Н.Н. Горобей, А.С. Лукьяненко
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
Санкт-Петербург, Россия, n.gorobey@mail.ru

ЭНЕРГИЯ КОЛЕБАНИЙ И ТЕМПЕРАТУРА АДИАБАТИЧЕСКИ ИЗОЛИРОВАННОГО ТЕЛА

Аннотация

Определено понятие температуры адиабатически изолированного тела и найдена ее связь с энергией тела. Формально температура получается путем дифференцирования логарифма статистической суммы по полной энергии тела. Показано, что фактически температура определяется энергией колебаний, которая получается вычитанием суммарной упругой энергии механической деформации и термического расширения из полной энергии.

Ключевые слова: матрица плотности, температура, изолированное тело, энергия, ковариан.

Введение

Вопросы, касающиеся термодинамических параметров изолированного тела, в частности понятия температуры, возникают в связи с термоупругим эффектом, в котором наблюдается небольшое изменение температуры тела при его адиабатическом механическом деформировании [1,2]. При этом под вопросом оказывается возможность использования канонического распределения Гиббса, поскольку оно предсказывает ненулевые флуктуации энергии, тогда как у изолированного тела энергия постоянна [3]. В данной работе для изолированного тела будет использовано микроканоническое распределение. Переход осуществляется следующим образом. Статистическая сумма канонического ансамбля Гиббса может быть представлена в виде [4]:

$$Z(\beta) = \int_0^{\infty} M(E) \exp(-\beta E) dE, \quad (1)$$

где $M(E)$ - плотность состояний, $\beta = 1/k_B T$. Интеграл в (1) имеет вид преобразования Лапласа [5]. Тогда обратное преобразование Лапласа определяет функцию плотности состояний [6]:

$$M(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{+i\infty} Z(\beta) \exp(\beta E) d\beta. \quad (2)$$

Температуру изолированного тела определим через среднее значение β для микроканонического распределения [7]:

$$\frac{1}{k_B T} = \frac{\partial \ln M(E)}{\partial E}. \quad (3)$$

Наконец, статистическую сумму канонического ансамбля Гиббса найдем как след статистического оператора,

$$Z(\beta) = \text{Tr} \hat{\rho}(\beta), \quad (4)$$

где статистический оператор, в свою очередь, является решением параболического уравнения (полагаем постоянную Планка $\hbar = 1$) [4]

$$-\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial \beta} = \hat{H} \hat{\rho} \quad (5)$$

с начальным условием $\hat{\rho}(0) = \hat{1}$, $\hat{H}$ - оператор Гамильтона для рассматриваемого тела.

При определении температуры изолированного тела по формуле (3) возникает вопрос. Согласно (3), эта температура зависит от энергии тела E . Однако, при механическом нагружении тело приобретает статическую энергию упругой деформации, которая, очевидно, не связана напрямую с внутренним теплом и температурой тела. Если принять во внимание нелинейность сил межатомного взаимодействия (ангармонизм) к механической деформации тела добавляется тепловая [8]. В работе [9] высказано предположение, что суммарная упругая энергия всех видов стационарной деформации тела должна быть вычтена из его полной энергии E , а остаток мы называем энергией колебаний и напрямую связываем с температурой тела. В данной работе получено обоснование этого предположения непосредственно в рамках вычислений.

Температура изолированного ансамбля осцилляторов

Рассмотрим изолированный ансамбль N ангармонических осцилляторов. Функцию Лагранжа отдельного осциллятора запишем в виде:

$$L = \frac{\dot{x}^2}{2} - \frac{\omega^2 x^2}{2} + \frac{gx^3}{3}. \quad (6)$$

Предполагается также слабое взаимодействие между осцилляторами, которое обеспечивает перераспределение энергии, но несущественное в динамике осциллятора ($\omega \tau \gg 1$, τ - время релаксации). Потенциальную энергию $-Fx$ внешней силы, действующей на осциллятор, мы не включаем в функцию Лагранжа (6), дабы не ошибиться в балансе энергии в последующем. Саму силу мы включим в уравнение движения осциллятора.

