Эфф. вычисление связных средних в каждом порядке разложения (1) для $S(\beta)$ (а также частичное суммирование к.-л. подпоследовательностей членов этого разложения) проводится, как правило, с использованием графич. техники, вполне аналогичной технике *Фейнмана диаграмм*, где вместо причинных ф-ций Грина, характерных для квантовой теории поля, применяются т.н. мацубаровские ф-ции Грина (см. *Грина функция* в статистич. физике). В рамках Т. т. в. имеет место теорема (Уорд и Латтинжер [2]) о стационарности (точнее, минимальности) функционала свободной энергии F по отношению к вариациям полной ф-ции Грина или массового оператора; частный случай этой теоремы, соответствующий обобщённому *среднего поля приближению*, эквивалентен т.н. статистическому вариационному принципу Н. Н. Боголюбова (1956), согласно которому $F \leqslant \min\{F_0 + \langle \mathscr{H}_1 \rangle_0\}$. Согласно этой теореме, для F_1 может быть получено формальное замкнутое выражение в виде т.н. интеграла по константе связи (см., напр., [4, 7]), через полную электронную ф-цию Грина G_λ и соответствующий массовый оператор M_λ или через полную фононную ф-цию Грина D_λ и соответствующий поляризац. оператор Π_λ след. вида (в символич. записи):

$$F_1 = \int_0^\lambda (d\lambda'/\lambda') G_{\lambda'} M_{\lambda'} \quad \text{или} \quad F_1 = \int_0^\lambda (d\lambda'/\lambda') D_{\lambda'} \Pi_{\lambda'}.$$

Практич. вычисление слагаемых, входящих в осн. ф-лы Т. т. в. (1) и (3), основано обычно на записи гамильтониана взаимодействия H_1 в представлении вторичного квантования с помощью ферми-, бозе- или паули-операторов. Соответственно при вычислениях средних в (3) и (1) используется температурное обобщение *Вика теоремы* о спариваниях, доказанное К. Блохом и Де Доминисисом [3] для ферми- и бозе-операторов и С. В. Тябликовым и В. А. Москаленко [5] — для паули-операторов. Построение Т. т. в. для классич. физ. систем существенно упрощается по сравнению с квантовыми благодаря тому, что для коммутирующих в этом случае при любых значениях β_i сомножителей $\mathscr{H}_1(\beta_i)$ величина $S(\beta)$ превращается из хронологич. Р-экспоненты в обычную, для к-рой кумулянты $F_1^{(n)}$ любого порядка вычисляются значительно проще; напр., в первом порядке по взаимодействию $F_1^{(1)} = \lambda \langle \mathscr{H}_1 \rangle_0$, а во втором $F_1^2 = (-\lambda^2 \beta/2) \langle (\mathscr{H}_1 - \langle \mathscr{H}_1 \rangle_0)^2 \rangle_0$. Существует обобщение Т. т. в. на случай возмущений $\mathscr{H}_1$, явно зависящих от времени t (напр., при вычислении ф-ций линейной реакции системы на такое возмущение, а также кинетич. коэффициентов, согласно *Грина — Кубо формулам*). В этом случае при построении аналога S-матрицы для неравновесного статистич. оператора используется как мнимое, так и обычное время, так что соответствующая диаграммная техника значительно усложняется (см., напр., Л. Каданов, Г. Бейм [6]).

Примеры применения Т. т. в. для разл. типов физ. систем (напр., для неидеальных газов низкой плотности с короткодействием — т.н. газовое приближение или для системы частиц с дальнодействующим кулоновским взаимодействием — т.н. плазменное приближение) подробно рассмотрены в монографии [7] (см. также в ст. *Вириальное разложение, Майера диаграммы* в статистич. физике). Т. т. в. широко используется также для анализа физ. свойств систем, описываемых *спиновым гамильтонианом*, выше критич. точки фазового перехода; напр., для сильно магнитных систем [8] строятся т.н. высокотемпературные разложения для намагниченности, восприимчивости и т.п., к-рые затем анализируются методом *Паде аппроксимации* с целью нахождения *критических показателей*.

