13,14

Период, энергия колебаний и температура адиабатически изолированного тела

© Н.Н. Горобей, А.С. Лукьяненко

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: n.gorobey@mail.ru

Поступила в Редакцию 20 ноября 2025 г.
В окончательной редакции 5 декабря 2025 г.
Принята к публикации 10 декабря 2025 г.

Для предложенного ранее определения (обратной) температуры адиабатически изолированного тела в виде производной логарифма плотности состояний канонического распределения по энергии системы найдена связь температуры с минимальным периодом некоторого колебательного движения атомов в стационарном режиме. Вместе с этим показано, что температура определяется энергией колебаний, равной разности полной энергии тела и потенциальной энергии деформации. Деформация, с учетом ангармонизма, равна сумме механической деформации во внешнем силовом поле и теплового расширения. При наличии диссипации или адиабатическом деформировании тела его температура определяется приближенно периодом „почти“ колебательного движения в конфигурационном пространстве.

Ключевые слова: термомеханика, изолированная механическая система, ангармонизм, адиабатическое деформирование.

DOI: 10.61011/FTT.2025.12.62423.336-25

1. Введение

Вопрос о понятии температуры и ее связи с механикой возникает при анализе термоупругого эффекта, в котором наблюдается небольшое изменение температуры тела при его адиабатическом механическом деформировании [1,2]. При этом использование статистической механики в форме канонического распределения Гиббса вызывает сомнение, поскольку оно предсказывает ненулевые флуктуации энергии, тогда как у изолированной системы энергия постоянна [3]. Чисто механическое объяснение термоупругого эффекта, основанное на теореме об адиабатическом инварианте [4], в случае одного осциллятора, предложено в [5]. Здесь параметрическое возбуждение рассматривается в гармоническом приближении, а роль ангармонизма сводится к влиянию механической нагрузки на параметры гармонических колебаний. В первом приближении теории возмущений по константам ангармонизма такого объяснения термоупругого эффекта достаточно. Однако, уже в следующем порядке существенным в том же параметрическом возбуждении будет эффект термического расширения. Целью данной работы является последовательный учет эффектов ангармонизма в термомеханических явлениях.

Для сложной механической системы с нелинейными внутренними силами необходимо использовать статистические методы с подходящим статистическим распределением. Для изолированного тела нам нужно найти замену каноническому распределению [3]. Мы оставим в стороне отклонения от канонического распределения, вызванные другими причинами. Например, в случае, когда „термостат“ имеет конечные размеры [6], или система является неэргодической [7]. Здесь есть также возможности для математических обобщений [8]. В данной работе для изолированной системы будет использовано микроканоническое распределение Гиббса. Переход от канонического распределении к микроканоническому осуществляется следующим образом. Статистическая сумма канонического ансамбля Гиббса может быть представлена в виде [9]:

$$Z(\beta) = \int_0^\infty M(W)\exp(-\beta W)dW, \tag{1}$$

где $M(W)$ — плотность состояний системы, $\beta = 1/k_\mathrm{B}T$. Интеграл в (1) имеет вид преобразования Лапласа [10]. Тогда обратное преобразование Лапласа определяет функцию плотности состояний [11]:

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

Температуру изолированного тела здесь определим через среднее значение β для микроканонического распределения:

$$\frac{1}{k_\mathrm{B}T} = \frac{\partial \ln M(W)}{\partial W}. \tag{3}$$

Очевидно, $M(W)$ совпадает со статистической суммой для изолированной системы, определяемой аналогично [9], но в рамках ковариантной квантовой механики [12]. Наконец, статистическую сумму канонического ансамбля Гиббса находим как след статистического оператора,

$$Z(\beta) = \mathrm{Tr}\,\hat{\rho}\,(\beta) \tag{4}$$

где статистический оператор, в свою очередь, является решением параболического уравнения [9]

$$-\hbar\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial\beta}=\hat{H}\hat{\rho} \tag{5}$$

с начальным условием $\hat{\rho}(0)=\hat{1}$, где $\hat{1}$ — единичный оператор, $\hat{H}$ — оператор Гамильтона рассматриваемой системы.