Начнем решение задачи с уравнения (5) для статистического оператора (матрицы плотности). Согласно [4], решение может быть представлено евклидовым функциональным интегралом (для одного осциллятора) [10]

$$\rho_1(x_1, x_2; \beta) = \int Dx \exp \left[- \int_0^\beta \left(\frac{\dot{x}^2}{2} + \frac{\omega^2 x^2}{2} - \frac{gx^3}{3} \right) d\beta \right], \quad (7)$$

по всем траекториям $x = x(\beta)$ между граничными точками $x_1 = x(0)$, $x_2 = x(\beta)$. Для вычисления интеграла воспользуемся методом перевала [10]. Экстремум действия определяется уравнением

$$\ddot{x} - \omega^2 x = -F - gx^2, \quad (8)$$

в которое мы включили также внешнюю силу F . В гармоническом приближении при $F = 0$ его решение:

$$x(\beta) = x_1 \text{ch} \omega \beta + \frac{x_2 - x_1 \text{ch} \omega \beta}{\text{sh} \omega \beta} \text{sh} \omega \beta. \quad (9)$$

Матрица плотности в этом приближении находится точно и имеет вид:

$$\rho_1(x_1, x_2; B) = \left(\frac{\omega}{2\pi \operatorname{sh} \omega B} \right)^{1/2} \exp \left\{ -\frac{\omega}{2 \operatorname{sh} \omega B} [\operatorname{ch} \omega B (x_1^2 + x_2^2) - 2x_1 x_2] \right\}. \quad (10)$$

Для вычисления статистической суммы $Z_1(B)$ мы полагаем $x_1 = x_2$ и интегрируем по этой переменной:

$$Z_1(B) = \operatorname{sh}^{-1} \frac{\omega B}{2}. \quad (11)$$

Вычислим теперь плотность состояний микроканонического ансамбля N осцилляторов по формуле (2):

$$M(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{+i\infty} \operatorname{sh}^{-N} \frac{\omega\beta}{2} \exp(\beta E) d\beta = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{+i\infty} \exp \left(-N \ln \operatorname{sh} \frac{\omega\beta}{2} + \beta E \right) d\beta. \quad (12)$$

Вычисляя этот интеграл методом перевала, находим стационарную точку показателя экспоненты из уравнения (постоянную Планка восстановим):

$$\operatorname{cth} \frac{\hbar\omega\beta}{2} = \frac{2E}{\hbar\omega N}. \quad (13)$$

Ограничиваясь древесным приближением, из (3) находим температуру изолированного ансамбля гармонических осцилляторов:

$$\frac{1}{k_B T} = \beta, \quad (14)$$

где β определяется формулой (13). В классической области высоких температур получаем:

$$k_B T = \frac{E}{N}, \quad (15)$$

как и следует ожидать по закону равнораспределения энергии. В этом приближении энергия колебаний совпадает с полной энергией.

Энергия колебаний

Включим теперь механическую нагрузку и учтем ангармонизм. Механическая и тепловая деформации тел в реальных условиях сопоставимы, поэтому слагаемые в правой части (8) имеют один порядок. Второе слагаемое называется силой теплового давления [11]. Мы значительно упростим рассмотрение, если заменим эту флуктуирующую силу ее средним значением [8,11]

$$F_T = \frac{2g}{\omega^2} \frac{\omega^2 \langle x^2 \rangle}{2} = \frac{g}{\omega^2} \frac{E}{N}. \quad (16)$$

В этом приближении к решению (9) уравнения (8) следует добавить постоянную деформацию

$$x_F + x_T = \frac{F}{\omega^2} + \frac{g}{\omega^4} \frac{E}{N}. \quad (17)$$

С этой добавкой плотность состояний микроканонического ансамбля осцилляторов имеет вид:

$$M(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{+i\infty} \exp \left[-N \ln \operatorname{sh} \frac{\omega\beta}{2} - N\beta \frac{\omega^2 (x_F + x_T)^2}{2} + \beta E \right] d\beta. \quad (18)$$

Теперь стационарная точка показателя экспоненты определяется из уравнения:

$$\operatorname{cth} \frac{\hbar\omega\beta}{2} = \frac{2E_{osc}}{\hbar\omega N}, \quad E_{osc} = E - N \frac{\omega^2 (x_F + x_T)^2}{2}. \quad (19)$$

