Мороз І.О.
Сумський державний педагогічний університет імені А.С. Макаренка

МЕТОДИЧНІ РЕКОМЕНДАЦІЇ ДО ДОВЕДЕННЯ ТЕОРЕМИ ПРО РІВНОМІРНИЙ РОЗПОДІЛ КІНЕТИЧНОЇ ЕНЕРГІЇ ЗА СТУПЕНЯМИ ВІЛЬНОСТІ В КУРСІ СТАТИСТИЧНОЇ ФІЗИКИ

Розглядається методика доведення теореми про рівномірний розподіл кінетичної енергії за ступенями вільності.
Ключові слова: функція Лагранжа, функція Гамільтона, ступені вільності, рівняння Лагранжа, канонічні рівняння.

Теорема про рівномірний розподіл кінетичної енергії за ступенями вільності відіграє велику роль в класичній фізиці, особливо при поясненні такої важливої властивості тіл як теплоємність. Дійсно, із усіх термодинамічних величин при вивченні статистичної термодинаміки теплоємність, наприклад, кристалів представляє зазвичай найбільший інтерес. Цю величину можна виміряти зі значною точністю, так що є великий запас дослідних даних для порівняння теорії з експериментом. Теплоємність тісно пов'язана також з енергією – величиною, що грає основну роль в статистичній фізиці. Тому студенти повинні не лише застосовувати цю теорему для пояснення вказаних питань, але й зрозуміти доведення цією теореми. Зрозуміло, що докладне доведення цієї теореми може виконати викладач на лекції. Але у наш час, коли зменшилась кількість аудиторних занять і центр ваги у навчальному процесі переноситься на індивідуальну роботу, викладач не завжди має можливість виконувати доведення до кінця, і виносить цілий ряд питань на самостійне опрацювання, яке можливе лише при забезпеченні студентів повноцінною навчально-методичною літературою. Але аналіз навчальних посібників показує, що більшість авторів (наприклад, Л.Д. Ландау, А.М. Федорченко, Я.П. Терлецкий та ін) теорему про рівномірний розподіл енергій доводять у надто загальному і тому складному вигляді, що, зрозуміло, не прийнятно для самостійного опрацювання. Деякі автори (Л.А. Булавін, В.Г. Левіч), навпаки, досить детально і зрозуміло розглядають окремі випадки цієї теореми – розраховують окремо середню енергію, яка приходиться на поступальний, обертальний та коливальний рух молекул. Але при такому підході у студентів може скластись помилкове уявлення, що ця теорема застосовна лише для молекул.

На наш погляд, при розгляді цієї теореми потрібно виходити із біль загальних позицій і використати знання студентів з теорії ймовірності та класичної механіки, що корисно як в контексті міжпредметних зв'язків, так і в розширенні кругозору студентів.

Із класичної механіки відомо, що функція Лагранжа $L = L(q_s, \dot{q}_s, t)$ несе в собі всю інформацію про рух системи тіл (q_s і $\dot{q}_s$ - узагальнені координати й швидкості відповідно, функція Лагранжа це різниця між кінетичною й потенціальною енергіями $L = K - U$ системи). Виконаємо диференціювання функції Лагранжа за часом:

$$\frac{dL}{dt} = \sum_{s=1}^{l}\left(\frac{\partial L}{\partial q_s}\dot{q}_s + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_s}\ddot{q}_s\right) + \frac{\partial L}{\partial t}. \tag{I}$$

Використовуючи рівняння Лагранжа $\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_s} - \frac{\partial L}{\partial q_s} = 0, \quad s = 1, 2, ... l$

(l – кількість ступенів вільності), перепишемо похідну (I) у наступному вигляді:

$$\frac{dL}{dt} = \sum_{s=1}^{l}\left(\dot{q}_s \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial q_s} + \ddot{q}_s \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_s}\right) + \frac{\partial L}{\partial t} = \sum_{s=1}^{l}\frac{d}{dt}\dot{q}_s \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_s} + \frac{\partial L}{\partial t},$$

