Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Д. Свижович, Функция Блоха–Грюнайзена произвольного порядка и ее разложения в ряд, *ТМФ*, 2011, том 166, номер 1, 44–50

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf6594>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 44.207.124.84

26 апреля 2023 г., 12:54:09

© 2011 г.

Д. Свижович*

ФУНКЦИЯ БЛОХА–ГРЮНАЙЗЕНА ПРОИЗВОЛЬНОГО ПОРЯДКА И ЕЕ РАЗЛОЖЕНИЯ В РЯД

Приводятся несколько разложений в ряд для функции Блоха–Грюнайзена произвольного (как целочисленного, так и нецелочисленного) порядка. Показано, что эти разложения соответствуют другим, более знакомым и часто используемым специальным функциям математической физики. В частности, функция Блоха–Грюнайзена целочисленного порядка может быть представлена в терминах функции Бозе–Эйнштейна других порядков.

Ключевые слова: формула Блоха–Грюнайзена, функция Блоха–Грюнайзена, функция Бозе–Эйнштейна, функция Дебая, полилогарифм, неполная гамма-функция, электрическое сопротивление.

1. ВВЕДЕНИЕ

Температурная зависимость электрического сопротивления $\rho(T)$ в немагнитных металлических кристаллизованных твердых телах задается формулой Блоха–Грюнайзена [1], [2]

$$\rho(T) = A \left(\frac{T}{\Theta_R} \right)^n \int_0^{\Theta_R/T} \frac{t^n}{(e^t - 1)(1 - e^{-t})} dt, \quad (1)$$

где T – абсолютная температура, A – константа, принимающая различные значения для различных металлов, а Θ_R – характеристическая температура, значение которой весьма близко к значению дебаевской температуры Θ_D , получаемому из измерений удельной теплоемкости. Постоянная n принимает целочисленные значения 2, 3 и 5 в зависимости от того, какой механизм рассеяния оказывается доминирующим.

Поведение, характерное для функции Блоха–Грюнайзена, наблюдалось при изучении влияния электрон-фононного взаимодействия на сопротивление металлических нанопроводов [3], [4] и нанокристаллических металлических пленок и при исследовании сопротивления сверхпроводящих материалов в нормальном состоянии [5], [6]. Подобрав при этом соответствующим образом данные измерений в широком диапазоне температур с использованием выражения (1), можно получить не только целочисленные, но и нецелочисленные значения индекса n , например $n = 1.5$ и $n = 4.5$ [7], [8].

*Atomic Physics Laboratory, Vinča Institute of Nuclear Sciences, Belgrade, Republic of Serbia. E-mail: djurdje@vinca.rs

Таким образом, задача изучения аналитических свойств функций вида (1) при некоторых выделенных (не обязательно целочисленных) значениях параметра n и разработки вычислительных процедур, позволяющих получать значения параметров A и Θ_R из данных экспериментов по определению сопротивления материалов, оказывается весьма актуальной. В настоящей работе исследуется интеграл

$$\mathcal{F}_s(x) = \int_0^x \frac{t^s}{(e^t - 1)(1 - e^{-t})} dt = \int_0^x \frac{t^s e^t}{(e^t - 1)^2} dt, \quad x \geq \delta > 0, \quad s > 1, \quad (2)$$

называемый в дальнейшем функцией Блоха–Грюнайзена порядка s аргумента x , выводятся некоторые из его разложений в ряд, справедливые при произвольных значениях параметра порядка, и обсуждается связь этого интеграла с другими, более знакомыми и широко используемыми специальными функциями.

