X1-063 (2009/10/29)

انرژی یِ درونی یِ یک گاز ِ کامل ِ نسبیتی

محمد خرمی

mamwad@mailaps.org

بسته‌گی یِ انرژی یِ درونی یِ یک گاز ِ کامل ِ تک‌اتمی یِ کلاسیک ِ نسبیتی به دما محاسبه میشود.

1 انرژی و همپارش

یک گاز ِ کامل از ملکولها یی تک‌اتمی هر یک به جرم ِ m را در نظر بگیرید. انرژی یِ هر ملکول

$$h = \sqrt{c^2\,\mathbf{p}\cdot\mathbf{p} + m^2\,c^4} \tag{1}$$

است، که $\mathbf{p}$ تکانه یِ ملکول است. انرژی یِ کل ِ گاز

$$\begin{aligned} H &= \sum_a h_a, \\ &= h(\mathbf{p}_a), \end{aligned} \tag{2}$$

است، که a شاخص ِ ذره است. قضیه یِ همپارش (مثلاً [1]) میگوید

$$\left\langle x^i\,\frac{\partial H}{\partial x^j}\right\rangle = k_\mathrm{B}\,T\,\delta^i_j, \tag{3}$$

که T دما یِ مطلق است. از اینجا نتیجه می‌شود

$$\left\langle \frac{c^2\,\mathbf{p}_a\cdot\mathbf{p}_a}{\sqrt{c^2\,\mathbf{p}_a\cdot\mathbf{p}_a+m^2\,c^4}}\right\rangle = D\,k_{\mathrm{B}}\,T, \tag{4}$$

یا،

$$\left\langle h_a-\frac{m^2\,c^4}{h_a}\right\rangle = D\,k_{\mathrm{B}}\,T, \tag{5}$$

که D بُعد ِ فضا است. البته مقدارِچشمداشتی‌ها یِ طرف ِ چپ ِ معادله یِ بالا به شاخص ِ a بسته‌گی ندارند و می‌شود این شاخص را از آن معادله برداشت. با تعریف‌ها یِ

$$x := \frac{m\,c^2}{k_{\mathrm{B}}\,T}, \tag{6}$$

$$Y := \left\langle \frac{h}{m\,c^2}\right\rangle, \tag{7}$$

$$Z := \left\langle \frac{m\,c^2}{h}\right\rangle, \tag{8}$$

معادله یِ (5) می‌شود

$$Y - Z = \frac{D}{x}. \tag{9}$$

2 مقدار ِ چشمداشتی یِ عکس ِ همیلتنی

برا یِ سیستم ی با همیلتنی یِ H داریم

$$\left\langle \frac{1}{H}\right\rangle = \left[\int \mathrm{d_P}V\ \exp(-\beta\,H)\right]^{-1}\int \mathrm{d_P}V\ \frac{1}{H}\ \exp(-\beta\,H), \tag{10}$$

که انتگرال‌گیری رو یِ فضا یِ فاز است و

$$\beta := \frac{1}{k_{\mathrm{B}}\,T}. \tag{11}$$

از (10) نتیجه میشود

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\beta}\left\langle\frac{1}{H}\right\rangle =& -\left[\int \mathrm{d}_{\mathrm{P}}V\;\exp(-\beta\,H)\right]^{-1}\int \mathrm{d}_{\mathrm{P}}V\;\exp(-\beta\,H)\\ &+\left[\int \mathrm{d}_{\mathrm{P}}V\;\exp(-\beta\,H)\right]^{-2}\int \mathrm{d}_{\mathrm{P}}V\;H\;\exp(-\beta\,H)\\ &\times\int \mathrm{d}_{\mathrm{P}}V\;\frac{1}{H}\;\exp(-\beta\,H)\end{aligned}\tag{12}$$

که نتیجه میدهد

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\beta}\left\langle\frac{1}{H}\right\rangle = -1+\left\langle\frac{1}{H}\right\rangle\,\langle H\rangle.\tag{13}$$