або $$\frac{d}{dt}\left(\sum_{s=1}^{l}\dot{q}_s\frac{\partial L}{\partial\dot{q}_s}-L\right)=-\frac{dL}{dt}.$$

Якщо зовнішні силові поля і зв'язки стаціонарні (або відсутні), то функція Лагранжа у явному вигляді не може залежати від часу. Тому величина

$$H=\sum_{s=1}^{l}\dot{q}_s\frac{\partial L}{\partial\dot{q}_s}-L=const \qquad \text{(II)}$$

є інтегралом руху. Її називають функцією Гамільтона (гамільтоніан). Легко впевнитись, що для системи, яка складається із матеріальних точок, гамільтоніан дорівнює сумі їх кінетичної й потенціальної енергій $H=K+U$, тобто для термодинамічної системи це внутрішня енергія. Для того щоб впевнитись, що функція Гамільтона дійсно збігається з повною механічною енергією достатньо розглянути системи, яка містить лише одну частинку з повною механічною енергією $E=\frac{m\upsilon^2}{2}+U(x,y,z)=\frac{m}{2}\left(\dot{x}^2+\dot{y}^2+\dot{z}^2\right)+U(x,y,z)$. Елементарний розрахунок функції Гамільтона дає такий же результат.

Використовуючи вирази: $H=K+U$, $L=K-U$, (3) і канонічні рівняння руху ($\dot{p}_s=\frac{\partial H}{\partial q_s}$, $\dot{q}_s=\frac{\partial H}{\partial p_s}$, $s=1,2,...l$), одержимо вираз для кінетичної енергії системи:

$$K=\frac{1}{2}\sum_{s=1}^{l}p_s\frac{\partial H}{\partial p_s}. \qquad \text{(III)}$$

З іншого боку кінетичну енергію системи можна визначити як добуток числа ступенів свободи l на середнє значення $\left\langle\frac{1}{2}p_s\frac{\partial H}{\partial p_s}\right\rangle$ кожного члена суми в (III), тобто: $K = l\left\langle \frac{1}{2} p_s \frac{\partial H}{\partial p_s} \right\rangle$.

Таким чином, для доведення теореми про рівномірний розподіл кінетичної енергії за ступенями вільності необхідно знайти середнє значення величини:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{K}{l} = \left\langle \frac{1}{2} p_s \frac{\partial H}{\partial p_s} \right\rangle.$$

Для визначення середньої енергії, що приходиться на один ступінь свободи будемо використовувати відомі з теорії ймовірності означення середнього і класичний розподіл Гіббса.

Тоді шукане середнє значення буде дорівнювати:

$$\left\langle \frac{1}{2} p_s \frac{\partial H}{\partial p_s} \right\rangle = \int \frac{1}{2} p_s \frac{\partial H}{\partial p_s} d\omega = \frac{1}{2z} \int_{\Gamma} p_s \frac{\partial H}{\partial p_s} e^{\frac{H(p_s)}{\theta}} d\Gamma \, . \tag{V}$$

Тут інтегрування ведеться за всіма узагальненими координатами і за всіма узагальненими імпульсами (p), які відповідають всім узагальненим координатам (степеням свободи), тобто у виразі (V) $2l$ інтегралів. Оскільки $\frac{\partial H}{\partial p_s} = \frac{\partial H_s}{\partial p_s}$ і $H = \sum_{s=1}^{f} H_s$, то у виразі (V) можна виділити окремо інтеграл за імпульсом p_s:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{K}{l} = \left\langle \frac{1}{2} p_s \frac{\partial H}{\partial p_s} \right\rangle = \frac{1}{2z} \int_{2l} p_s \frac{\partial H}{\partial p_s} e^{-\frac{\sum_{s=1}^{l} H_s}{\theta}} d\Gamma_p d\Gamma_q =$$

$$= \frac{1}{2z} \int_{2l-1} dq_1 dq_2 ... dq_l dp_1 dp_2 ... dp_{s-1} dp_{s+1} ... dp_l e^{-\frac{\sum_{s=1, s\neq l}^{l} H_s}{\theta}} d\Gamma_q \cdot \int_{p_s} p_s \frac{\partial H_s}{\partial p_s} e^{-\frac{H_s}{\theta}} dp_s. \tag{VI}$$

