01;05

Точные безынтегральные выражения для интегральных функций Дебая

© А.Е. Дубинов, А.А. Дубинова

ФГУП „Российский федеральный ядерный центр — ВНИИ экспериментальной физики“, Саров
Высшая школа общей и прикладной физики, Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород
E-mail: dubinov-ae@yandex.ru, anndub@gmail.com

Поступило в Редакцию 26 марта 2008 г.

Впервые получены точные явные безынтегральные выражения для интегральных функций Дебая, а также безынтегральное выражение теплоемкости k-мерной кристаллической решетки в зависимости от температуры. Выражения содержат полилогарифмы и дзета-функцию Римана.

PACS: 02.30.Gp, 65.40.Ba

Интегральные функции Дебая, энергии и теплоемкости соответственно

$$DE_k(x) = \frac{k}{x^{k+1}} \int\limits_0^x \frac{t^k dt}{\exp t - 1}, \qquad (1)$$

$$DC_k(x) = \frac{k}{x^k} \int\limits_0^x \frac{t^{k+1} \exp(-t) dt}{[1 - \exp(-t)]^2} \qquad (2)$$

представляют собой математические элементы теории теплоемкости k-мерного кристалла [1,2] (в разных источниках множители перед интегралами могут различаться). Важность этих функций иллюстрируется тем, что по данным поиска в Интернете их включают в уравнения состояния твердых материалов в более чем 10^3 оригинальных работах (например, [3–5]); их свойства описаны практически во всех учебниках по статистической физике и физике твердого тела (например, [6–8]), а также в монографиях (например, [9–11]). Функция (1) внесена и в знаменитый математический справочник [12].

В теории теплоемкости функции Дебая (1) и (2) возникают при интегрировании планковских выражений для фононной плотности состояний решетки.

Считается (в [10,11] об этом сказано прямо), что функции Дебая, даже для частного случая $k = 3$, нельзя представить в явном безынтегральном виде конечной комбинации известных функций. Это обстоятельство затрудняет их использование в аналитических теориях твердого тела, а выражения, содержащие функции Дебая в интегральной форме, имеют незавершенный вид.

Поэтому функции Дебая подробно табулированы [12–14], для них уже в течение многих десятилетий ищутся всевозможные удобные аппроксимации [14–16].

Вместе с тем ранее предпринимались попытки получить точные аналитические выражения для (1), (2). Уже достаточно давно заметили, что интеграл (1) при замене x в верхнем пределе на бесконечность выражается через дзета-функцию Римана. Так, в работе [17] достаточно простым способом (с помощью разложения в ряд Фурье) получено точное выражение предела (1) при $x \to \infty$ и $k = 3$. Аналогичный результат получен в [1] для произвольного натурального k. Можно, например, еще указать на разложение (1) в бесконечный степенной ряд с помощью чисел Бернулли (п. 27.1 в [12]), справедливый при $|x| < 2\pi$ и $k \geqslant 1$:

$$DE_k(x) = \frac{1}{x} - \frac{1}{2}\,\frac{k}{k+1} + \frac{k}{x}\sum_{m=1}^{k}\frac{B_{2m}x^{2m}}{(2m+k)(2m)!}, \tag{3}$$

а также на бесконечное разложение [12], справедливое при $x > 0$ и $k \geqslant 1$:

$$DE_k(x) = \frac{k}{x^{k+1}}\left\{\sum_{m=1}^{\infty}\exp(-mx)\right.$$
$$\left.\times\left[\frac{x^k}{m} + \frac{kx^{k-1}}{m^2} + \frac{k(k+1)x^{k-2}}{m^3} + \ldots + \frac{k!}{m^{k+1}}\right]\right\}. \tag{4}$$

В п. 1.12.5 книги [18] о полилогарифмах кратко упомянута функция Дебая (1) и приведено ее безынтегральное выражение для частного случая $k = 2$ от комбинации Λ_3-функции Куммера с элементарными функциями. Это дало нам основание предположить, что безынтегральное конечное выражение для (1) и (2) при произвольных целых k получить все-таки можно, причем основу новых выражений должны составлять полилогарифмы или родственные им функции (дзета-функция Римана относится к их числу).

В данной работе мы впервые приводим такие точные явные безынтегральные выражения для (1) и (2) в виде конечной комбинации известных функций, вопреки сложившемуся мнению о невозможности этого сделать.

