B} = \text{const}. \tag{53}$$

Очевидно, что в однородном случае как изохорическая $C_\text{V}$, так и изобарическая $C_\text{P} = C_\text{V} + (N/N_A)R = C_\text{V} + Nk_\text{B} = C_\text{V}(1+1/\kappa)$ теплоёмкости постоянны, причём коэффициент Пуассона (показатель адиабаты) $\gamma = C_\text{P}/C_\text{V} = 1 + (1/\kappa) > 1$.

В частном случае однородной степенной функции вида (4) можно убедиться в справедливости выражений (53) и непосредственно, поскольку в этом случае «малая» статистическая сумма легко вычисляется с использованием интегрального преобразования Меллина (см., например, [4]):

$$z_\text{к}(\beta) = A_f \int\limits_0^\infty dp\, p^{f-1} \exp[-\beta\alpha_k p^k] = A_f \frac{1}{k}\Gamma\left[\frac{1}{\kappa}\right](\beta\alpha_k)^{-1/\kappa}, \tag{54}$$

где $\Gamma[1/\kappa]$ — гамма-функция положительного аргумента $1/\kappa$, а численные множители $A_f$ определены ниже после формулы (55). Как и следовало ожидать, найденные с помощью (54) согласно (51) и (52) величины $H(\beta)$ и $C_\text{V}(\beta)$ совпадают с полученными выше в (50) более простым способом; ясно, что физически интересным случаям нерелятивистского и ультрарелятивистского пределов в (53) и (54) соответствуют $k = 2$ и $k = 1$.

## 5. Термодинамические уравнения состояния. Релятивистский идеальный классический газ

Перейдём теперь к построению термодинамических уравнений состояния для общего — неоднородного — случая классического релятивистского идеального газа с функцией Гамильтона $h(\xi)$, определённой в (20). Здесь и далее использованы безразмерные энергетические ($h = H/E_0$) и импульсные ($\xi = cp/E_0$) единицы, все экстенсивные (пропорциональные числу частиц $N$) величины приводятся в расчёте на одну частицу.

## Представления для статистической суммы и её моментов

Используя определение (4) для «малой» статистической суммы $z(\beta)$, выразим её в безразмерных температурных единицах $a = \beta E_0 = T_0/T$, $a \geqslant 0$, полагая пока, что $E_0 \neq 0$ ($T_0 \equiv E_0/k_\mathrm{B}$ — характерная температура, а $p_0 = E_0/c = T_0(k_\mathrm{B}/c)$ — характерный импульс данного сорта частиц):

$$z(a) = \int\limits_0^\infty d\Gamma_\xi \exp[-ah(\xi)], \quad d\Gamma_\xi = d\Gamma_{p(\xi)} = A_f(p_0)^f \xi^{f-1}\, d\xi, \quad z(a) = \zeta(\xi; a), \tag{55}$$

где $A_1 = 1$, $A_2 = 2\pi$, $A_3 = 4\pi$, а пределы интегрирования по $\xi$ в (55) (так же как и по $p$ в (54)) равны 0 и $\infty$ соответственно.

Очевидно, что при любом $a > 0$ сходимость интеграла (55) обеспечена и улучшается с ростом $a$, однако предельное значение $a = 0$ следует исключить. Физически предел $a = T_0/T \to 0$ соответствует высокотемпературному приближению $T \to \infty$ или случаю $E_0 = T_0 = 0$. Поэтому представление (55) удобно при *больших* значениях $a \gg 1$ (когда $T \to 0$ и/или $T_0 \to \infty$) для получения низкотемпературных (НТ) и/или нерелятивистских (НР) разложений[1], и его естественно называть *НТ/НР-представлением* статистической суммы $z(a)$ классического релятивистского газа.

Исключение точки $a = 0$ для НТ/НР-представления обусловлено тем, что величина $\zeta(\xi; 0) = \int d\Gamma_\xi \sim \xi^f$ при любом $f > 0$ расходится на верхнем пределе при $\xi \to \infty$; этот же вывод следует из асимптотики $z(a) \sim \int d\Gamma_\xi e^{-a\xi} \sim a^{-f}$ при $a \to 0$, где использовано свойство $h(\xi) \approx \xi$ при больших значениях $\xi$. Для возможности рассмотрения *малых* значений $a \ll 1$, в том числе $a = 0$ (когда $T \to \infty$ и/или $T_0 \to 0$), т. е. для получения высокотемпературных (ВТ) и/или ультрарелятивистских (УР) разложений, следует перейти от НТ/НР- к *ВТ/УР-представлению* для $z(a)$.

С этой целью следует произвести в (55) замену переменной $ah(\xi) = \eta$ с $h(\xi) = (1 + \xi^2)^{1/2} \geqslant 1$, так что $\eta \geqslant a$; кроме того, введём обозначение $p_T = T(k_\mathrm{B}/c)$ для характерного теплового импульса частиц газа. Тогда получим

$$z(a) = \int\limits_a^\infty d\Gamma_\eta \left[1 - \left(\frac{a}{\eta}\right)^2\right]^{(f-2)/2}, \quad d\Gamma_\eta = A_f(p_T)^f e^{-\eta}\eta^{f-1}\, d\eta, \quad z(a) = \zeta(\eta; a). \tag{56}$$

[1] Включение точки $a = 0$ и, соответственно, получение высокотемпературных разложений при малых значениях $a$ достигается с помощью замены переменной, см. ниже формулу (56).

В отличие от интеграла (55), переменная $a$ входит не только в подынтегральное выражение, но и в нижний предел интеграла (56); кроме того, согласно (56) $z(a) \to 0$ при $a \to \infty$, тогда как при $a \to 0$ величина $z(0)/A_f(p_T)^f$ имеет конечное предельное значение, равное $\Gamma(f)$.

В соответствии с результатами раздела 4 все термодинамические величины идеального классического релятивистского газа могут быть выражены через простые (нецентральные) моменты статистической суммы, определённые следующим образом[1]:

$$h^{(n)}(a) \equiv \int\limits_0^\infty d\Gamma_\xi [h(\xi)]^n \exp[-ah(\xi)], \quad h^{(0)}(a) = z(a), \quad h^{(n)}(a) = \zeta^{(n)}(\xi; a); \tag{57}$$

после замены $\xi \to \eta$ величины $h^{(n)}(a)$ будут иметь вид[2]

$$h^{(n)}(a) = \left(\frac{1}{a}\right)^n \int d\Gamma_\eta \eta^n \left[1 - \left(\frac{a}{\eta}\right)^2\right]^{(f-2)/2}. \tag{58}$$

Естественно называть величины $h^{(n)}(a)$ (или $h_\text{к}^{(n)}(a)$) *юттнеровскими интегралами* полной и кинетической энергии (по аналогии с максвелловскими, бозевскими, фермиевскими и другими подобными интегралами в статистической механике). Действительно, поскольку по определению канонических средних (9) $\langle [h(\xi)]^n \rangle = h^{(n)}(a)/h^{(0)}(a)$, для калорических величин — внутренней энергии и её флуктуаций — имеем непосредственно из их определений

$$H(a) = E_0 \frac{h^{(1)}(a)}{h^{(0)}(a)}, \quad \langle (\Delta H)^2 \rangle = E_0^2 \frac{h^{(2)}(a)}{h^{(0)}(a)} - [H(a)]^2. \tag{59}$$

Для термических величин — давления и его флуктуаций — в силу термокалорических уравнений (39) и (42) с учётом условий (45) и (4) имеем

$$P(a, V) = \frac{E_0}{fV} \frac{h^{(1)}(a) - h^{(-1)}(a)}{h^{(0)}(a)} = E_0 \frac{1}{V} \frac{1}{a}, \tag{60}$$

$$\langle (\Delta P)^2 \rangle = \frac{1}{\beta} \Delta\Psi(a, V) = E_0^2 \frac{1}{a} \left(\frac{1}{fV}\right)^2 \frac{h^{(1)}(a) - h^{(-3)}(a)}{h^{(0)}(a)}. \tag{61}$$

## НТ/НР-представление (точные соотношения)

Рассмотрим более подробно статистическую сумму в представлении (55) и связанные с ней моменты (57), для которых величина $z(a)$ играет роль производящей функции в следующем смысле:

$$h^{(n)}(a) = (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial a^n} z(a), \quad h^{(n\pm1)}(a) = -\frac{\partial^\pm}{\partial a} h^{(n)}(a). \tag{62}$$

[1] Для величин $z_\text{к}(a)$ и $h_\text{к}(\xi)$ результаты будут вполне аналогичными с заменой $h^{(n)}(a)$ на $h_\text{к}^{(n)}(a)$.