Таким образом, стационарная точка определяется энергией колебаний, в которую не входит упругая энергия суммарной деформации [9]. Определим температуру изолированного ансамбля по формуле (3). Здесь надо избежать возможной ошибки, связанной с введением средней силы теплового давления (16). Последовательное (но громоздкое) решение уравнения экстремума действия (8) с точностью до первого порядка теории возмущений по константе ангармонизма g , а затем интегрирование по переменной $x_1 = x_2$, приводит средней силе теплового давления как функции β . Зависимость β от E возникает на следующем этапе вычисления обратного преобразования Лапласа (12). Для избегания громоздких вычислений мы будем пользоваться приближением (16), но при вычислении температуры по формуле (3) дифференцировать F_T по E не будем. Результат таков:

$$\frac{1}{k_B T} = \beta, \quad (20)$$

где β определяется энергией осцилляций по формуле (19). При высоких температурах (β мало) с точностью до первого порядка по константе ангармонизма из (19) находим:

$$k_B T \cong \frac{E}{N} - \frac{F^2}{2\omega^2} - \frac{gF}{\omega^4} \frac{E}{N}. \quad (21)$$

Последнее слагаемое в (21) объясняет термоупругий эффект – уменьшение температуры изолированного ансамбля осцилляторов при их растяжении [1].

Заключение

Результат (21) получен без использования теоремы об адиабатических инвариантах в механике [12,13]. Кроме того, автоматически решается вопрос о балансе энергии в термоупругом эффекте [14] и исключается какое-либо противоречие с первым началом термодинамики в нем [15].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. W. Thompson (Lord Kelvin). Trans. Roy. Soc. Edinburgh **20**, 261 (1853).
2. J.P.Joule. Proc.R.Soc. **8**, 564 (1857).
3. L.D. Landau, E.M. Lifshitz. Statistical Physics, Ed by Butterworth-Heinemann, 3rd edition, (2013).544 p.
4. R.P. Feynman. Statistical Mechanics: A Set Of Lectures, CRC Press, (2018). 372 p.
5. Б.Ван дер Поль, Х.Бремер. Операционное исчисление на основе двустороннего преобразования Лапласа. Издательство иностранной литературы, М. (1952). 507 с.
6. С. Хокинг. В сб. Общая теория относительности, под ред. С Хокинга и В. Израэля. Мир, М. (1983). 463 с.
7. Н.Н. Горобей, А.С. Лукьяненко, А.В. Гольцев. ФТТ, 64, (11), 1808 (2022).
8. С. Kittel. Introduction to Solid State Physics, 8th Edition, Wiley (2004). 704 p.
9. Н.Н. Горобей, А.С. Лукьяненко. НТВ, 1(189), 9 (2014).
10. М.В. Федорюк, Метод перевала, Серия Физико-математическое наследие: математика (математический анализ), (2022). 368 с.
11. В.Р. Регель, А.И. Слуцкер, Э.Е. Томашевский. Кинетическая природа прочности твердых тел. Наука, М. (1974). 560 с.
12. A.I. Slutsker, V.P. Volodin. Thermochim. Acta 247, 111 (1994).
13. L.D. Landau, E.M. Lifshitz. Mechanics, Ed by Butterworth-Heinemann, 3rd edition. (2000). 170 p.
14. А.И. Слуцкер, В.Л. Гиляров, А.С. Лукьяненко. ФТТ, 48 (10), 1832 (2006).

15. I. Stepanov. Journal of Chemical, Biological and Physical Sciences, **10** (2), 51 (2020).
N.N.Gorobey, A.S. Lukyanenko
Department of Physics and Mathematics, Peter the Great Saint-Petersburg Polytechnic
University, Pjlytechnicheskaya 29, 195251, St.Petersburg, Russia.

OSCILLATION ENERGY AND TEMPERATURE OF AN ADIABATIC ISOLATED BODY

Abstract

The concept of temperature of an adiabatically isolated body is defined and its connection with the body's energy is found. Formally, temperature is obtained by differentiating the logarithm of the statistical sum by the total energy of the body. It is shown that in fact, temperature is determined by the energy of oscillations, which is obtained by subtracting the total elastic energy of mechanical deformation and thermal expansion from the total energy.

Keywords: density matrix, temperature, isolated body, energy, covarian