2. РАЗЛОЖЕНИЯ ФУНКЦИИ $\mathcal{F}_s(x)$

Прежде всего отметим, что интегралы в выражении (2) приводятся с помощью интегрирования по частям к следующему виду:

$$\mathcal{F}_s(x) = \frac{x^s}{1 - e^x} + s \int_0^x \frac{t^{s-1}}{e^t - 1} dt = \frac{x^s}{1 - e^x} + s\Gamma(s)z_s(x), \quad (3)$$

где $\Gamma(s)$ – хорошо знакомая гамма-функция, а через $z_s(x)$ обозначена неполная дзета-функция Римана. Такое название объясняется тем, что (см. формулу (23.2.7) в справочнике [9]):

$$z_s(\infty) = \zeta(s) := \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty \frac{t^{s-1}}{e^t - 1} dt, \quad \operatorname{Re} s > 1,$$

где $\zeta(s)$ – дзета-функция Римана, которая обычно задается рядом (см. формулу (23.2.1) в [9])

$$\zeta(s) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^s}, \quad \operatorname{Re} s > 1, \quad (4)$$

в его области сходимости и с помощью аналитического продолжения во всей комплексной плоскости, а также с помощью разложения для функции $\zeta(s)$ вида

$$\zeta(s) = \frac{1}{\Gamma(s)} \left(\int_0^x \frac{t^{s-1}}{e^t - 1} dt + \int_x^\infty \frac{t^{s-1}}{e^t - 1} dt \right) = z_s(x) + Z_s(x), \quad \operatorname{Re} s > 1, \quad 0 < x < \infty,$$

где $Z_s(x)$ – дополнительная неполная дзета-функция Римана. Следует также отметить, что классическая специальная функция, называемая функцией Дебая, обычно определяется как $\Gamma(s+1)z_{s+1}(x)$ при целочисленных $s = 1, 2, 3, \dots$ (см. формулу (27.1.1) в [9]; подробнее об исключительно глубокой связи, существующей между свойствами дзета-функции Римана и различными актуальными задачами современной физики, см. [10]–[14]).

Выведем сначала разложение функции $\mathcal{F}_s(x)$ при произвольном вещественном $s > 1$:

$$\mathcal{F}_s(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{B_k}{k!} \frac{(1-k)x^{k+s-1}}{k+s-1}, \quad 0 < x < 2\pi, \quad (5)$$

и

$$\mathcal{F}_s(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{B_k}{k!} \frac{(1-k)\xi^{k+s-1}}{k+s-1} + s \int_{\xi}^x \frac{t^{s-1}}{e^t - 1} dt, \quad x \geq 2\pi, \quad 0 < \xi < 2\pi, \quad (6)$$

где появляются числа Бернулли B_k , $k = 0, 1, 2, \dots$, определяемые, как обычно, производящей функцией экспоненциального вида (см. формулу (23.1.1) в [9]):

$$\frac{t}{e^t - 1} = \sum_{k=0}^{\infty} B_k \frac{t^k}{k!}, \quad |t| < 2\pi. \quad (7)$$

Разложения в ряд в формулах (5) и (6) можно упростить, поскольку в силу соотношений (см. формулу (23.1.19) в [9])

$$B_0 = 1, \quad B_1 = -\frac{1}{2}, \quad B_{2k+1} = 0, \quad k \in \mathbb{N},$$

их можно переписать в виде

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{B_k}{k!} \frac{x^{k+s-1}}{k+s-1} = \frac{x^{s-1}}{s-1} - \frac{x^s}{2s} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{B_{2k}}{(2k)!} \frac{x^{2k+s-1}}{2k+s-1}$$

и

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{B_k}{k!} \frac{(1-k)x^{k+s-1}}{k+s-1} = \frac{x^{s-1}}{s-1} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{B_{2k}}{(2k)!} \frac{(1-2k)x^{2k+s-1}}{2k+s-1}.$$

Чтобы вывести эти разложения, при вычислении определяющего интеграла для $z_s(x)$ мы разбивали отрезок интегрирования на отрезки $[0, \xi]$ и $[\xi, x]$ в предположении $0 < \xi < 2\pi$. При подстановке разложения (7) в интеграл по отрезку $[0, \xi]$ получим

$$z_s(x) = \frac{1}{\Gamma(s)} \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{B_k}{k!} \frac{\xi^{k+s-1}}{k+s-1} + \int_{\xi}^x \frac{t^{s-1}}{e^t - 1} dt \right) \quad (8)$$