Итак, для любого положительного целого k справедливы

$$DE_k(x) = \frac{k}{x^{k+1}} \left[(-1)^k k! \xi(k+1) + \sum_{m=0}^{k} (-1)^{k-m+1} \frac{k!}{m!} x^m \mathrm{Li}_{k-m+1}(\exp x) \right] - \frac{k}{k+1}, \qquad (5)$$

$$DC_k(x) = \frac{k}{x^k} \left\{ (k+1)! \xi(k+1) - \sum_{m=0}^{k+1} \frac{(k+1)!}{m!} x^m \mathrm{Li}_{k-m+1}[\exp(-x)] \right\}, \qquad (6)$$

где $\xi(x)$ — дзета-функция Римана [19], $\mathrm{Li}_v(x)$ — полилогарифм [18,20], а суммы, как видно, конечны.

Доказательство (5) и (6) достаточно простое. Действительно, неопределенные интегралы в (1) и (2) с точностью до произвольной константы имеют вид

$$\int \frac{t^k dt}{\exp t - 1} = \sum_{m=0}^{k} (-1)^{k-m+1} \frac{k!}{m!} t^m \mathrm{Li}_{k-m+1}(\exp t) - \frac{t^{k+1}}{k+1}, \qquad (7)$$

$$\int \frac{t^{k+1} \exp(-t) dt}{[1 - \exp(-t)]^2} = - \sum_{m=0}^{k+1} \frac{(k+1)!}{m!} t^m \mathrm{Li}_{k-m+1}[\exp(-t)]. \qquad (8)$$

В их верности легко убедиться простым дифференцированием первообразных, применяя правило дифференцирования полилогарифма $\frac{d}{dx} \mathrm{Li}_k(x) = \frac{1}{x} \mathrm{Li}_{k-1}(x)$. Подставляя (7) и (8) в исходные интегралы (1) и (2), используя формулу Ньютона–Лейбница с учетом $\mathrm{Li}_k(1) = \xi(k)$, а затем, умножая их на соответствущие множители, получим (5) и (6).

Особое значение для теории Дебая теплоемкости твердых тел имеют эти функции при $k = 3$. Приведем для справки их внешний вид:

$$DE_3(x) = -\frac{1}{5}\frac{\pi^4}{x^4} - \frac{3}{4} + \frac{3}{x}\ln(1-\exp x) + \frac{9}{x^2}\,\mathrm{Li}_2(\exp x) - \frac{18}{x^3}\,\mathrm{Li}_3(\exp x) + \frac{18}{x^4}\,\mathrm{Li}_4(\exp x), \quad (9)$$

$$DC_3(x) = \frac{4}{5}\frac{\pi^4}{x^3} + \frac{3x\exp(-x)}{[\exp(-x)-1]} + 12\ln[1-\exp(-x)] - \frac{36}{x}\,\mathrm{Li}_2[\exp(-x)] - \frac{72}{x^2}\,\mathrm{Li}_3[\exp(-x)] - \frac{72}{x^3}\,\mathrm{Li}_4[\exp(-x)]. \quad (10)$$

Для упрощения записи в (9), (10) мы воспользовались

$$\mathrm{Li}_0(x) = \frac{x}{1-x}, \quad \mathrm{Li}_1(x) = -\ln(1-x), \quad (11)$$

а также тем, что для четных аргументов значения дзета-функции Римана определяются как

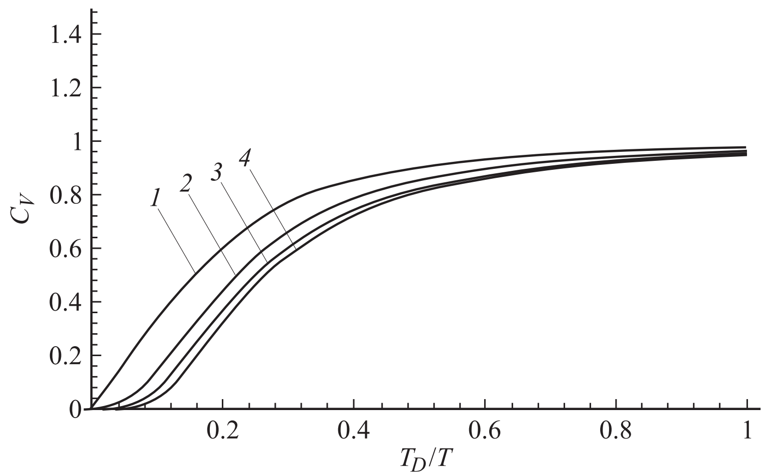
$$\xi(2n) = (-1)^{n-1}\frac{(2\pi)^{2n}}{2(2n)!}B_{2n}, \quad (12)$$

где B_{2n} — числа Бернулли [12,21]. В частности, $B_4 = -1/30$ и $\xi(4) = \pi^4/90$.