به ساده‌گی دیده میشود برا یِ گازها یِ کامل نتیجه یِ مشابه ی برا یِ همیلتنی یِ تکذره‌ای برقرار است:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\beta}\left\langle\frac{1}{h}\right\rangle = -1+\left\langle\frac{1}{h}\right\rangle\,\langle h\rangle,\tag{14}$$

یا بر حسب ِ متغیرها یِ بی‌بُعد،

$$\frac{\mathrm{d}Z}{\mathrm{d}x} = -1+Z\,Y.\tag{15}$$

این معادله همراه با معادله یِ (9) بسته‌گی یِ انرژی یِ درونی به دما را میدهد. x و Y و Z هرسه نامنفی اند. Y را بین ِ (9) و (15) حذف میکنیم:

$$\frac{\mathrm{d}Z}{\mathrm{d}x} = -1+Z\,\left(Z+\frac{D}{x}\right).\tag{16}$$

صفرها یِ طرف ِ راست ِ این معادله را با ζ_1 و ζ_2 نشان میدهیم:

$$\zeta_1(x) := -\frac{D}{2\,x}+\sqrt{1+\frac{D^2}{4\,x^2}},\tag{17}$$

$$\zeta_2(x) := -\frac{D}{2\,x}-\sqrt{1+\frac{D^2}{4\,x^2}}.\tag{18}$$

دیده میشود ζ_1 و ζ_2 هردو اکیدَن صعودی اند. از اینجا معلوم میشود تقاطع ِ خم ِ Z با هر یک از خمها یِ ζ_1 و ζ_2 در دستِبالا یک نقطه (جز 0) است. علت این است که اگر خم ِ Z خم ِ ζ_i را در $x_0\neq 0$ قطع کند، مشتق ِ $(Z-\zeta_i)$ در x_0 منفی میشود. این یعنی یک همسایه‌گی یِ x_0 هست که در آن همسایه‌گی، طرف ِ چپ ِ x_0 مقدار ِ $(Z-\zeta_i)$ مثبت و طرف ِ راست ِ x_0 مقدار ِ $(Z-\zeta_i)$ منفی

است. از اینجا معلوم میشود بین ِ هر دوصفر ِ $(Z-\zeta_i)$ که 0 نباشند، یک صفر ِ دیگر ِ $(Z-\zeta_i)$ هست. پس $(Z-\zeta_i)$ اگر دستِکم دو جا (جز 0) صفر شود همه جا صفر میشود. این یعنی ζ_i یک جواب ِ (16) است. جاگذاری یِ مستقیم نشان میدهد چنین نیست. پس $(Z-\zeta_i)$ دستِبالا یک جا (جز 0) صفر میشود.

همچنین، میشود نشان داداگر $Z(x_1)$ کوچکتر از $\zeta_1(x_1)$ باشد، آنگاه یک x_2 هست که در $x>x_2$ مقدار ِ Z منفی است. برا یِ اثبات دو حالت در نظر میگیریم. حالت ِ اول این است که $(Z-\zeta_2)$ در x_3 صفر شود. در این صورت در $x>x_3$ مقدار ِ Z کوچکتر از مقدار ِ ζ_2 و در نتیجه منفی است. پس x_2 را میشود هم ان x_3 گرفت. حالت ِ دوم این است $(Z-\zeta_2)$ صفر نشود. در این صورت Z نزولی است (برا یِ $x>x_1$). پس Z یا منفی نمیشود یا اگر منفی شد با افزایش ِ x همچنان منفی میماند. اگر Z منفی نشود،

$$\frac{\mathrm{d}Z}{\mathrm{d}x} \le -[\zeta_1(x_1)-Z(x_1)], \qquad x>x_1, \tag{19}$$

که نتیجه میدهد فرض ِ نامنفیماندن ِ Z نادرست است.