Виконаємо інтегрування за частинами в цьому виразі по p_s, врахувавши при цьому, що $H_s = \frac{p_s^2}{2m}$ і при великих p_s інтеграл швидко сходиться. Тому можна перейти до нових границь інтегрування - $(\pm\infty)$:

$$\int_{p_s} p_s \frac{\partial H_s}{\partial p_s} e^{-\frac{H_s}{\theta}} dp_s = -\theta \int_{-\infty}^{+\infty} p_s d\left(e^{-\frac{H_s}{\theta}}\right) = -\theta\left\{ p_s e^{-\frac{H_s}{\theta}} \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{H_s}{\theta}} dp_s \right\}.$$

Перший член у фігурних дужках дорівнює нулю, оскільки $H_s = \frac{p_s^2}{2m}$. Тоді, повертаючи одержане значення інтеграла по p_s в (VI), маємо:

$$\left\langle \frac{1}{2} p_s \frac{\partial H}{\partial p_s} \right\rangle = \frac{\theta}{2} \frac{1}{z} \int_p e^{\frac{H(p)}{\theta}} dp = \frac{\theta}{2} = \frac{kT}{2},$$

що і потрібно було довести (за умовою нормування: $\frac{1}{z} \int_p e^{-\frac{H(p)}{\theta}} dp = 1$).

Відзначимо, що при доведенні теореми ми не конкретизували модель внутрішньої будови системи і під ступенями свободи, як і в класичній механіці, мали на увазі незалежні величини, які однозначно визначають положення частинок чи тіл системи в просторі. Кожному ступеню свободи довільної системи (не обов’язково молекулярної) відповідає узагальнена координата й узагальнений імпульс. Кінетична енергія класичної системи дорівнює: $E = H(p) = \sum_{s=1}^{l} H_s = \sum_{1}^{l} \frac{p_s^2}{2m*}$. Тут p_s і m^* не обов'язково імпульс і маса частинки. Це узагальнені величини. Тому доведена у такому вигляді теорема володіє великою загальністю. Вона справедлива як для молекул газу, так і для молекул рідини, твердого тіла, для частинок, зважених у рідині чи газі, і навіть для макроскопічних тіл, тобто для всіх класичних систем, що знаходяться в термодинамічній рівновазі.

Література

1. *Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшиц. Курс теоретической физики. Т.1. Статистическая физика. М.: Наука, 1964, 567 с.*
2. *Л.А. Булавін, Д.А. Гаврюшенко, В.М. Сисоєв. Молекулярна фізика. -К.: «Знання». 2006, -567 с.*

3. Я.П. Терлецкий. Статистическая физики. М.: Высшая школа, 1973, -277 с.
4. А.М. Федорченко. Вступ до курсу статистичної фізики та термодинаміки. К.: Вища школа, 1973, -187 с.
5. В.Г. Левич. Курс теоретической физики. Т.1. М.: ГИФМЛ, 1962, -695 с.

Аннотация

Рассматривается методика доказательства теоремы о равномерном распределении кинетической энергии за степенями свободы.

Ключевые слова: Функция Лагранжа, функция Гамильтона, степени свободы, уравнения Лагранжа, канонические уравнения.

Annotation

Methodology of proof of theorem is examined about even distribution of kinetic energy after the degrees of liberty.

Keywords: Langrangian, function of Гамільтона, degrees of liberty, equalization of Lagrange, canonical equalizations