Лит.: 1) Matsubara T., A new approach to quantum-statistical mechanics, «Progr. Theoret. Phys.», 1955, v. 14, p. 351; 2) Luttinger J. M., Ward J. C., Ground-state energy of the many-fermion system, «Phys. Rev.», 1960, v. 118, p. 1417; 3) Bloch C., De Dominicis C., Undeveloppement du potentice de Gibbs nombre de porticuels, «Nucl. Phys.», 1958, v. 7, p. 459; 4) Бонч-Бруевич В. Л., Тябликов С. В., Метод функций Грина в статистической механике, М., 1961, § 12; 5) Тябликов С. В., Москаленко В. А., Теорема о статистических средних для паули-операторов, «ДАН СССР», 1964, т. 158, с. 839; 6) Каданов Л., Бейм Г., Квантовая статистическая механика, пер. с англ., М., 1964; 7) Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е., Методы квантовой теории поля в статистической физике, М., 1962; 8) Тябликов С. В., Методы квантовой теории магнетизма, 2 изд., М., 1975. *Ю. Г. Рудой.*

ТЕРМОДИНАМИ́ЧЕСКИЕ ПАРА́МЕТРЫ — см. *Параметры состояния.*

ТЕРМОДИНАМИ́ЧЕСКИЕ ПОТЕНЦИА́ЛЫ — ф-ции объёма, темп-ры, давления, плотности и др. параметров макроскопич. термодинамич. системы. К Т. п. относятся внутр. энергия, энтальпия, энергия Гельмгольца (свободная энергия), энергия Гиббса и т.д. Подробнее см. *Потенциалы термодинамические, Термодинамика.*

ТЕРМОДИНАМИ́ЧЕСКИЕ СТЕ́ПЕНИ СВОБО́ДЫ — см. *Степени свободы, Гиббса правило фаз.*

ТЕРМОДИНАМИ́ЧЕСКИЙ ПРЕДЕ́Л — предел отношения экстенсивных термодинамич. величин к числу частиц N (или объёму V), когда N стремится к бесконечности при фиксированном уд. объёме $v = V/N$. Напр., для свободной энергии (*Гельмгольца энергии*) $F(T, V, N)$ Т. п.

$$\lim_{N\to\infty,\ V\to\infty,\ V/N=\text{const}} F(T, V, N)/N = f(T, v),$$

где T — темп-ра, $f(T, v)$ — свободная энергия на одну частицу. Существование Т. п. в системе взаимодействующих частиц доказано Л. Ван Ховом (L. Van Hove, 1949) для *канонического распределения Гиббса* и Ч. Янгом и Т. Ли (C. N. Yang, T. D. Lee, 1952) — для *большого канонического распределения Гиббса.*

Лит.: Рюэль Д., Статистическая механика. Строгие результаты, пер. с англ., М., 1971, гл. 3. *Д. Н. Зубарев.*

ТЕРМОДИНАМИ́ЧЕСКОЕ РАВНОВЕ́СИЕ — см. *Равновесие термодинамическое.*

ТЕРМОДИНАМИ́ЧЕСКОЕ СОСТОЯ́НИЕ — равновесное макроскопич. состояние *термодинамической системы*, к-рое фиксируется заданием параметров состояния, представляющих собой измеряемые макроскопич. приборами ср. величины определ. набора характеристик системы. Конкретный выбор этих параметров неоднозначен и определяется тем, каким способом рассматриваемая равновесная система выделяется из среды окружающих её тел и др. систем (т. е. видом контакта системы и окружения). Обычно используется один из четырёх вариантов такого выбора: 1) адиабатически изолированная система (система выделена стенками, не допускающими через себя потоки энергии и частиц) — фиксируются энергия системы $\mathscr{E}$, объём V, число частиц N и внеш. поля X; 2) система в термостате (система выделена с помощью теплопроводящих стенок и находится в равновесии с др. термодинамич. системой, выполняющей роль термометра или термостата) — фиксируются темп-ра T или $\Theta = kT$ (энергия $\mathscr{E}$ уже не фиксируется точно), а также V, N, X; 3) система выделена воображаемыми стенками (величины $\mathscr{E}$ и N точно не фиксированы) — в качестве параметров состояния используются Θ, V, X и хим. потенциал μ; 4) вариант 2, но с подвижной стенкой (система «под поршнем», выполняющим роль мембраны манометра, объём V уже точно не фиксирован) — параметрами состояния являются Θ, давление P, N и X. В термодинамич. пределе, $N \to \infty$, $V/N = \text{const}$, все четыре варианта оказываются эквивалентными, т. к. различия в граничных условиях проявляются как негарантированные малые поправки.

При выборе параметров в варианте 1 *потенциалом термодинамическим*, содержащим в себе всю информацию о равновесных свойствах системы, является *энтропия* $S = S(\mathscr{E}, V, N, X)$, в варианте 2 — свободная энергия (*Гельмгольца энергия*) $F = \mathscr{E} - \Theta S/k = F(\Theta, V, N, X)$, в варианте 3 — введённый Гиббсом потенциал $\Omega = F - \mu N = \Omega(\Theta, V, X, \mu)$ и в варианте 4 — *Гиббса энергия* (потенциал Гиббса) $G = F + PV = G(\Theta, P, X, N)$. Если зафиксировать условие 1, то энтропия при стремлении системы к равновесному состоянию достигает своего макс. значения, при фиксир. условиях 2, 3, 4 соответственно потенци-