[2] Заметим, что формальное наличие в правой части (58) множителя $a^{-n}$ («опасного» в пределе $a \to 0$) компенсируется умножением на $(E_0)^n$ при получении физических величин.

Здесь $n$ — любое целое число (положительное, отрицательное или нуль), причём $h^{(0)}(a) = z(a)$; оператор $(\partial^{\pm}/\partial a)$, входящий в рекуррентное соотношение (54), обозначает однократное дифференцирование (+) или интегрирование (−) по переменной $a$.

Сходимость интегралов (57) при $n \neq 0$ можно оценить так же, как и при $n = 0$; в частности, на нижнем пределе $\xi = 0$ ситуация не изменится, поскольку в этом пределе $[h(\xi)]^n \to 1$ при любом $n$. Однако на верхнем пределе $\xi \to \infty$ ситуация существенно зависит от знака $n$, поскольку $[h(\xi)]^n \approx \xi^{\pm|n|}$, так что $\zeta^{(n)}(\xi; a) = \int d\Gamma_\xi \xi^{\pm|n|} \sim \xi^{f \pm |n|}$. Соответственно, при $n > 0$ расходимость усиливается, а при $n < 0$ сходимость станет возможной при $|n| \geqslant f$.

Аналитические выражения для $h^{(n)}(a)$ можно получить, приняв в качестве исходного табличное выражение с $n = -1$ для интегрального преобразования Меллина [4] от функции $(1 + \xi^2)^{-1/2} \exp[-a(1 + \xi^2)^{1/2}]$. Кроме того, удобно ввести в определение (57) величин $h^{(n)}$ наряду с $a$ также аргумент $\nu \equiv (f-1)/2$, зависящий только от размерности системы $f$ и принимающий лишь дискретные (целые и полуцелые) неотрицательные значения. Имеем тогда

$$h^{(-1)}(\nu; a) = A(\nu) F(\nu; a), \quad F(\nu; a) \equiv a^{-\nu} K(\nu; a), \quad \frac{A(\nu)}{A_f (E_0/c)^f} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \Gamma(f) 2^{\nu}, \tag{63}$$

где $\Gamma(f)$ — гамма-функция от аргумента $f > 0$, $K(\nu; a)$ — функция Макдональда [10], чётная по аргументу $\nu$ и заданная своим интегральным представлением

$$K(\nu; a) = K(-\nu; a) = \int_0^\infty dt\, [\operatorname{ch} \nu t] \exp[-a \operatorname{ch} t], \quad K(\nu; a) \equiv K(t; \nu; a)|_0^\infty. \tag{64}$$

Функция $K(\nu; a)$ определена при всех действительных конечных значениях $\nu$ и неотрицательных $a > 0$. Во всей этой области $K(\nu; a)$ неотрицательна и имеет характерное «гиперболическое» поведение по переменной $a$ (монотонно убывает от бесконечно больших значений до нуля); все производные $K(\nu; a)$ нечётного порядка отрицательны, а чётного порядка положительны.

В точке $a = 0$ при любом значении $\nu \neq 0$ функция $K(\nu; a)$ неаналитична и имеет расходимость, поскольку $K(t; \nu; 0) = (1/\nu) \operatorname{sh} \nu t \to \infty$ на верхнем пределе при $t \to \infty$; при натуральных значениях $\nu = n = 0, 1, \ldots$ для $a \to 0$ имеем $K(0; a) \approx \ln(2/a)$, $K(n; a) \approx a^{-n}$ $(n \geqslant 1)$. Кроме того, $K(\nu; a)$ и $F(\nu; a)$ обладают следующими свойствами:

$$K(\nu + 1; a) = \frac{2\nu}{a} K(\nu; a) + K(\nu - 1; a), \quad \frac{\partial^+}{\partial a} F(\nu; a) = -a F(\nu + 1; a), \tag{65}$$

причём рекуррентное условие связывает функции $K(\nu; a)$ и $K(\nu \pm 1; a)$, а каждое дифференцирование по $a$ повышает значение аргумента $\nu$ функции $F$ на 1. Что касается действия на $F(\nu; a)$ интегрального оператора $\partial^-/\partial a$, то для его результата, к сожалению, отсутствует замкнутое аналитическое выражение.

Применяя к (63) рекуррентное дифференциальное соотношение из (62), получаем

$$h^{(0)}(\nu;a) = -\frac{\partial^+}{\partial a} h^{(-1)}(\nu;a) = A(\nu)[aF(\nu+1;a)], \tag{66}$$

$$\langle [h(\xi)]^{-1} \rangle = \frac{h^{(-1)}(\nu;a)}{h^{(0)}(\nu;a)} = \frac{1}{a}\,\frac{F(\nu;a)}{F(\nu+1;a)} = \frac{K(\nu;a)}{K(\nu+1;a)}. \tag{67}$$

Аналогично

$$h^{(1)}(\nu;a) = -\frac{\partial^+}{\partial a} h^{(0)}(\nu;a) = A(\nu)[a^2F(\nu+2;a) - F(\nu+1;a)], \tag{68}$$

так что безразмерная внутренняя энергия $H(a)/E_0$ из (59) имеет вид

$$\langle h(\xi) \rangle = \frac{h^{(1)}(\nu;a)}{h^{(0)}(\nu;a)} = \frac{K(\nu;a)}{K(\nu+1;a)} + \frac{f}{a}, \quad f = 2\nu+1. \tag{69}$$

Этот результат можно получить и иначе: не используя (62), но подставив (63) в объединённое уравнение состояния (60), связывающее $h^{(1)}(a)$ с $h^{(-1)}(a)$ и эквивалентное алгебраическому рекуррентному соотношению (65) для функций $K$ (с заменой $\nu \to \nu+1$).

Вновь используя то же условие (с заменой $\nu \to \nu+2$) и учитывая, что

$$h^{(2)}(\nu;a) = -\frac{\partial^+}{\partial a} h^{(1)}(\nu;a) = A(\nu)a[a^2F(\nu+3;a) - 3F(\nu+2;a)], \tag{70}$$

получаем для безразмерной дисперсии энергии $\langle (\Delta H)^2 \rangle / E_0^2 = \langle [\Delta h(\xi)]^2 \rangle$ из (59) (а согласно соотношению (37) и для теплоёмкости $C_{\mathrm{V}}(a)$)

$$\begin{aligned}\langle [\Delta h(\xi)]^2 \rangle \equiv \langle [h(\xi)]^2 \rangle - \langle h(\xi) \rangle^2 = \frac{1}{k_{\mathrm{B}} a^2} C_{\mathrm{V}}(a) = \frac{h^{(2)}(a)}{h^{(0)}(a)} - \left[\frac{h^{(1)}(a)}{h^{(0)}(a)}\right]^2 = \\ = 1 + \frac{f}{a}\left[\frac{1}{a} - \frac{K(\nu;a)}{K(\nu-1;a)}\right] - \left[\frac{K(\nu;a)}{K(\nu-1;a)}\right]^2, \quad f = 2\nu+1. \end{aligned} \tag{71}$$

Ясно, что тот же результат для $C_{\mathrm{V}}(a)/E_0 \equiv d\langle h(\xi) \rangle / dT$ можно получить, дифференцируя по $a$ выражение (69), с учётом того, что $d/dT = (d/da)(da/dT) = -(a^2/T_0)(d/da)$. Заметим, что в рамках теории возмущений по $1/a = T/T_0$ (см. (71)—(74)) разложение для $(1/T_0)(C_{\mathrm{V}}(a)/k_{\mathrm{B}})$ удобно получать, просто дифференцируя по $T$ разложение для $H(a)/E_0 = \langle h(\xi) \rangle$.