پس جواب ِ موردنظر برا یِ معادله یِ (16) همواره ناکوچکتر از ζ_1 است. همه یِ این جوابها اکیدَن صعودی اند. نشان میدهیم از بین ِ جوابها یِ همهجا ناکوچکتر از ζ_1 فقط یک یِ هست که در $x\to\infty$ بینهایت نمیشود، و آن جواب کوچکترین جواب از بین ِ جوابها یِ همهجا ناکوچکتر از ζ_1 است. اول توجه کنیم که اگر $Z(x_1)$ بزرگتر از 1 باشد،

$$\frac{\mathrm{d}Z}{\mathrm{d}x} \ge [Z(x_1)-1], \qquad x>x_1, \tag{20}$$

که نتیجه میدهد Z در $x\to\infty$ بینهایت میشود. حالا دو جواب ِ Z_1 و Z_2 با $Z_1(x_1)<Z_2(x_1)$ را در نظر بگیرید. برا یِ $x>x_1$ مقدار ِ Z_2 بزرگتر از مقدار ِ Z_1 است (چون خمها یِ متناظر با دو جواب ِ متمایز ِ (16) یکدیگر را قطع نمیکنند، جز احتمالَن در مبدئ). به این ترتیب،

$$\frac{\mathrm{d}(Z_2-Z_1)}{\mathrm{d}x} \ge 0, \qquad x>x_1, \tag{21}$$

که نتیجه میدهد

$$Z_2(x)-Z_1(x) \ge Z_2(x_1)-Z_1(x_1), \qquad x>x_1, \tag{22}$$

و از آنجا

$$Z_2(x) - \zeta_1(x) \geq Z_2(x_1) - Z_1(x_1), \qquad x > x_1. \tag{23}$$

پس چون ζ_1 در $x \to \infty$ به 1 میگراید، یک x_2 هست که در $x > x_2$ مقدار ِ Z_2 بزرگتر از 1 میشود. پس دو جواب ِ متمایز ِ ناکوچکتر از ζ_1 نیست که هیچ یک در $x \to \infty$ بینهایت نشود. روشن است که آن جواب که ناکوچکتر از ζ_1 است و در $x \to \infty$ بینهایت نمیشود، در $x \to \infty$ به 1 میگراید.

3 رفتارها یِ مجانبی

رفتارها یِ جواب ِ معادله یِ (16) در x ها یِ کوچک و بزرگ را بررسی میکنیم. انتظار میرود x ها یِ کوچک (دماها یِ بزرگ) متناظر با رفتار ِ فرانسبیتی و x ها یِ بزرگ (دماها یِ کوچک) متناظر با رفتار ِ غیرِنسبیتی باشند.

با تغییرِمتغیر ِ

$$Z(x) =: x^D\, u(x), \tag{24}$$

معادله یِ (16) میشود

$$x^D\, \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} = -1 + x^{2\,D}\, u^2. \tag{25}$$

اساس ِ کار برا یِ بررسی یِ رفتار ِ جواب، مقایسه یِ دوجمله یِ طرف ِ راست ِ رابطه یِ بالا برا یِ محاسبه یِ u_0 ، و سپس یک روش ِ اختلال برا یِ محاسبه یِ u_n است، که u_n بخش ی از u است که جملهها یِ از مرتبه یِ n یا کمتر را در بردارد.

3.1 x ها یِ کوچک

فرض کنید جمله یِ غالب ِ طرف ِ راست ِ (25) جمله یِ اول است. در این صورت با چشمپوشی از جمله یِ دوم نتیجه میشود

$$u_0 = \begin{cases} -\ln x, & D = 1 \\ \dfrac{x^{1-D}}{D-1}, & D > 1 \end{cases}. \tag{26}$$

