Научная статья
УДК 372.853
ББК 74.489
ГРНТИ 14.35.09
ВАК 5.8.2.
PACS 01.40.-d
OCIS 000.2060
MSC 00A79

Методические аспекты описания термодинамических свойств технических систем с помощью энтропии газа в каноническом ансамбле

И. А. Малова [1]

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Ульяновский государственный педагогический университет имени И. Н. Ульянова», 432071, Ульяновск, Россия

Поступила в редакцию 15 марта 2024 года
После переработки 18 марта 2024 года
Опубликована 12 июня 2024 года

Аннотация. Рассматривается проблема вычисления энтропии газа в каноническом ансамбле, анализируются термодинамические свойства газов и связь между макроскопическими и микроскопическими параметрами системы. Развивается статистический подход к описанию термодинамических свойств газов с использованием энтропии на основе методов статистической физики. Результаты исследования могут быть применены для развития методов расчёта энергетических и кинетических свойств газов.

Ключевые слова: газ, энтропия, свойства энтропии, канонический ансамбль, статистический подход, термодинамический процесс

Введение

Исследование энтропии идеального газа в каноническом ансамбле представляет собой важную задачу в статистической физике и термодинамике. Актуальность исследования энтропии газа в каноническом ансамбле заключается в изучении термодинамических свойств газов и определении связи между макроскопическими параметрами системы и микроскопическим движением частиц. Научная новизна заключается в разработке новых подходов к описанию поведения газов на основе квантовой механики и статистической физики. Оценка возможностей практической реализации включает применение полученных результатов для разработки более точных моделей и методов расчёта энергетических и кинетических свойств газов, что может способствовать развитию технологий в области термодинамики.

Целью исследования является теоретические описание термодинамических процессов и циклов, используемых в работе тепловых машин и холодильников, с помощью выражений энтропии в канонического ансамбле. Задачи исследования включают в себя

[1]E-mail: ira.malova.02@mail.ru

анализ научных литературных источников по описанию термодинамических свойств систем с помощью выражения энтропии в каноническом ансамбле, раскрытие теоретического вопроса по описанию термодинамических процессов систем с помощью выражения энтропии канонического ансамбля, построение графиков термодинамических циклов систем по полученным выражениями энтропии на различных диаграммах.

Объектом является газ в качестве рабочего тела тепловых систем. Предметом исследования является термодинамические свойства энтропии газов, используемых в тепловых системах в каноническом ансамбле.

Гипотеза исследования состоит в том, что если внедрить теоретические сведения о методах вычисления энтропии газов тепловых систем в каноническом ансамбле, то можно усовершенствовать методологию преподавания раздела по статистической физике и термодинамике в рамках модульного курса теоретической физики в университетах.

Обзор

Проблема определения энтропии идеального газа возникла ещё в XIX веке, когда Рудольф Клаузиус ввёл понятие энтропии как функцию состояния системы. Исследование энтропии идеального газа в каноническом ансамбле имеет долгую историю, начиная с работ Людвига Больцмана в конце XIX века. Больцман ввёл понятие энтропии и сформулировал знаменитое уравнение $S = k \ln w$, которое связывает энтропию S с плотностью вероятности состояний w. Это уравнение лежит в основе статистической физики и используется для описания свойств систем в равновесии. Однако определение энтропии для идеального газа оказалось неоднозначным, так как существует несколько способов описания микросостояния системы. История проблемы связана с развитием статистической физики. Основная цель статистической физики состоит в том, чтобы связать макроскопическое описание термодинамических систем с микроскопическим механическим описанием систем, состоящих из большого числа частиц. Для этого нужно сопоставить равновесное состояние в термодинамическом смысле (описываемое термодинамическими параметрами) с механическими состояниями, которые описываются координатами и импульсами частиц. Проблема была решена Гиббсом на основе представлений об ансамбле систем и вероятностных распределений, которые теперь носят его имя.

В каноническом ансамбле энтропия газа решающим образом связана с его термодинамическим поведением. Производство энтропии открытой системы, связанной с резервуаром в каноническом состоянии, включает в себя два ключевых теоретико-информационных вклада: взаимную информацию система-ванна и относительную энтропию, отражающую смещение окружающей среды от равновесия [1, 2]. В каноническом ансамбле энтропия газа максимальна при равновесии, характеризующемся общей температурой T и максимальной полной энтропией. Энтропия газа в каноническом ансамбле строго определена для гибридных квантово-классических систем, причём классические и квантовые пределы совпадают с обычными каноническими ансамблями [2]. Более того, для идеального Бозе-газа ниже температуры конденсации Бозе-Эйнштейна корреляционная часть энтропии компенсируется вкладом основного состояния, что упрощает описание термодинамических свойств газа в каноническом ансамбле за счёт исключения основного состояния и предположения отсутствия корреляция между возбуждёнными уровнями [3]. Эти открытия подчеркивают сложную взаимосвязь между энтропией, статистическими ансамблями и термодинамическими характеристиками газов в каноническом ансамбле.