Заметим, что согласно формулам (60), (61), (67), (69) и (71) все важные термодинамические средние для релятивистского газа определяются отношениями юттнеровских интегралов (58). Последние, в свою очередь, точно выражаются через отношения функций Макдональда (64) от аргумента $a = T_0/T$ (обычно со значениями аргумента $\nu$, отличающимися на $\pm 1$), однако эти точные выражения лишены свойства наглядности. Для всех величин (60) и (61) достаточно знания $h^{(n)}(a)$ с $n = -1, 0, 1$, и лишь для величины (61) требуется юттнеровский интеграл с $n = -3$, для которого (как и вообще при $n < -1$) отсутствует явное аналитическое выражение.

В целях наглядности определим низшие поправки к термодинамическим средним величинам идеального газа, обусловленные отклонением неоднородной функции Гамильтона релятивистской частицы (1) от своих однородных предельных случаев (2) и (3). Как показано ниже, этой цели можно достичь двумя (разумеется, эквивалентными) путями в рамках теории возмущений по параметру $1/a \ll 1$:

1) использованием асимптотики входящих в точные выражения функций $K(\nu; a)$;
2) построением разложений юттнеровских интегралов $h^{(n)}(a)$ ($n$ любое) по степеням $h_{\text{к}}^{(m)}(a)$ только с положительными $m$ (обычно до $m = 2$).

## НТ/НР-представление (теория возмущений)

НТ/НР-разложения для всех найденных выше термодинамических величин возникают в пределе больших значений параметра $a = T_0/T \gg 1$, или, напротив, малых значений параметра $1/a = T/T_0 \ll 1$. Физически они соответствуют малости отношения $H_{\text{к}}(T)/E_0$; в частности, как видно из (53), $H_{\text{к}}^{\text{нр}}(T)/E_0 = (1/\kappa^{\text{нр}})(T/T_0)$, где $\kappa^{\text{нр}} = 2/f$ — величина порядка единицы.

Используем в этом пределе асимптотику функций Макдональда [10]

$$K(\nu; a) = B(a)\left\{1 + \sum_{l=1}^{m} \frac{(\nu, l)}{(2a)^l} + \mathcal{O}\big(a^{-(2m+1)}\big)\right\}, \quad B(a) = \left(\frac{\pi}{2a}\right)^{1/2} e^{-a}; \tag{72}$$

$$\begin{gathered} (\nu, l) \equiv \frac{1}{l!}\,\frac{\Gamma(\nu + l + 1/2)}{\Gamma(\nu - l + 1/2)} \quad (l \geqslant 0), \\ (\nu, l) = (2^{2l} l!)^{-1}(4\nu^2 - 1)\cdots[4\nu^2 - (2l-1)^2] \quad (l \geqslant 1), \end{gathered} \tag{73}$$

причём благодаря мультипликативной структуре коэффициентов $(\nu, l)$ нетрудно получить для них следующее рекуррентное соотношение:

$$\begin{gathered} (\nu, l) = (\nu, l-1)\frac{1}{l}\left[\nu^2 - \left(l - \frac{1}{2}\right)^2\right]; \\ (\nu, 0) = 1, \quad (\nu, 1) = \nu^2 - \frac{1}{4}, \quad (\nu, 2) = (\nu, 1)\left[\frac{\nu^2}{2} - \frac{9}{8}\right]. \end{gathered} \tag{74}$$

Разложение для отношения функций $K(\nu; a)$ с различными значениями аргумента $\nu$ (при фиксированном значении $a$) можно получить, применяя к (72) известные формулы обращения и умножения для степенных рядов:

$$\frac{K(\nu; a)}{K(\nu'; a)} = 1 + \sum_{l=1}^{m} (\nu, \nu', l) a^{-l} + \mathcal{O}\big(a^{-(m+1)}\big); \tag{75}$$

в частности,

$$\begin{gathered} (\nu, \nu', 1) = \frac{(\nu, 1) - (\nu', 1)}{2} = \frac{\nu^2 - (\nu')^2}{2}, \\ (\nu, \nu', 2) = \frac{[(\nu, 2) - (\nu', 2)] - 2(\nu', 1)(\nu, \nu', 1)}{4}, \end{gathered} \tag{76}$$

так что в наиболее употребительном случае $\nu' = \nu + 1$, когда $(\nu')^2 = \nu^2 + f$, имеем $(\nu, \nu+1, 1) = -f/2$, $(\nu, \nu+1, 2) = -[(f+2)/4](\nu, \nu+1, 1)$.

Для средней энергии $H(T) = E_0\langle h(\xi)\rangle = E_0 + H_{\text{к}}(T)$ согласно (64) получаем тогда

$$H_{\text{к}}(T) \approx H_{\text{к}}^{(0)}(T)\left[1 + \frac{f+2}{2f}\frac{T}{T_0}\right], \quad H_{\text{к}}^{(0)}(T) = \frac{f}{2}\frac{E_0}{a} = \frac{f}{2}k_{\text{B}}T. \tag{77}$$

Разумеется, $H_{\text{к}}^{(0)}(T)$ совпадает с первым из выражений (53) для средней кинетической энергии нерелятивистского газа Максвелла ($k = 2$, $\kappa_{\text{нр}} = 2/f$).

Заметим, что благодаря умножению $1/a$ на «большой» множитель $E_0$ величина $H_{\text{к}}^{(0)}(T)$ уже не является «малой», поэтому низшая действительно малая поправка в (73) появляется лишь во втором порядке по $1/a = T/T_0 \ll 1$. Эта поправка, в принципе, обусловлена учётом соответствующей поправки по $\xi$ к $H_{\text{к}}^{(0)}(\xi)$ в первом из выражений (26) для $H_{\text{к}}(\xi)$, однако, в отличие от последней, она *положительна*, что физически соответствует росту средней кинетической энергии частицы с ростом температуры.

Ясно, что процесс учёта таких поправок как в (26), так и в (73) может быть продолжен до любого желаемого порядка. Заметим, что строить последовательную теорию возмущений для $H_{\text{к}}(T)$ вида (73) наиболее естественно на основе *точного* выражения (64) с последующим разложением (71). Получить те же результаты, усредняя непосредственно разложение (26) для $h_{\text{к}}(\xi)$, несколько сложнее, поскольку в этом случае приходится раскладывать по $\xi$ также функцию распределения Юттнера и вычислять возникающие при этом максвелловские интегралы, т. е. моменты функции $h_{\text{к}}^{\text{нр}}(\xi)$ (выше первого порядка) для функции распределения Максвелла.