Отрицательные аргументы обеих функций — отрицательные температуры — не имеют физического смысла. Но с математической точки зрения полезно знать, что сумма $DE_k(x) + k/2(k+1)$ есть нечетная функция, а $DC_k(x)$ и $dDE_k(x)/dx$ — четные функции. Непосредственной подстановкой можно проверить и следующие функциональные тождества

$$\frac{d}{dx}[xDE_k(x)] = \frac{k}{\exp(x)-1} - kDE_k(x), \quad (13)$$

$$DC_k(x) = xDE_k(x) - x\frac{d}{dx}[xDE_k(x)]. \quad (14)$$



Графики зависимости (15) теплоемкости k-мерного кристалла от приведенной температуры; номер кривой равен величине k.

В заключение отметим, что значения вычисленных интегралов, согласно [9], входят в математические выражения практически всех термодинамических величин твердых тел; здесь приведем лишь точное безынтегральное безразмерное выражение для теплоемкости k-мерного кристалла в теории Дебая:

$$C_V(T) = DC_k\left(\frac{T_D}{T}\right), \qquad (15)$$

в котором T_D — температура Дебая. На рисунке представлены зависимости (15) теплоемкости от температуры при различных значениях k.[1]

Таким образом, в данной работе впервые получены точные выражения для функций Дебая в безынтегральной форме.

Работа одного из нас (А.Е. Дубинова) поддержана грантом правительства Нижегородской области.

[1] На рисунке среди прочих приведена кривая температурной зависимости теплоемкости 4-мерного кристалла. Этим мы, во-первых, показываем тенденцию в эволюции кривых при росте k, а во-вторых, напоминаем, что в некоторых теориях твердого тела (например, ренормализационной теории фазовых переходов [22]) 4-мерный кристалл занимает математически привилегированное положение на множестве k-мерных кристаллов.

Список литературы

[1] *Valladares A.A.* // Am. J. Phys. 1975. V. 43. N 4. P. 308–311.
[2] *Магомедов М.Н.* // ФТТ. 2003. Т. 45. В. 1. С. 33–36.
[3] *Бодряков В.Ю., Повзнер А.А., Зелюкова О.Г.* // ФТТ. 1999. Т. 41. В. 7. С. 1248–1253.
[4] *Uchida T., Wang Y., Rivers M.L., Sutton S.R.* // J. Geophys. Res. 2001. V. 106. N B10. P. 21799–21810.
[5] *Huang Y., Chen G., Arp V.* // J. Chem. Phys. 2006. V. 125. N 5. P. 054505-1–10.
[6] *Fermi E.* Thermodynamics. N.Y.: Dover Publ. Inc., 1936.
[7] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. Т. 5. Статистическая физика. М.: Наука, 1995.
[8] *Квасников И.А.* Термодинамика и статистическя физика. Т. 2. Теория равновесных систем: статистическая физика. М.: Едиториал УРСС, 2002.
[9] *Жарков В.Н., Калинин В.А.* Уравнения состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах. М.: Наука, 1968.
[10] *Жирифалько Л.* Статистическая физика твердого тела. М.: Мир, 1975.
[11] *Маделунг О.* Теория твердого тела. М.: Наука, 1980.
[12] *Abramovitz M., Stegun I.A.* Handbook of mathematical functions. Washington: Nat. Bureau of Standards, 1964.
[13] *Beattie J.A.* // J. Math. Phys. 1926. V. 6. P. 1–32.
[14] *Thacher, Jr. H.C.* // J. Chem. Phys. 1960. V. 32. N 2. P. 638.
[15] *Лабутин С.А., Пугин М.В.* // Изв. вузов. Физика. 1996. № 2. С. 103–104.
[16] *Елисеев В.Г., Елисеев Г.М.* // ВАНТ: Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2006. № 3. С. 59–65.
[17] *Sukheeja B.D.* // Am. J. Phys. 1970. V. 38. N 7. P. 923–924.
[18] *Lewin L.* Polylogarithms and associated functions. N.Y.–Oxford: North Holland, 1981.
[19] *Титмарш Е.К.* Теория дзета-функции Римана. М.: ИЛ, 1953.
[20] *Пыхтеев Г.Н., Мелешко И.Н.* Полилогарифмы, их свойства и методы вычисления. Минск: Изд-во БГУ, 1976.
[21] *Грэхем Р., Кнут Д., Паташник О.* Конкретная математика. Основание информатики. М.: Мир, 1998.
[22] *Niemeijer Th., van Leeuwen J.M.J.* // Phys. Rev. Lett. 1973. V. 31. N 23. P. 1411–1414.