При определении температуры изолированного тела по формуле (3) возникает вопрос. Согласно (3), эта температура зависит от полной энергии тела W. 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 деформация [13,14]. В работе [15] высказано предположение, что суммарная упругая энергия всех видов стационарной деформации тела должна быть вычтена из его полной энергии W, а остаток мы называем энергией колебаний и напрямую связываем с температурой тела. В данной работе получено обоснование этого предположения в самом общем виде.

2. Период колебаний и температура изолированной механической системы

Конкретизируем вид функции Гамильтона системы во внешнем силовом поле:

$$H=\frac{1}{2}m_{lk}^{-1}p_lp_k+V(q)-F_kq_k, \tag{6}$$

где m_{lk} — положительно определенная, симметричная матрица масс. Предполагаем, что

$$\sum_k F_k=0, \tag{7}$$

а также считаем центр масс покоящимся. Для простоты рассматриваем одноосное силовое поле, в противном случае необходимы дополнительные условия равновесия. Представим матрицу плотности $\rho(q,q';\beta)$ в виде функционального интеграла Фейнмана [9]:

$$\rho(q,q';\beta)=\int Dq\exp\left\{-\int_0^{\hbar\beta}d\beta\left[\frac{1}{2}m_{lk}\dot{q}_l\dot{q}_k+V-F_kq_k\right]\right\}. \tag{8}$$

Здесь действие в показателе экспоненты представлено в евклидовой форме. Полагая $q'=q$ получаем плотность вероятности $\rho(q,q;\beta)$ того, что система будет обнаружена в окрестности точки q конфигурационного пространства, а

$$Z(\beta)=\int d^Nq\rho(q,q;\beta) \tag{9}$$

равно статистической сумме канонического распределения. Это выражение следует подставить в формулу (2) для функции плотности состояний.

Для нахождения плотности состояний $M(W)$ воспользуемся методом перевала [16]. При этом, формируя общий показатель экспоненты под знаком интеграла (2), мы добавим классическому действию слагаемое — βW. Оценке подлежат сразу три интеграла: интеграл по β в формуле (2), N — кратный интеграл по совпадающим координатам (9) (N — число степеней свободы системы) и функциональный интеграл (8). Сначала оценим последние два интеграла. Необходимо найти экстремум евклидова действия в показателе экспоненты в (8) (с добавкой βW) при дополнительных условиях, что траектории являются замкнутыми, $q_k(0)=q_k(\beta)$, а также гладкими: $\dot{q}_k(0)=\dot{q}_k(\beta)$. Последнее вытекает из условия экстремума для интеграла (9): производные действия по координатам совпадающих граничных точек $q_k(0)=q_k(\beta)$ равны нулю. Метод перевала для оценки последних двух интегралов дает экспоненциальное выражение

$$Z(\beta)=\exp\{-\Psi\},$$

где

$$\Psi=\tilde{S}-\frac{1}{2}\ln\det\frac{\delta^2\tilde{S}[\tilde{q}]}{\delta q_k(\beta)\delta q_l(\beta)} \tag{10}$$

— свободная энергия системы. Здесь $\tilde{q}_k(\beta)$ — замкнутая классическая траектория системы в конфигурационном пространстве,

$$\tilde{S}=\int_0^{\hbar\beta}d\beta\left[\frac{1}{2}m_{lk}\dot{\tilde{q}}_k\dot{\tilde{q}}_l+V-F_k\tilde{q}_k-W\right] \tag{11}$$

— действие на классической траектории, а $\delta^2\tilde{S}[\tilde{q}]/\delta q_k(\beta)\delta q_l(\beta)$ — вариационная производная действия второго порядка, вычисленная на классической траектории (однопетлевое приближение).