Дифференцируя по $T$ выражение (77), находим для теплоёмкости $C_{\text{V}}(T)$, что

$$C_{\text{V}}(T) = C_{\text{V}}^{(0)}\left\{1 + \frac{f+2}{f}\frac{T}{T_0}\right\}, \quad C_{\text{V}}^{(0)} = \frac{dH_{\text{к}}^{(0)}(T)}{dT} = \frac{f}{2}k_{\text{B}}. \tag{78}$$

Разумеется, тот же результат (но несколько более громоздко) получается применением разложения (75) к правой части точного выражения (71). Естественно, $C_{\text{V}}^{(0)}$ совпадает со вторым из выражений (53) для теплоёмкости нерелятивистского газа Максвелла с $k = 2$ и не зависит от температуры.

Низшая по $T/T_0$ поправка к $C_{\text{V}}(T)$ имеет тот же знак, что и соответствующая поправка к $H_{\text{к}}(T)$ в (73), но с вдвое большим коэффициентом. Благодаря этой поправке теплоёмкость газа приобретает температурную зависимость (в низшем приближении линейную), причём как $C_{\text{V}}(T)$, так и $dC_{\text{V}}(T)/dT$ — положительные величины, что обеспечивает выполнение условий термодинамической устойчивости системы.

Рассмотрим теперь низшую поправку к термокалорическому уравнению состояния — зависимости среднего давления $P(T)$ от плотности средней кинетической энергии $\mathcal{H}_{\text{к}}(T)$. Как показано выше, для идеального газа с произвольным видом зависимости $\mathcal{H}_{\text{к}}(T)$ имеет место *точное* свойство (45): давление $P$ строго пропорционально температуре $T$ при всех $T$. Это верно и для релятивистского газа, для которого $\mathcal{H}_\text{к}(T)$ даётся выражением (64) (или приближённо (73)).

Поскольку при достаточно низких температурах $\mathcal{H}_\text{к}(T) \approx \mathcal{H}_\text{к}^\text{нр}(T) \sim T$, зависимость $P(\mathcal{H}_\text{к})$ в этой области является линейной (в соответствии с первой из формул (42), отвечающей однородному случаю). Однако по мере повышения температуры $\mathcal{H}_\text{к}(T)$ в соответствии с (77) растёт *быстрее* $T$, так что линейная зависимость между $P(T)$ и $\mathcal{H}_\text{к}(T)$ должна нарушаться. Из сказанного выше ясно, что поправка к этой зависимости будет *отрицательной* по знаку.

Формально эту поправку можно получить, используя термокалорическое уравнение состояния в форме (43) с учётом первой из формул (45), что даёт (для простоты везде опускаем аргумент $\xi$ у $h_\text{к}(\xi)$)

$$P = \frac{\kappa_\text{нр}}{V} E_0 \langle h_\text{к}\rangle \left\{1 - \frac{\langle h_\text{к}^2\rangle}{2\langle h_\text{к}\rangle}\right\}, \quad \langle h_\text{к}^2\rangle = \langle h_\text{к}\rangle^2 + \langle(\Delta h_\text{к})^2\rangle, \ \ \langle(\Delta h_\text{к})^2\rangle = \frac{C_\text{V}}{k_\text{B}}\left(\frac{T}{T_0}\right)^2.$$

Учтём, что $T/T_0 = \kappa_\text{нр}\langle h_\text{к}^{(0)}\rangle$, так что выражения (73) и (74) можно представить в виде

$$\langle h_\text{к}\rangle = \langle h_\text{к}^{(0)}\rangle \left[1 + (1+\kappa_\text{нр})\frac{\langle h_\text{к}^{(0)}\rangle}{2}\right], \quad \frac{C_\text{V}}{k_\text{B}} = \frac{1}{\kappa_\text{нр}}[1 + (1+\kappa_\text{нр})\langle h_\text{к}^{(0)}\rangle]. \tag{79}$$

Тогда с учётом поправок не выше линейных по $\langle h_\text{к}^{(0)}\rangle$ находим, что $\langle(\Delta h_\text{к})^2\rangle/\langle h_\text{к}\rangle = \kappa_\text{нр}\langle h_\text{к}\rangle$, так что окончательно имеем

$$P = \frac{\kappa_\text{нр}}{V} E_0 \langle h_\text{к}\rangle \left[1 - (1+\kappa_\text{нр})\frac{\langle h_\text{к}\rangle}{2}\right], \quad P(H_\text{к}) = \kappa_\text{нр}\mathcal{H}_\text{к}\left\{1 - \frac{f+2}{2f}\frac{H_\text{к}}{E_0}\right\}, \tag{80}$$

причём поправка низшего порядка по $H_\text{к}/E_0$ к давлению в (78) имеет коэффициент, равный по величине, но противоположный по знаку коэффициенту в аналогичной поправке по $T/T_0$ к внутренней энергии в (75).

В завершение этого подраздела в том же низшем приближении по $T/T_0$, что и в (78), вычислим флуктуации давления $\langle(\Delta P)^2\rangle$. Используя общие формулы (45) и (4), а также выражение (44) для $\Delta\Psi(\beta, V)$ и второе из разложений (45), получаем

$$\langle(\Delta P)^2\rangle = (k_\text{B}T)\frac{\kappa_\text{нр}}{V}\mathcal{H}_\text{к}\left\{1 - \frac{3}{2}\,\frac{f+2}{2f}\,\frac{H_\text{к}}{E_0}\right\}, \tag{81}$$

откуда видно, что поправка низшего порядка к флуктуациям давления имеет коэффициент того же (отрицательного) знака, что и аналогичная поправка к давлению, но при этом втрое превосходит её по величине.

## ВТ/УР-представление. Теория возмущений

К сожалению, нам не известны точные выражения для статистической суммы в представлении (56) и соответствующих ему юттнеровских интегралов (58), так что для них нельзя построить асимптотику при $a \to 0$ по аналогии со случаем

$a \to \infty$ для НТ/НР-представления. Поэтому из двух возможных способов получения приближённых выражений для $h^{(n)}(a)$ ($n$ — любое целое число, включая нуль) остаётся построение разложений по степеням $h_{\text{к}}^{(m)}(a)$ с положительными $m$.

Эти разложения для всех термодинамических величин возникают в пределе больших значений параметра $1/a = T/T_0 \gg 1$, или, напротив, малых значений параметра $a = T_0/T \ll 1$ (включая значение $a = 0$ при $E_0 = 0$). Физически они соответствуют малости отношения $E_0/H_{\text{к}}(T)$, т. е. высоким температурам при фиксированной энергии покоя $E_0$, или, наоборот, малым значениям $E_0$ при фиксированной температуре $T$. Как видно из (53), $E_0/H_{\text{к}}^{\text{ур}}(T) = \kappa^{\text{ур}}(T_0/T) = a\kappa^{\text{ур}}$, где $\kappa^{\text{ур}} = 1/f$ — множитель порядка единицы.

Для получения искомых разложений используем биномиальный степенной ряд для $\nu \geqslant 0$:

$$\left[1 - \left(\frac{a}{\eta}\right)^2\right]^{\nu-1/2} = \sum_{m=0}^{\infty} [\nu, m] a^{2m} \eta^{-2m},$$
$$[\nu, m] = (-1)^m (2^m m!)^{-1} \prod_{l=0}^{m-1} \{2\nu - (2l-1)\}, \tag{82}$$

коэффициенты которого удовлетворяют рекуррентному соотношению $[\nu, m+1] = [\nu, m](m - \nu + 1/2)(m+1)^{-1}$, причём $[\nu, 0] \equiv 1$, $[\nu, 1] = 1/2 - \nu$, $[\nu, 2] = [\nu, 1](3 - 2\nu)/4 = (1/8)(2\nu - 1)(2\nu - 3)$; в дальнейшем эти коэффициенты удобнее обозначать $[f, m]$, перейдя в них от переменной $\nu \equiv (1/2)(f-1)$ ($\nu \geqslant 0$) к переменной $f = 2\nu + 1$ ($f \geqslant 1$).