دیده میشود این شکل ِ u_0 با فرض ِ غالببودن ِ جمله یِ اول ِ طرف ِ راست ِ (25) سازگار است. حالا فرض کنید جمله یِ غالب در طرف ِ راست ِ (25) جمله یِ دوم است. در این صورت با چشمپوشی از جمله یِ اول نتیجه میشود

$$u_0 = -(D+1)\, x^{-(D+1)}, \tag{27}$$

؛که این هم با فرض ِ غالببودن ِ جمله یِ دوم ِ طرف ِ راست ِ (25) سازگار است. سرانجام، فرض کنید جملهها یِ طرف ِ راست ِ (25) هممرتبه اند. در این صورت

$$u_0 \sim x^{-D}, \tag{28}$$

که نتیجه میدهد

$$\frac{\mathrm{d}u_0}{\mathrm{d}x} \sim x^{-(D+1)}, \tag{29}$$

که نشان میدهد (28) با معادله یِ (25) ناسازگار است، چون مرتبه یِ طرف ِ چپ ِ این معادله را بزرگتر از مرتبه یِ طرف ِ راست ِ آن میکند.

پس جمله یِ غالب ِ u به یک ی از شکلها یِ (26) یا (27) است. بین ِ این دو شکل هم آن که با نامنفیبودن ِ Z سازگار است (26) است.

با یک روش ِ تکرار میشود تصحیحها یِ بعدی بر u را به دست آورد. رابطه یِ بازگشتی برا یِ u_n

$$x^D\, \frac{\mathrm{d}u_n}{\mathrm{d}x} \overset{n}{=} -1 + x^{2\,D}\, (u_{n-1})^2 \tag{30}$$

است، که معنی یِ شاخص ِ n رو یِ تساوی این است که این تساوی فقط تا مرتبه یِ n درست است.

در انتگرالگیری از (30) یک ثابت ِ دلبخاه هم ظاهر میشود (که قاعدتَن از این شرط تعیین میشود که Z در $\infty \leftarrow x$ به 1 میگراید). اما این ثابت را فقط از جا یی باید نگه داشت که جملهها یی کوچکتر از یا هممرتبه با آن چه ناشی از این ثابت است ظاهر شوند. به این ترتیب جملهها یی در u که متناسب با توانها یِ منفی یِ یا لگاریتم ِ x اند، بدون ِ استفاده از شرط ِ مرزی یِ $x \to \infty$ به دست میآیند. اما جملهها یِ متناسب با توانها یِ مثبت ِ x یا توانها یِ مثبت ِ x ضرب در لگاریتم ِ x نه. مثلَن u_1 را در

نظر بگیرید. از (30) نتیجه میشود

$$u_1 = u_0 + \begin{cases} C, & D < 3 \\ \dfrac{1}{4}\,\ln x, & D = 3 \\ -\dfrac{x^{3-D}}{(D-3)\,(D-1)^2}, & D > 3 \end{cases}, \tag{31}$$

که C یک ثابت است که از شرطِ مرزی در $x \to \infty$ به دست می‌آید. با ادامه یِ روشِ تکرار برا یِ محاسبه یِ تصحیحها یِ بعدی، دیده میشود

$$u_n = \begin{cases} \displaystyle\sum_{k=0}^{n} c_k\, x^{2\,k+1-D}, & n < \dfrac{D-1}{2} \\ \displaystyle\sum_{k=0}^{n-1} c_k\, x^{2\,k+1-D} + c\,\ln x, & n = \dfrac{D-1}{2} \end{cases}. \tag{32}$$

برا یِ n ها یِ بزرگتر، در u_n جمله‌ها یی با توانها یِ مثبتِ x ظاهر میشود که ضریبها یِشان با شرطِ مرزی در $x \to \infty$ به دست می‌آید. دیده میشود به هر حال جمله یِ لگاریتمی فقط در بُعدها یِ فرد ظاهر میشود.

3.2 x ها یِ بزرگ

از این که جوابِ موردِنظر برا یِ معادله یِ (16)، در $x \to \infty$ به 0 میگراید نتیجه میشود

$$u_0 = x^{-D}. \tag{33}$$

در این حالت در (25) نسبتِ طرفِ چپ به هر یک از جمله‌ها یِ طرفِ راست، در $x \to \infty$ به صفر میگراید. به این ترتیب رابطه یِ بازگشتی برا یِ u_n میشود

$$u_n \overset{n}{=} x^{-D}\sqrt{1 + x^D\,\frac{\mathrm{d}u_{n-1}}{\mathrm{d}x}}. \tag{34}$$