Чтобы понять о какой замкнутой классической траектории здесь может идти речь, ограничимся вначале квазиклассическим приближением ($\hbar\to 0$), когда вторым слагаемым в (10) можно пренебречь. Подчеркнем, что замкнутая классическая траектория должна быть нетривиальной (отличной от точки минимума потенциала) при заданной ненулевой энергии системы. Тогда метод перевала дает для оценки интеграла (2) условие экстремума по параметру β:

$$H_E-W=0, \tag{12}$$

где

$$H_E=-\frac{1}{2}m_{lk}^{-1}p_lp_k+V(q)-F_kq_k \tag{13}$$

— евклидова функция Гамильтона системы, которое, с учетом $p_k=m_{lk}\dot{q}_l$ дает искомое экстремальное значение β:

$$\hbar\beta_0=\oint\frac{\sqrt{m_{lk}dq_ldq_k}}{\sqrt{2(V-F_kq_k-W)}}, \tag{14}$$

где интегрирование ведется по экстремальной замкнутой траектории системы в конфигурационном пространстве.

Но в евклидовом представлении такой траектории, помимо тривиальной траектории, не существует. Однако, здесь мы учитываем [11], что интегрирование в (2) ведется по мнимым значениям β, так что величина

$$i\hbar\beta_0 = \oint \frac{\sqrt{m_{lk}dq_l dq_k}}{\sqrt{2(W - V + F_k q_k)}}, \qquad (15)$$

имеет осмысленное значение в динамике с ненулевой энергией и с вещественным временем. Это действительно так, поскольку (15) равно времени движения по некоторой замкнутой траектории в конфигурационном пространстве системы. Мы будем исходить из того, что рассматриваемая изолированная система консервативна и несингулярна, ее траектория в конфигурационном (и фазовом) пространстве, при заданной энергии W, целиком лежит в ограниченной области конфигурационного пространства. Это значит, что траектория со временем попадет в сколь угодно малую окрестность начальной точки. Если воспользоваться теорией устойчивости решений обыкновенных дифференциальных уравнений Ляпунова [17], можно ожидать, что малая вариация начальных данных приведет к пересечению траектории с начальной точкой. Значит, периодические решения в рассматриваемой механической задаче существуют. Коли так, повторение указанного движения имеет большие периоды $n\hbar\beta_0$. Нас интересует наименьший период колебаний системы при заданной энергии W. Получив решение задачи экстремума в области механического движения системы с вещественным временем, следует вернуться в евклидову область статистической механики. Для того чтобы статистическая сумма канонического распределения имела смысл и была вещественной, в формуле (1) следует произвести замену $W \to -iW$ (см. [11]). Такую же замену произведем в формулах (2) и (3). После этого получим также математически осмысленное выражение для температуры:

$$\frac{1}{k_{\mathrm{B}}T} = i\beta_0 = \frac{1}{\hbar}\oint \frac{\sqrt{m_{lk}dq_l dq_k}}{\sqrt{2(W - V + F_k q_k)}}. \qquad (16)$$

Однако мы не можем принять T_0 в качестве температуры тела без учета второго слагаемого в (10). Его смысл проясняется в гармоническом приближении или, иначе, модели Эйнштейна твердого тела как ансамбля гармонических осцилляторов. В этом приближении детерминант сводится к произведению [9]:

$$\prod_{k=1}^{N}\left(\operatorname{sh}\frac{\hbar\omega_k\beta}{2}\right)^2, \qquad (17)$$

где ω_k — частоты осцилляторов (фононов) в ансамбле, и равен $Z_N^{-2}(\beta)$, где $Z(N)(\beta)$ — статистическая сумма канонического ансамбля осцилляторов. Отсюда мы можем найти плотность состояний $M(W)$ и температуру ансамбля по формулам (2) и (3), как это сделано в [12]. Заметим, что в гармоническом приближении также существует периодическое движение с наименьшим периодом — это коллективное колебание, соответствующее оптическому фонону наибольшей частоты ω_k. При этом потенциальная энергия гармонических колебаний и, соответственно, частоты фононов не зависят от коллективного фонового движения. Поэтому все построения в [12] остаются в силе, а квазиклассический вклад в температуру (16) мы исключим выбором ее начала отсчета. Возвращаясь к общему выражению для свободной энергии (10), получаем следующее условие экстремума для оценки интеграла (2):