Подставим разложение (82) в подынтегральное выражение юттнеровского интеграла (56) и введём обозначение для комбинированного показателя степени $k(m)$:

$$k(m) \equiv 2\nu + n - 2m + 1 = k(0) - 2m,$$
$$k(0) = f + n \quad (f,\ n,\ m,\ k \text{ — всегда целые числа}), \tag{83}$$

который при заданных значениях числа степеней свободы частицы $f = 1, 2, 3$ и порядка юттнеровского интеграла $n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ зависит только от индекса $m \geqslant 0$. Тогда для $h^{(n)}(f; a)$ получаем бесконечную сумму интегралов следующего вида:

$$h^{(n)}(f; a) = A_f (p_T)^f a^{-n} \sum_{m=0}^{\infty} [f, m] a^{2m} \Gamma[k(m); a], \quad \Gamma[k(m); a] \equiv \int_a^{\infty} d\eta e^{-\eta} \eta^{k(m)-1}. \tag{84}$$

Величина $\Gamma[k(m); a]$ представляет собой *неполную гамма-функцию* (родственную *интегральной показательной функции*, см. [10]), разложение которой в степенной ряд по $a$ (при фиксированном значении $k(m)$) существенно зависит от *знака* $k(m)$. Согласно определению (83) величина $k(m)$ линейно убывает с ростом $m$ и меняет знак при критическом значении $m = m_0$, где

$$m_0 = \frac{k(0)}{2} \quad (k(0) > 0 \text{ чётное}),$$
$$m_0 = \frac{k(0)+1}{2} \quad (k(0) > 0 \text{ нечётное}), \quad m_0 = 0 \quad (k(0) \leqslant 0). \quad (85)$$

Тогда бесконечную сумму (84) целесообразно представить в следующем виде:

$$h^{(n)}(f;a) = A_f (p_T)^f a^{-n} \left\{ \sum_{m=0}^{m_0-1} [f,m] a^{2m} \Gamma[k(m) > 0; a] + \right.$$
$$\left. + \sum_{m=m_0}^{\infty} [f,m] a^{2m} \Gamma[k(m) \leqslant 0; a] \right\}, \quad (86)$$

причём искомые степенные разложения по $a$ для $\Gamma[k(m); a]$ при $k(m) > 0$ и $k(m) \leqslant 0$ качественно различны и должны быть рассмотрены по отдельности (см. приложение).

Окончательно выражение (86) для $h^{(n)}(f;a)$ с учётом только низших поправок по степеням $a$ можно записать в следующем виде, где учтено, что $p_T = T(k_\text{B}/c)$, $a = T_0/T = (E_0/k_\text{B}T)$:

$$h^{(n)}(f;a) = A_f \left(\frac{k_\text{B}}{c}\right)^f T^f a^{-n} \{\Sigma(f,n;a) + S(f,n;0) a^{f+n}\}. \quad (87)$$

Ясно, однако, что если значения параметров $f$ и $n$, сумма которых определяет $k(0)$, таковы, что изначально $k(0) < 0$ и $m_0 = 0$, то первое слагаемое в правой части (86) вообще отсутствует, а во втором слагаемом возникают теперь уже ничем не компенсированные полюсные расходимости вида $a^{-|k(0)|} = (T/T_0)^{|f+n|}$, и соответствующие юттнеровские интегралы $h^{(n)}(f;a)$ существуют только при конечных значениях $a$ (и, соответственно, $T_0$).

Используя этот факт, качественно рассмотрим вопрос термодинамической устойчивости «газа Вина» — идеального газа безмассовых частиц ($E_0 = k_\text{B}T_0 = 0$, $a = 0$) — с точки зрения её зависимости от размерности $f$. Для обеспечения подобной устойчивости необходимо, чтобы в пределе $a = 0$ существовали и имели конечное значение юттнеровские интегралы $h^{(n)}(f;a)$, определяющие основные термодинамические величины и их флуктуации (см. раздел 4).

Напомним, что для статистической суммы $n = 0$, для средней энергии $n = 1$, а для её флуктуации (теплоёмкости) $n = 2$; для среднего давления необходимы значения $n = 1$ и $n = -1$, а для его флуктуаций (сжимаемости) — $n = 1$ и $n = -3$. Как показано выше, имеет место своеобразная зависимость структуры ряда теории возмущений от размерности $f$ (числа пространственных степеней свободы частицы), а также от порядка $n$ момента (среднего значения $n$-й степени энергии). Поэтому в ВТ/УР-представлении (в отличие от НТ/НР-представления вида (75)) для коэффициентов разложений вида (84) нельзя выписать общих формул и следует действовать методом «перебора», последовательно рассматривая различные сочетания значений $f$ и $n$.

Заметим предварительно, что все термодинамические параметры и их флуктуации определяются безразмерной величиной $\chi^{(n)}(f;a) = h^{(n)}(f;a)/h^{(0)}(f;a)$. Действительно, имеем для средней энергии, теплоёмкости, давления и сжимаемости

$$\begin{gathered}
H(f;a) = E_0\chi^{(1)}(f;a), \quad C_{\mathrm{V}}(f;a) = E_0^2\bigl\{\chi^{(2)}(f;a) - \bigl[\chi^{(1)}(f;a)\bigr]^2\bigr\},\\
P(f;a) = \frac{E_0}{fV}\bigl[\chi^{(1)}(f;a) - \chi^{(-1)}(f;a)\bigr] = \frac{k_{\mathrm{B}}T}{V},\\
\Delta\Psi(f;a) = \left(\frac{E_0}{fV}\right)^2\frac{1}{a}\bigl[\chi^{(1)}(f;a) - \chi^{(-3)}(f;a)\bigr],\\
\chi^{(n)}(f;a) = a^{-n}\frac{\Sigma(f,n;a) + S(f,n)a^{f+n}}{\Sigma(f,0;a) + S(f,0)a^f}.
\end{gathered} \tag{88}$$

Величину $\chi^{(n)}(f;a)$ всюду далее следует аппроксимировать в духе теории возмущений с принятой точностью по $a$, причём

$$\begin{aligned}
&\chi^{(n)}(f;a) - \chi^{n'}(f;a) =\\
&\qquad = a^{-n}\frac{[\Sigma(f,n;a) + S(f,n)a^{f+n}] - a^{n-n'}[\Sigma(f,n';a) + S(f,n')a^{f+n'}]}{\Sigma(f,0;a) + S(f,0)a^f},
\end{aligned}$$

так что для случаев $n = 1$ при $n' = -1$ и $n' = -3$ вклад второго слагаемого в числителе имеет дополнительный малый множитель $a^2$ и $a^4$. Заметим, что для величин $H$ и $C_{\mathrm{V}}$ эта точность в используемом прямом методе моментов может быть выше, чем при обычно используемом методе, когда величины $H$ и $C_{\mathrm{V}}$ выражаются через производные по $a$ от $\ln h^{(0)}(f;a)$, и следовательно, их точность ограничивается точностью вычисления статистической суммы $h^{(0)}(f;a)$.