и

$$z_s(x) = \frac{1}{\Gamma(s)} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{B_k}{k!} \frac{x^{k+s-1}}{k+s-1} \quad (9)$$

в случае, когда $x = \xi$. Теперь, объединяя (3) с (8) и (9), получим

$$\mathcal{F}_s(x) = \frac{x^s}{1 - e^x} + s \sum_{k=0}^{\infty} \frac{B_k}{k!} \frac{x^{k+s-1}}{k+s-1}, \quad 0 < x < 2\pi, \quad (10)$$

и

$$\mathcal{F}_s(x) = \frac{x^s}{1 - e^x} + s \sum_{k=0}^{\infty} \frac{B_k}{k!} \frac{\xi^{k+s-1}}{k+s-1} + s \int_{\xi}^x \frac{t^{s-1}}{e^t - 1} dt, \quad x \geq 2\pi, \quad 0 < \xi < 2\pi. \quad (11)$$

Наконец, предложенные разложения в формулах (5) и (6) можно легко получить из выражений (10) и (11) при разложении функции $x^s/(1 - e^x)$ в ряд с использованием формулы (7).

Второй набор разложений в ряд для величины $\mathcal{F}_s(x)$, справедливый при произвольном $s > 1$, имеет вид

$$\mathcal{F}_s(x) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\gamma(s+1, kx)}{k^s}, \quad x > 0, \quad (12)$$

$$\mathcal{F}_s(x) = \Gamma(s)\zeta(s) - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\Gamma(s+1, kx)}{k^s}, \quad x > 0, \quad (13)$$

он содержит в себе две связанные между собой функции: неполную гамма-функцию (см. формулу (6.5.2) в [9])

$$\gamma(a, x) = \int_0^x t^{a-1} e^{-t} dt, \quad \operatorname{Re} a > 0, \quad x \geq \delta > 0, \quad (14)$$

и дополнительную неполную гамма-функцию $\Gamma(s, x)$. Эти функции суть члены в разбиении гамма-функции (см. формулу (6.5.3) в [9]):

$$\Gamma(s) = \gamma(s, x) + \Gamma(s, x). \quad (15)$$

Для доказательства формул (12) и (13) снова вычислим определяющий интеграл для $z_s(x)$ и в силу разложения

$$\frac{1}{e^t - 1} = \frac{e^{-t}}{1 - e^{-t}} = \sum_{k=1}^{\infty} e^{-kt}, \quad t > 0, \quad (16)$$

получим

$$z_s(x) = \frac{1}{\Gamma(s)} \sum_{k=1}^{\infty} \int_0^x t^{s-1} e^{-kt} dt = \frac{1}{\Gamma(s)} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\gamma(s, kx)}{k^s}, \quad (17)$$

где изменение порядка интегрирования и суммирования обосновано ввиду абсолютной сходимости выражений, что, в свою очередь, дает

$$\mathcal{F}_s(x) = \frac{x^s}{1 - e^x} + s \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\gamma(s, kx)}{k^s}, \quad x > 0. \quad (18)$$

Применяя теперь определение (14) величины $\gamma(\alpha, x)$, нетрудно с помощью интегрирования по частям проверить выполнение рекуррентного соотношения

$$\gamma(\alpha, x) = \frac{1}{\alpha} (\gamma(\alpha + 1, x) - x^\alpha e^{-x}).$$

Наконец, из этого соотношения и из разложения в ряд (16) можно вывести искомое разложение в формуле (12) исходя из формулы (18). Остается только показать, что, начиная с выражения (15) и применяя разложение (4), можно получить требуемое разложение вида (13).

В важном случае, когда параметр s целочислен, можно вывести еще одно разложение в ряд для величины $\mathcal{F}_s(x)$:

$$\frac{\mathcal{F}_n(x)}{n!} = \zeta(n) - \sum_{j=0}^n \frac{x^j}{j!} \operatorname{Li}_{n-j}(e^{-x}), \quad n = 2, 3, \dots, \quad (19)$$

где $\text{Li}_s(x)$ – функция полилогарифма, задаваемая рядом

$$\text{Li}_s(z) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^s} \quad (20)$$

в области сходимости и аналитическим продолжением в остальной части комплексной плоскости (см., например, [15], [16]).