$$\frac{d\Psi}{d\beta} = W, \qquad (18)$$

которое является обыкновенным дифференциальным уравнением с основной переменной β. Именно это уравнение необходимо использовать для учета ангармонизма. Теперь коллективное колебательное движение атомов в меру ангармонизма модулирует потенциальную энергию и частоты фононов. Как мы уже знаем, решение уравнения (18) относительно β следует искать в виде β_0 (16) на периодической траектории системы с минимальным периодом. Однако, для физически осмысленного определения температуры, из найденного решения $T_0 = 1/k_{\mathrm{B}}\beta_0$ следует вычесть предельное значение температуры при $W \to 0$. Тем самым, при минимальной энергии температура, как и следует, будет равна нулю. На заключительном этапе в формулах (2) и (3) снова делаем замену $W \to -iW$. Таким образом, мы получим определение температуры изолированной системы с учетом ангармонизма. Полученный результат показывает, что температура эффективно определяется именно энергией колебаний

$$W - V\big(\langle q_k\rangle\big) + F_k\langle q_k\rangle,$$

где, с учетом ангармонизма, $\langle q_k\rangle$ равно сумме механической и тепловой деформаций. При этом потенциальная энергия внешних сил $F_k\langle q_k\rangle$ также включена в баланс энергии.

3. Заключение

Мы рассмотрели идеализированный случай изолированного тела. В реальных телах всегда имеется диссипация, связанная с пластической деформацией, и потеря энергии, например, за счет теплового излучения. В таком случае можно говорить о „почти“ периодических циклах в атомной динамике тела, и соответственно, о приближенном определении температуры. К этому следует прибавить и адиабатический характер механического деформирования, который означает не только тепловую изоляцию тела, но и медленное изменение нагрузки со временем, допускающее установление почти периодического режима внутренней динамики атомов. Баланс энергии при адиабатическом механическом деформировании рассмотрен в [18].

Конфликт интересов

Авторы сообщают об отсутствии конфликта интересов.

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] Л.Д. Ландау, Е.М. Лившиц. Статистическая физика. Часть 1. Наука, М. (1976). 584 с.
[4] Л.Д. Ландау, Е.М. Лившиц. Механика. Гос. изд. физико-математической литературы, М. (1958). 206 с.
[5] A.I. Slutsker, V.P. Volodin. Thermochim. Acta **247**, 111 (1994).
[6] П.К. Ильин, Г.В. Коваль, А.М. Савченко. Вестник Московского университета, серия 3, физика, астрономия. **5**, 35 (2020).
[7] A.Yu. Cherny, T. Engl, S. Flach. Phys. Rev. A **99**, 023603 (2019).
[8] Е.Н. Бакиев, Д.В. Накашидзе, А.М. Савченко. Вестник Московского университета, серия 3, физика, астрономия. **6**, 45 (2020).
[9] R.P. Feynman. Statistical Mechanics: A Set Of Lectures, CRC Press (2018). 372 p.
[10] Б. Ван дер Поль, Х. Бремер. Операционное исчисление на основе двустороннего преобразования Лапласа. Издательство иностранной литературы, М. (1952). 507 с.
[11] С. Хокинг. В сб. Общая теория относительности / Под ред. С. Хокинга и В. Израэля. Мир, М. (1983). 463 с.
[12] Н.Н. Горобей, А.С. Лукьяненко. ФТТ **67**, *5*, 915 (2025).
[13] Ч. Киттель. Введение в физику твердого тела. Наука, М. (1978). 792 с.
[14] В.Р. Регель, А.И. Слуцкер, Э.Е. Томашевский. Кинетическая природа прочности твердых тел. Наука, М. (1974). 560 с.
[15] Н.Н. Горобей, А.С. Лукьяненко. НТВ **1(189)**, 9 (2014).
[16] М.В. Федорюк, Метод перевала, Серия Физико-математическое наследие: математика (математический анализ), М. (2022). 368 с.
[17] А.М Ляпунов, Общая задача об устойчивости движения. Гостехиздат, М.-Л. (1950). 472 с.
[18] А.И. Слуцкер, В.Л. Гиляров, А.С. Лукьяненко. ФТТ **48**, *10*, 1832 (2006).

Редактор Т.Н. Василевская