Рассмотрим теперь последовательно ВТ/УР-разложения для термодинамических величин идеального газа частиц с различным числом $f$ степеней свободы, выписав предварительно определяющие их согласно (88) безразмерные величины $\tilde{h}^{(n)}(f;a) \equiv h^{(n)}(f;a)/A_f(k_{\mathrm{B}}/c)^fT^f$:

$$\boldsymbol{n=0,} \qquad \tilde{h}^{(0)}(f;a) = \begin{cases} 1 + S(1,0)a, & f = 1,\\ 1 + S(2,0)a^2, & f = 2,\\ 2 - a^2/2 + S(3,0)a^3, & f = 3; \end{cases}$$

$$\boldsymbol{n=1,} \qquad \tilde{h}^{(1)}(f;a) = \begin{cases} 1 + S(1,1)a^2, & f = 1,\\ 2 + S(2,1)a^3, & f = 2,\\ 6 - a^2/2 + S(3,1)a^4, & f = 3; \end{cases}$$

$$\boldsymbol{n=2,} \qquad \tilde{h}^{(2)}(f;a) = \begin{cases} 2 + a^2/2 + S(1,2)a^3, & f = 1,\\ 6 + S(2,2)a^4, & f = 2,\\ 24 - a^2 + [3,2] + S(3,2)a^5, & f = 3; \end{cases}$$

$$\boldsymbol{n=-1,}\qquad \tilde{h}^{(-1)}(f;a)=\begin{cases} S(1,-1), & f=1,\\ 1+S(2,-1)a, & f=2,\\ 1+S(3,-1)a^2, & f=3;\end{cases}$$

$$\boldsymbol{n=-3,}\qquad \tilde{h}^{(-3)}(f;a)=S(f,-3)a^f.$$

Выпишем величины (88) с учётом низших поправочных членов разложения по степеням $a$.

**Средняя энергия $\boldsymbol{H(f,a)}$.** $H_{\text{к}}^{\text{ур}}(T)=H(f;0)=fk_{\text{B}}T$.

$$H(f,a)=H_{\text{к}}^{\text{ур}}(T)\begin{cases} 1-S(1,0)a+[S(1,0)+S(1,-1)]a^2, & f=1,\\ 1-S(2,0)a^2, & f=2,\\ 1+a^2/6, & f=3.\end{cases} \tag{89}$$

**Теплоёмкость $\boldsymbol{C_{\text{V}}(f,a)}$.** $C_{\text{V}}^{\text{ур}}=C_{\text{V}}(f;0)=fk_{\text{B}}$.

$$C_{\text{V}}(f,a)=C_V^{\text{ур}}\begin{cases} 1-[3S(1,0)a+2S(1,1)]a^2, & f=1,\\ 1+S(2,0)a^2, & f=2,\\ 1-a^2/6, & f=3.\end{cases} \tag{90}$$

Заметим, что благодаря умножению $a^{-1}$ на «малый» множитель $E_0$ величина $H^{\text{ур}}(T)=H(f;0)$ уже не является «большой» и совпадает с первым из выражений (53) для средней (кинетической) энергии УР-газа Вина ($k=1$, $\kappa^{\text{ур}}=1/f$). Поправка второго порядка малости по $a=T_0/T\ll 1$ в форме (89) обусловлена учётом соответствующей поправки по $\xi$ к $1/h(\xi)$ во втором из выражений (26); так же как и в случае НТ/НР-разложения, эта поправка в (89) положительна, что физически соответствует росту средней энергии с увеличением энергии покоя $E_0$.

Аналогично низшая поправка по $a$ к теплоёмкости в (90) при $f=2$ и $f=3$ также имеет второй порядок малости, отличаясь от поправки к средней энергии лишь знаком[1]. Естественно, $C_{\text{V}}^{\text{ур}}$ совпадает со вторым из выражений (53) для теплоёмкости УР-газа Вина с $k=1$ и не зависит от температуры $T$. Заметим, что как $C_{\text{V}}(T)$, так и $\mathrm{d}C_{\text{V}}(T)/\mathrm{d}T$ положительны.

**Давление/температура $\boldsymbol{P(f;a)=k_{\text{B}}}T/V$ при всех $\boldsymbol{f}$ и $\boldsymbol{a}$.**

**Давление/кинетическая энергия $\boldsymbol{P(f;H_{\text{к}})}$.** $P^{\text{ур}}(f;H_{\text{к}}^{\text{ур}})=(\kappa^{\text{ур}}/V)H_{\text{к}}^{\text{ур}}$.

$$P(f;H_{\text{к}})=P^{\text{ур}}(f;H_{\text{к}}^{\text{ур}})\begin{cases} 1-S(1,-1)(E_0/H_{\text{к}}^{\text{ур}}), & f=1,\\ 1-2(E_0/H_{\text{к}}^{\text{ур}}), & f=2,\\ 1-(3/2)(E_0/H_{\text{к}}^{\text{ур}}), & f=3.\end{cases} \tag{91}$$

**Сжимаемость $\boldsymbol{\Delta\Psi(f;a)}$.**

$$\Delta\Psi(f,a)=\Delta\Psi^{\text{ур}}[1-S(f,-3)a^f]. \tag{92}$$

[1]При $f=1$ эта тенденция также имеет место ($S(1,0)<0$), но связь между коэффициентами несколько сложнее, так как линейная по $a$ поправка в $C_{\text{V}}$ отсутствует; легко убедиться, что это свойство всегда имеет место независимо от конкретного значения коэффициента линейного по $a$ слагаемого в средней энергии.

К термокалорическому уравнению состояния (91) в полной мере относится аргументация, предшествующая получению аналогичного уравнения (80) в НТ/НР-пределе. Формально поправку к первому из уравнений (39) для $\kappa^{\text{ур}} = 1/f$ можно получить, используя второе уравнение (39), с учётом второй из формул (45) и низшего приближения $\tilde{h}^{(-1)}(f;a) \approx a$. Принимая во внимание, что $a = T_0/T = (1/\kappa^{\text{ур}})(E_0/H_{\text{к}}^{\text{ур}}) = f(E_0/H_{\text{к}}^{\text{ур}})$, приходим к (91). Наконец, поправки к предельному УР-значению сжимаемости $\Delta\Psi^{\text{ур}} = \Delta\Psi(f;0) = (\kappa^{\text{ур}}/V)P^{\text{ур}}$ при $a = 0$ начинаются с $a^f$ и, так же как и для давления, имеют отрицательный знак.

Таким образом, очевидно, что ВТ/УР-поправки не нарушают термодинамической устойчивости системы, поскольку эти поправки не могут изменить знак флуктуаций средней энергии (90) и среднего давления (92).

## 6. Заключение

Задача о нахождении статистической функции распределения, а также термодинамических величин классического газа с учётом установленной Эйнштейном и Лоренцем в 1905 году релятивистской связи между энергией и импульсом частицы была впервые поставлена Планком и частично решена Юттнером [19] в 1911 году. В этой работе дан общий вид функции распределения Гиббса для такого газа (её вид приведён, например, в [9, § 38, задача 2], а также в [7, § 8, задача 38]), а также проведён анализ его статистической суммы, средней энергии и теплоёмкости при низких температурах. Для этих величин учтён вклад низших поправок по динамическому параметру $cp/E_0 \ll 1$ (соответственно по термодинамическому параметру $T/T_0 \ll 1$) для «обычного» газа, статистическая механика которого была построена Максвеллом ещё в 1859 году.

Значительно позднее (в 1928 году) Юттнер [20] выписал общие выражения для термодинамических величин квантового релятивистского идеального газа (как для статистики Бозе—Эйнштейна, так и Ферми—Дирака), которые в 1935 году проанализировал Глазер [18] для газа в вырожденном режиме в областях малых и больших значений параметра $cp/E_0$.

Интересно, что термодинамика газа для частиц, вообще не имеющих массы покоя (например, фотонов с $E_0 = 0$, $T_0 = 0$), для которых статистическая механика Максвелла очевидным образом непригодна даже в качестве исходного приближения, была фактически построена на 15 лет раньше, чем Юттнером была решена задача Планка. Соответствующая теория носила в то время название термодинамики равновесного теплового излучения. Её статистические основы были заложены Вином в 1896 году, дополнены Рэлеем в 1898 году и завершены Планком в 1900 году.