جوابِ این همراه با (33) به شکلِ

$$u_n = \sum_{k=0}^{n} d_k\, x^{-k-D} \tag{35}$$

است، از جمله

$$u_2 = x^{-D} - \frac{D\,x^{-1-D}}{2} + \frac{D\,(D+2)\,x^{-2-D}}{8}. \tag{36}$$

3.3 رفتارِ مجانبی یِ انرژی

از ترکیبِ نتایجِ بالا با (9) و (24) نتیجه میشود

$$Y_1(x) = \begin{cases} x^{-1} - x\,\ln x, & D = 1 \\ D\,x^{-1} + \dfrac{x}{D-1}, & D > 1 \end{cases}, \qquad x \ll 1, \tag{37}$$

و

$$Y_2(x) = 1 + \frac{D\,x^{-1}}{2} + \frac{D\,(D+2)\,x^{-2}}{8}, \qquad x \gg 1. \tag{38}$$

4 شکلِ بسته برا یِ انرژی

داریم

$$Z(x) = -\frac{W(x)}{W'(x)}, \tag{39}$$

که

$$W(x) := \int_0^\infty \mathrm{d}\xi\; \frac{\xi^{D-1}}{\sqrt{1+\xi^2}}\; \exp(-x\,\sqrt{1+\xi^2}). \tag{40}$$

داریم

$$\begin{aligned} x^2\,\left(\frac{\mathrm{d}^2 W}{\mathrm{d}x^2} - W\right) &= \int_0^\infty \mathrm{d}\xi\; x^2\, \frac{\xi^{D+1}}{\sqrt{1+\xi^2}}\; \exp(-x\,\sqrt{1+\xi^2}), \\ &= \int_0^\infty \mathrm{d}\xi\; D\,x\,\xi^{D-1}\; \exp(-x\,\sqrt{1+\xi^2}), \\ &= -D\,x\,\frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}x}, \end{aligned} \tag{41}$$

که نتیجه میدهد

$$\left(x^2\,\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+D\,x\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}-x^2\right)\,W=0. \tag{42}$$

با تغییرِمتغیرِ

$$W(x)=:x^{-m}\,X(x), \tag{43}$$

با

$$m:=\frac{D-1}{2}, \tag{44}$$

نتیجه میشود

$$\left[x^2\,\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+x\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}-(x^2+m^2)\right]\,X=0, \tag{45}$$

که معادله یِ بسل [2] ِ دگرگون است. از این معادله همراه با این شرط ِ مرزی که W و در نتیجه X در $x\to\infty$ به 0 میگراید نتیجه میشود

$$X(x)=N\,\mathrm{K}_m(x), \tag{46}$$

که N ثابت و K_m تابع ِ بسل [2] ِ دگرگون از نوع ِ دوم از مرتبه یِ m است. به این ترتیب،

$$W(x)=N\,x^{-m}\,\mathrm{K}_m(x). \tag{47}$$

این نتیجه را در [3] هم میشود یافت. از (47) نتیجه میشود

$$Z(x)=\frac{x\,\mathrm{K}_m(x)}{m\,\mathrm{K}_m(x)-x\,\mathrm{K}'_m(x)}, \tag{48}$$

و از آنجا

$$Y(x)=\frac{D}{x}+\frac{x\,\mathrm{K}_{(D-1)/2}(x)}{[(D-1)/2]\,\mathrm{K}_{(D-1)/2}(x)-x\,\mathrm{K}'_{(D-1)/2}(x)}. \tag{49}$$

با بسطدادن ِ این عبارت در x ها یِ کوچک و بزرگ، از جمله میشود رابطه‌ها یِ (37) و (38) را باز یافت.

5 پانوشتها

[1] R. K. Pathria; "Statistical Mechanics" (Pergamon Press, 1993) chapter 2

[2] Bessel

[3] I. S. Gradsgteyn & I. M. Ryzhik; "Table of integrals, series, and products" 7th edition (Academic Press, 2007) section 3.387