В самом деле, начиная с определения $\gamma(s, x)$ (14) и применяя следующую легко получаемую формулу:

$$\int t^n e^{\alpha t} dt = e^{\alpha t} \sum_{j=0}^n (-1)^j \frac{n!}{\alpha^{k+1}(n-k)!} t^{n-k},$$

найдем

$$\gamma(n+1, x) = n! \left(1 - e^{-x} \sum_{j=0}^n \frac{x^j}{j!} \right). \quad (21)$$

Искомый результат (19) получается теперь из формул (12) и (21). Заметим, что выражение (19) можно представить в следующем виде:

$$\frac{\mathcal{F}_2(x)}{2!} = \zeta(2) + \frac{1}{1 - e^x} + \ln(1 - e^{-x}); \quad (22)$$

тогда для $n = 3, 4, \dots$ получим

$$\frac{\mathcal{F}_n(x)}{n!} = \zeta(n) - \frac{e^{-x}}{1 - e^{-x}} + \ln(1 - e^{-x}) - \sum_{j=0}^{n-2} \frac{x^j}{j!} \text{Li}_{n-j}(e^{-x}), \quad (23)$$

поскольку

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

3. ЗАКЛЮЧИТЕЛЬНЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ

Отметим, что определяющий интеграл для функции $\mathcal{F}_s(x)$ невозможно вычислить в замкнутом виде в терминах других специальных функций. Тем не менее в режимах низких и высоких температур, т. е. при $T \ll \Theta_R$ и при $T \gg \Theta_R$, его можно аппроксимировать соответствующими выражениями:

$$\mathcal{F}_s(x) \approx \Gamma(s+1) \quad \text{и} \quad \mathcal{F}_s(x) \sim \frac{x^{s-1}}{s-1}.$$

Вычисление функции $\mathcal{F}_s(x)$ в диапазоне промежуточных температур можно провести на основе одного из нескольких возможных основных приближений: численных квадратур, разложения в ряд, схем полиномиального или рационального приближения и нахождения и интерполяции табличных значений. Использование подходящего приближения при интегрировании может существенно упростить вычисление величин A и Θ_R (см. (1)), поскольку метод наименьших квадратов в нелинейном случае требует весьма аккуратного численного интегрирования при каждом значении температуры. Возможно, что какие-то модификации метода гауссовых

квадратур или применение цепных дробей позволят получить оптимальный алгоритм численного вычисления функции $\mathcal{F}_s(x)$; это требует дальнейшего исследования. В работе [17] предложено приближение для функции $\ln(\Theta/T)$ в виде многочлена девятого порядка в случае $n = 5$, в работе [18] предложено приближение обрезанным рядом при целочисленных n , в работе [19] найдены разложения и приближения, справедливые при целочисленных значениях параметра n , и этот метод был обобщен в [20].

Мы получили разложения в ряд для функции $\mathcal{F}_s(x)$: формулы (5), (6), (12) и (13) справедливы при произвольном вещественном параметре порядка $s > 1$, а в формуле (23) приводится разложение в ряд, справедливое только при целочисленном параметре порядка $n \geq 2$. Тщательное сравнение различных методов приближений, основанных на этих разложениях, проводится автором в настоящее время, так что здесь ограничимся несколькими замечаниями. Ряд (12) сходится очень быстро при малых x , в то время как при больших x оказывается необходимо выбрать подходящий метод вычисления функции $\gamma(a, x)$ в формуле (12), поскольку в настоящее время для нее имеются несколько вычислительных схем. Также процедура вычисления чисел Бернулли может оказаться нестабильной, и потребуются аккуратность при использовании разложений в ряд вида (5) и (6).