При этом как Вин, так и Рэлей опирались (правда, каждый из них на различные аспекты) одной из наиболее успешных в то время физических теорий, а именно статистической механики газов Максвелла, которая, в свою очередь, является лишь частным случаем статистической механики Гиббса, построенной лишь почти полвека спустя, в 1902 году. Следуя Максвеллу, Вин ввёл экспоненциальную функцию распределения для интенсивности излучения по длинам волн (при данной температуре), по существу, опираясь на корпускулярную теорию излучения, в отличие от Рэлея, использовавшего для излучения волновую теорию. Планку удалось объединить (в то время, правда, несколько формально) оба подхода.

Полную физическую интерпретацию теория Вина—Рэлея—Планка получила в 1905 году после введения Эйнштейном понятия квантов излучения (которые стали называться «фотонами» только в 1929 году по предложению Льюиса). В частности, функция распределения Вина, содержащая множитель $\exp(-\alpha/\lambda T)$, где $\alpha = hc/k_{\mathrm{B}}$, оказалась, по существу, функцией распределения Гиббса $\exp(-E/k_{\mathrm{B}}T)$ для частиц с линейной по импульсу $p$ зависимостью энергии $E = cp$, поскольку для фотонов импульс связан с длиной волны соотношением Эйнштейна $p = h/\lambda$.

Дальнейшее развитие физики привело к необходимости изучения статистической механики газов частиц с $E_0 \neq 0$, $T_0 \neq 0$ в области высоких температур (при $T_0/T \ll 1$). Формально начало этому положила впоследствии отвергнутая гипотеза де Бройля о «тяжёлом свете», инициировавшая работу [9]. Заметим в заключение, что наиболее полное изложение статистической механики классического релятивистского идеального газа как в нерелятивистском, так и в ультрарелятивистском пределах дано (для случая $f = 3$) в [12, § 8], а для квантового случая подробное рассмотрение дано в [5, гл. 5]; ультрарелятивистский вырожденный электронный газ рассмотрен также в [2, § 61].

# 7. Приложение

## 1. Случай $k(m) > 0$

При $k(m) > 0$ $(0 \leqslant m < m_0)$ в разложение для $\Gamma[k(m) > 0; a]$ входят только *положительные* степени $a$:

$$\Gamma[k(m) > 0; a] = \Gamma[k(m) > 0; 0] - \int_0^a d\eta e^{-\eta}\eta^{k(m)-1} =$$

$$= \Gamma[k(m) > 0] - \sum_{l=0}^{\infty}(-1)^l (l!)^{-1} a^{k(m)+l}(k(m)+l)^{-1}, \quad (93)$$

где $\Gamma[k(m) > 0; 0]$ — обычная (полная) гамма-функция $\Gamma[k(m)]$ (см. [20]), для целочисленных значений $k(m) = 1, 2, \ldots$ принимающая особенно простой вид $[k(m) - 1]!$.

Для получения разложения (93) достаточно разложить входящую в подынтегральное выражение в определении (84) экспоненту $e^{-\eta}$ в ряд Тейлора и затем проинтегрировать по $\eta$ полученный сходящийся ряд. При этом никаких особенностей в (93) в пределе $a \to 0$ не возникает, поскольку каждое из слагаемых в правой части (93) могло бы иметь их лишь при нарушении условия $k(m) > 0$. Действительно, функция $\Gamma[k(m)]$ при этом вообще не была бы определена, а некоторые знаменатели $k(m) + l$ могли бы обращаться в нуль.

Учитывая, что $a^{2m}a^{k(m)} = a^{k(0)}$, нетрудно убедиться, что первое слагаемое в фигурных скобках в правой части (86) в общем случае имеет две группы членов разложения по $a$: одну по *чётным* степеням $a$ (начиная с $a^0, a^2, \dots$), другую по *всем* степеням $a$ (начиная с $a^{k(0)}$ и далее $a^{k(0)+l}$, $l = 1, 2, \dots$). Очевидно, вклад наинизшего порядка, «выживающий» в пределе $a = 0$, имеет вид $[f, 0]\Gamma[k(0) \geqslant 1]a^0 = [k(0) - 1]! = (f + n - 1)!$ (если, конечно, значения $f$ и $n$ удовлетворяют требуемому условию $k(0) \geqslant 1$).

В том случае если $k(0) = f + n$ имеет *минимально* возможное (для рассматриваемого случая) значение $k(0) = 1$, низшую поправку (линейную по $a$) даст первое слагаемое второй группы $a^{k(0)}$, и лишь затем следует учитывать второе слагаемое первой группы, квадратичное по $a$. Если же $k(0) = 2$, то указанные слагаемые дадут вклады одного порядка по $a$, и лишь при $k(0) = 3$ вклады второй группы (начиная с $a^3$) пойдут после первых двух слагаемых первой группы.

## 2. Случай $k(m) \leqslant 0$

При $k(m) \leqslant 0$ (при $m \geqslant m_0 \geqslant 0$) в разложение для $\Gamma[k(m) \leqslant 0; a]$, в отличие от случая $k(m) > 0$, входят только *отрицательные* степени $a$, что приводит к появлению полюсных особенностей всех порядков от 1 до $|k(m)|$, а также логарифмической особенности по $a$ (единственной, которая «выживает» даже в предельном случае $k(m_0) = 0$). Однако, как будет видно, эти особенности не проявляются в конечном результате для $h^{(n)}(f; a)$, поскольку они полностью «гасятся» множителем $a^{2m}$ в каждом порядке при $m \geqslant m_0$.

Для получения разложения $\Gamma[k(m) \leqslant 0; a]$ по степеням $a$ заметим, что для определяющего эту величину интеграла в (84) условие сходимости на верхнем пределе при любом значении $k(m)$ (независимо от знака) обеспечивается множителем $e^{-\eta}$. Однако на нижнем пределе условие сходимости нарушается уже при максимально возможном в рассматриваемом случае значении $k(m) = 0$ (оно даёт логарифмическую особенность), и тем более — с уменьшением $k(m)$ (увеличением $|k(m)|$), приводящим к полюсным особенностям максимального порядка $|k(m)|$.

Поэтому целесообразно использовать для $\Gamma[k(m) \leqslant 0; a]$ рекуррентное соотношение, позволяющее повысить на единицу значение $k(m)$ (и, соответственно, понизить $|k(m)|$), выделив тем самым полюсные особенности. Такое соотношение нетрудно получить путём интегрирования по частям исходного интеграла в (84), что даёт

$$\Gamma[k(m) \leqslant 0; a] = e^{-a}a^{-|k(m)|} - \frac{1}{|k(m)|}\Gamma[k(m) + 1 \leqslant 0; a] \tag{94}$$

и позволяет выразить $\Gamma[k(m) \leqslant 0; a]$ с произвольным значением $k(m) \leqslant 0$ через $\Gamma[k(m) = 0; a]$:

$$\Gamma[k(m) \leqslant 0; a] = e^{-a} \sum_{l=0}^{|k(m)|-1} (-1)^{l+1}[|k(m)| \cdots (|k(m)| - l)]^{-1} a^{-|k(m)|+l} + \\ + (-1)^{|k(m)|}(|k(m)|!)^{-1}\Gamma[k(m) = 0; a]. \quad (95)$$

Входящая в правую часть (95) *конечная* сумма отлична от нуля лишь при условии $k(m) < 0$, в противном случае (при $k(m) = 0$) (95) превращается в тождество; именно эта сумма, как видно, и содержит все те полюсные особенности, о которых говорилось выше.