Канонический ансамбль определяет энтропию на основе энергии, поддерживая отрицательные температуры. Канонический ансамбль предсказывает правильные термодинамические свойства газов, в отличие от микроканонических определений [4]. На протяжении более 100 лет одной из центральных концепций статистической механики был микроканонический ансамбль, который обеспечивает способ расчёта термодинамической энтропии для заданной энергии. Недавно возник спор между двумя различными определениями энтропии, основанными на микроканоническом ансамбле: энтропия Больцмана, определяемая плотностью состояний при заданной энергии, и энтропия Гиббса, определяемая суммой или интегралом плотности состояний ниже заданной энергии. Критическое различие между следствиями этих определений относится к понятию отрицательных температур, которые по определению Гиббса не могут существовать. В статье [4] ставится под сомнение фундаментальное предположение о том, что микроканонический ансамбль должен использоваться для определения энтропии. В статье [4] основывают анализ на недавно предложенном каноническом определении энтропии как функции энергии. В статье [4] исследуются предсказания Больцмана, Гиббса и канонических определений для множества классических и квантовых моделей. В статье [4] представлены результаты, которые подтверждают справедливость концепции отрицательной температуры, но не для всех моделей с уменьшающейся плотностью состояний. В статье [4] обнаружено, что только каноническая энтропия последовательно предсказывает правильные термодинамические свойства, в то время как микроканонические определения энтропии, включая определения Больцмана и Гиббса, верны только для ограниченного набора моделей. Для моделей, демонстрирующих фазовый переход первого рода, в статье [4] показано, что использование термодинамического предела в его обычном понимании может скрыть суть физики.

Энтропия газа в каноническом ансамбле может быть получена из классической статистической суммы, которая включает функции плотности вероятности в фазовом пространстве и факторы Больцмана, как обсуждается в статье [5]. Классический канонический ансамбль использует функцию плотности вероятности в фазовом пространстве, в которой энергия в факторе Больцмана для квантовой системы заменяется классическим гамильтонианом. Классическая статистическая сумма представляет собой интеграл от этого фактора Больцмана по фазовому пространству. Можно искусственно разделить классическую статистическую сумму на множитель, содержащий степени постоянной Планка, чтобы получить результаты, согласующиеся с квантовой механикой при высоких температурах. В статье [5] проиллюстрируем это на примере идеального газа и рассчитаем истечение из небольшого отверстия. Закон Дюлонга и Пти выведен для гармонического потенциала. В статье [5] вычисляются классические средние канонических координат и импульсов. В статье [5] выводится теорема вириала для средних по времени и используем её для рассмотрения неидеального газа, взаимодействие частиц которого рассчитывается с использованием парной функции распределения. В статье [5] обсуждается использование канонических преобразований при вычислении статистических сумм и вычисляем статистическую сумму вращающейся многоатомной молекулы с использованием якобианов.

В каноническом ансамбле энтропия газа непрерывна и определяется распределением вероятностей по собственным состояниям энергии, что обеспечивает термодинамическую согласованность для конечных систем [6]. Микроканонический ансамбль уже давно стал отправной точкой развития термодинамики из статистической механики. Однако этот подход создает две проблемы. Во-первых, он предсказывает, что энтропия определяется только дискретным набором энергий для конечных квантовых систем, тогда как термодинамика требует, чтобы энтропия была непрерывной функцией энергии. Во-вторых, он не удовлетворяет условию устойчивости $(\Delta S/\Delta U_0)$ для переходов первого рода как с классическими, так и с квантовыми системами. Свендсен недавно показал, что источник этих проблем лежит в самом микроканоническом ансамбле, который содержит только собственные состояния энергии и исключает их линейные комбинации. Напротив, если интересующая система когда-либо находилась в тепловом контакте с другой системой, она будет описываться распределением вероятностей по многим собственным состояниям, которое эквивалентно каноническому ансамблю для достаточно больших систем. Новотный и другие исследователи недавно подтвердили эту картину динамическими численными расчётами для квантово-механической модели, в которых они показали подход к каноническому распределению до 40 квантовых спинов. Упрощая задачу и вычисляя только равновесные свойства, в статье [6] можно распространить демонстрацию на более чем миллион частиц.