Таким образом, в настоящей работе показано, что функция $\mathcal{F}_s(x)$ связана с другими, более известными и широко используемыми специальными функциями – неполной гамма-функцией и неполной дзета-функцией Римана (или функцией Дебая), а также функцией полилогарифма. Отметим, тем не менее, что формула (23) при $n = 3, 4, \dots$ может быть переписана в виде

$$\frac{\mathcal{F}_n(x)}{n!} = \zeta(n) + \frac{1}{1 - e^x} + \ln(1 - e^{-x}) - \sum_{j=0}^{n-2} \frac{x^j}{j!} B_{n-j-1}(-x), \quad (24)$$

где $B_s(x)$ – функция Бозе–Эйнштейна (см., например, [21]), т. е. функция Блоха–Грюнайзена целочисленного порядка выражается в терминах функций Бозе–Эйнштейна других порядков. Пока еще не ясно, можно ли использовать найденные соотношения для вычисления функции Блоха–Грюнайзена.

Благодарности. Автор глубоко признателен рецензенту за полезные и ценные замечания и предложения. Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Министерства науки Республики Сербия (исследовательские проекты № 142025, 144004).

Список литературы

- [1] J. M. Ziman, *Electrons and Phonons*, Clarendon Press, Oxford, 2001.
- [2] J. Bass, W. P. Pratt Jr., P. A. Schroeder, *Rev. Modern Phys.*, **62**:3 (1990), 645–744.
- [3] S. S. Kubakaddi, *Phys. Rev. B*, **75**:7 (2007), 075309, 7 pp.
- [4] A. Bid, A. Bora, A. Raychaudhuri, *Phys. Rev. B*, **74**:3 (2006), 035426, 8 pp., arXiv: cond-mat/0607674.
- [5] L. Mazov, *Phys. Rev. B*, **70**:5 (2004), 054501, 5 pp.
- [6] J. Shen, M. Fang, Y. Zheng, H. Wang, Y. Lu, Z. Xu, *Physica C*, **386** (2003), 663–666.
- [7] H. Takagi, B. Batlogg, H. L. Kao, J. Kwo, R. J. Cava, J. J. Krajewski, W. F. Peck Jr., *Phys. Rev. Lett.*, **69**:20 (1992), 2975–2978.

- [8] D. Varshney, N. Kaurav, *J. Low Temper. Phys.*, **141**:3–4 (2005), 165–178.
- [9] М. Абрамовиц, И. Стиган (ред.), *Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами*, Наука, М., 1979.
- [10] Б. С. Павлов, Л. Д. Фаддеев, “Теория рассеяния и автоморфные функции”, *Краевые задачи математической физики и смежные вопросы теории функций*. 6, Зап. научн. сем. ЛОМИ, **27**, Изд-во “Наука”, Ленинград. отд., Л., 1972, 161–193.
- [11] Yu. V. Matiyasevich, *Hidden life of Riemann’s zeta function 1. Arrow, bow, and targets*, arXiv: 0707.1983.
- [12] Yu. V. Matiyasevich, *Hidden life of Riemann’s zeta function 2. Electrons and trains*, arXiv: 0709.0028.
- [13] M. V. Berry, *Nonlinearity*, **21**:2 (2008), T19–T26.
- [14] M. V. Berry, J. P. Keating, *SIAM Rev.*, **41**:2 (1999), 236–266.
- [15] L. Lewin, *Polylogarithms and Associated Functions*, North-Holland, New York, 1981.
- [16] D. Cvijović, *Proc. R. Soc. Lond. Ser. A*, **463**:2080 (2007), 897–905, arXiv: 0911.4452.
- [17] Y. Igasaki, H. Mitsuhashi, *Phys. Status Solidi A*, **99**:2 (1987), K111–K115.
- [18] M. Deutsch, *J. Phys. A*, **20**:13 (1987), L811–L813.
- [19] S. Paszkowski, *Numer. Algorithms*, **20**:4 (1999), 369–378.
- [20] B. A. Mamedov, I. M. Askerov, *Phys. Lett. A*, **362**:4 (2007), 324–326.
- [21] Д. Свижович, *ТМФ*, **161**:3 (2009), 400–405.

Поступила в редакцию 11.05.2010