Предельная для всех значений $k(m) \leqslant 0$ величина $\Gamma[k(m) = 0; a]$ совпадает (с точностью до знака) с интегральной показательной функцией $\mathrm{Ei}(-a)$ (см. [10]):

$$\Gamma[k(m) = 0; a] = \int_a^\infty d\eta\, e^{-\eta}\eta^{-1} \equiv -\mathrm{Ei}(-a), \quad \mathrm{Ei}(-a) = C + \ln a + \sum_{l=0}^{\infty} (l!\, l)^{-1} a^l. \quad (96)$$

Здесь $C \approx 0{,}577$ — постоянная Эйлера, а степенной ряд в правой части (96) сходится при всех конечных вещественных значениях $a$, однако слагаемое $\ln a$ имеет очевидную особенность при предельном значении $a = 0$, соответствующем случаю безмассовых частиц с $E_0 = 0$.

Покажем, что все указанные особенности величины $\Gamma[k(m) \leqslant 0; a]$, как и ожидалось, исчезают при подстановке её во второе слагаемое в фигурных скобках в правой части (86) и при умножении её в каждом порядке бесконечной суммы по $m \geqslant m_0 > 0$ на множитель $a^{2m}$. Действительно, в отношении логарифмической особенности (и тем более постоянного слагаемого), входящих в (96), это вполне очевидно; что же касается полюсных особенностей, входящих в конечную сумму в (95), то при $k(m) \equiv k(0) - 2m \leqslant 0$ имеем $|k(m)| = -k(m) = 2m - k(0)$ и $-|k(m)| = -2m + k(0)$, так что $a^{2m} a^{-|k(m)|} = a^{k(0)}$.

Тем самым случаи 2 и 1 (при всей их внешней несхожести) оказываются в весьма полном соответствии друг с другом: в случае 2 также присутствуют две группы членов разложения по степеням $a$: только по чётным степеням $a$ и по *всем* степеням $a$ (начиная с $a^{k(0)}$ и далее $a^{k(0)+l}$, $l = 1, 2, \ldots$). Правда, первая группа членов в случае 2 начинается не с $a^0$ (с коэффициентом $\Gamma[k(0); 0]$), как в случае 1, а со степени $a^{2m_0}$ (с коэффициентом $C$), где согласно (85) значение $m_0$, вообще говоря, отлично от нуля; в противном случае именно с него и начинается всё разложение (86) и для случая 1 вообще нет места.

Если всё же случай 1 реализуется, то первую группу членов можно записать в следующем виде:

$$\Sigma(f, n; a) \equiv \sum_{m=0}^{m_0-1} [f, m][k(m) - 1]!\, a^{2m} = \\ = [(f + n) - 1]! + [f, 1][(f + n - 2) - 1]!\, a^2 + \mathcal{O}(a^4), \quad (97)$$

где учтено, что $[f,0] \equiv 1$, $k(0) = f + n$ $(\geqslant 1)$ и $[f,1] = -\frac{1}{2}(f-2)$, $k(1) = k(0) - 2$; число слагаемых в (97) зависит от значения $m_0$, которое согласно (83) и (85) зависит от значений $f$ и $n$.

Что касается вторых групп членов в случаях 1 и 2, то их следует объединить, записав результирующий вклад в правую часть (86) в виде $a^{k(0)} S(f;a)$. Здесь $S(f,n;a) = S_<(f,n;a) + S_\geqslant(f,n;a)$ — разложение по $a$, включающее все степени (начиная с $a^0$), а величины $S_<(a)$ (с $m < m_0$) и $S_\geqslant(a)$ (с $m \geqslant m_0$) имеют вид двойных сумм:

$$S_<(f,n;a) = -\sum_{m=0}^{m_0-1} [f,m] \sum_{l=0}^{\infty} (-1)^l (l!)^{-1} a^l (k(m)+l)^{-1},$$

$$S_\geqslant(f,n;a) = e^{-a} \sum_{m=m_0}^{\infty} [f,m] \sum_{l=0}^{|k(m)|-1} (-1)^{l+1} [|k(m)| \cdots (|k(m)| - l)]^{-1} a^l.$$

При $a = 0$ во «внутренних» суммах по индексу $l$ остаётся лишь первое слагаемое с $l = 0$. Мы не исследуем здесь подробно бесконечную сумму (92), однако с учётом определений (82) и (83) для $[f,m]$ и $k(m)$ видно, что общий член этой знакопеременной суммы имеет вид $(-1)^m (2^m m!)^{-1}$, так что даже в наихудшем (в смысле сходимости) случае $m_0 = 0$ ряд (92) сходится и $S(0)$ имеет конечное значение. Тогда

$$S(f,n;0) = -\sum_{m=0}^{m_0-1} s(f,m) + \sum_{m=m_0}^{\infty} s(f,m), \quad s(f,m) \equiv [f,m](k(m))^{-1}, \tag{98}$$

где величина $S(f,n;0) \equiv S(f,n)$, подобно $\Sigma(f,n;a)$, зависит от $n$ посредством величины $m_0$, определяемой соотношениями (83) и (85).

## Литература


[1] Боголюбов Н. Н. Квазисредние в задачах статистической механики // Н. Н. Боголюбов. Избранные труды. Т. 3. — Киев: Наукова думка, 1971.

[2] Владимиров В. С. Обобщённые функции в математической физике. — М.: Наука, 1976.

[3] Гиббс Дж. В. Основные принципы статистической механики. — М.: Наука, 1982.

[4] Диткин В. А., Прудников А. П. Интегральные преобразования и операционное исчисление. — М.: Физматлит, 1961.

[5] Задачи по термодинамике и статистической физике / Под ред. П. Ландсберга. — М.: Мир, 1974.

[6] Зубарев Д. Н. Неравновесная статистическая термодинамика. — М.: Наука, 1971.

[7] Квасников И. А. Термодинамика и статистическая физика. Теория равновесных систем. — М.: Изд-во Моск. ун-та, 1991.

[8] Кейта И. Статистическая механика классического релятивистского газа с учётом флуктуаций давления: Дис.... канд. физ.-мат. наук. — М., 2007.

[9] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. Ч. 1. — М.: Наука, 1976.

[10] Лебедев Н. Н. Специальные функции и их приложения. — М.: ГИТТЛ, 1953.

[11] Мюнстер А. Теория флуктуаций // Термодинамика необратимых процессов. — М.: ИЛ, 1962.

[12] Рудой Ю. Г., Кейта И. Динамическое давление и его флуктуации для классического идеального газа релятивистских частиц // Вестн. Росс. ун-та дружбы народов. Сер. Математика, информатика, физика. — 2007. — № 1-2. — С. 84—93.

[13] Рудой Ю. Г., Рыбаков Ю. П., Кейта И. Термодинамические уравнения состояния классического идеального газа и их обобщения посредством эффективных параметров // Физ. образ. в вузах. — 2007. — Т. 13, № 3 — С. 41—56.

[14] Рудой Ю. Г., Суханов А. Д. Термодинамические флуктуации в подходах Гиббса и Эйнштейна // Успехи физ. наук — 2000. — Т. 170, № 12. — С. 1265—1296.

[15] Терлецкий Я. П. Статистическая физика. — М.: Высшая школа, 1994.

[16] Хилл Т. Статистическая механика. — М.: ИЛ, 1960.

[17] Fowler R. H. Statistical Mechanics. — Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1936.

[18] Glaser W. Zur Theorie des idealen Gases // Ann. Phys. — 1935. — Vol. 94. — P. 317—327; Korpuskel und Lichtquanten // Ibid. — P. 677—691.

[19] Jüttner F. Das Maxwellsche Gesetz der Geschwindigkeitsverteilung in der Relativtheorie // Ann. Phys. — 1911. — Vol. 34. — P. 856—882.

[20] Jüttner F. Die relativistische Quantentheorie desidealen Gases // Ann. Phys. — 1928. — Vol. 47. — P. 542—566.

[21] Klein M. J. Pressure fluctuations // Phys. — 1960. — Vol. 26. — P. 1073—1079.

[22] Wergeland H. // Det. Kgl. Norske Vid. Forh. — 1955. — Vol. 28. — P. 106.