В каноническом ансамбле на энтропию идеального Бозе-газа влияют корреляции между флуктуациями частиц и вкладами основного состояния, особенно в области конденсации Бозе-Эйнштейна [7]. Ограничение фиксированного общего числа частиц приводит к корреляции между флуктуациями частиц в разных состояниях канонического ансамбля. В статье [7] показано, что ниже температуры конденсации Бозе-Эйнштейна корреляционная часть энтропии идеального Бозе-газа компенсируется вкладом основного состояния. Таким образом, в области конденсации Бозе-Эйнштейна термодинамические свойства газа в каноническом ансамбле могут быть точно описаны в упрощённой модели [7], исключающей основное состояние и предполагающей отсутствие корреляции между возбуждёнными уровнями.

В работе [8] используется метод наиболее вероятного распределения, чтобы показать, что энтропия для общего ансамбля может быть выражена максимальным значением функции беспорядка теории информации при условии соблюдения набора ограничений, соответствующих ансамблю. В работе [8] подробно проиллюстрируем это на примере большого канонического ансамбля с двумя видами частиц. В работе [8] рассматривается ряд других ансамблей практически путём проверки, включая ансамбль, который относится к функции Масье, которая представляет собой преобразование Лежандра энтропии. Используя коэффициент вырождения для суммирования по уровням энергии, числам частиц и объемам, в работе [8] показано, что все ансамбли могут быть связаны аналогичным образом со связанными с ними термодинамическими функциями.

Энтропию газа в каноническом ансамбле можно определить с помощью канонической статистической суммы и выражений равновесия, полученных в рамках метода Максвелла-Больцмана [9]. Метод термодинамики Максвелла-Больцмана используется исключительно для исследования систем, содержащих только независимые частицы. В отличие от метода Максвелла-Больцмана, метод ансамбля Гиббса использовался для исследования систем, состоящих из зависимых частиц. Принципы, типы и основные предположения ансамблей Гиббса были представлены с особым вниманием к каноническому ансамблю. Методы Максвелла-Больцмана и канонического ансамбля связаны между собой. Определены ограничивающие условия, необходимые ограничения и множители Лагранжа. В работе [9] исследовано каноническое распределение, вероятность нахождения и наиболее типичное распределение любого члена, находящегося в определенном квантовом состоянии. Как и метод Максвелла-Больцмана, равновесные выражения термодинамических величин определяются с использованием канонической статистической суммы. В работе [9] получены выражения для канонической статистической суммы для независимых, различимых и неразличимых частиц в разбавленном пределе. Это позволяет получить термодинамические выражения, дублирующие результаты, полученные при реализации метода Максвелла–Больцмана. Наконец, в работе [9] метод канонического ансамбля используется для определения константы равновесия, чтобы показать, что наиболее вероятное распределение является единственным значимым распределением, и получить термодинамические выражения для кристаллического твёрдого тела в соответствии с моделью Эйнштейна.

В микроканоническом ансамбле конфигурационная энтропия газа включает в себя функцию энтропии Реньи, а не Тсаллиса, из-за равенства температур и точного представления нестабильности вблизи порога вращения [10]. В статье [10] исследуется конфигурационное распределение вероятностей одноатомного газа с конечным числом частиц N в микроканоническом ансамбле. В статье [10] приводятся два аргумента, почему термодинамическая энтропия конфигурационной подсистемы включает в себя энтропийную функцию Реньи, а не Тсаллиса. Первый аргумент состоит в том, что температура конфигурационной подсистемы равна температуре кинетической подсистемы. Второй аргумент состоит в том, что правильно воспроизводится неустойчивость маятника, возникающая при энергиях, близких к порогу вращения.

Статистическая энтропия модели решёточного газа в каноническом ансамбле выражается как многочастичное корреляционное разложение, как обсуждается в статье [11]. В статье [11] получена формула, выражающая статистическую энтропию модели решеточного газа как многочастичное корреляционное разложение в большом каноническом и каноническом ансамблях. В статье [11] выяснены отличия от аналогичного разложения в случае континуума. В статье [11] в качестве примера рассматривается одномерная модель Изинга.

Энтропия твёрдоквадратного решёточного газа в каноническом ансамбле точно оценивается с использованием методов моделирования Монте-Карло, что даёт ценную информацию о поведении системы [12].

Методы и материалы

Идеальный газ является одной из ключевых моделей для описания поведения вещества в условиях различных температур и давлений. Идеальный газ — это модель, используемая в молекулярной физике и термодинамике для описания поведения газов при определённых условиях. Рассмотрим идеальный газ как систему, состоящую из большого числа частиц, взаимодействующих друг с другом и с окружающей средой. Канонический ансамбль — это статистическая модель, которая позволяет описывать макроскопические свойства системы, состоящей из большого числа частиц. Понимание энтропии газов позволяет прогнозировать термодинамические свойства газов, что имеет значительное практическое применение в различных областях прикладной науки и техники.

Модель идеального газа является простейшим приближением для описания термодинамических свойств газов в физико-технических системах. Для описания термодинамических свойств газов используется статистический подход. Статистическое описание газов в каноническом ансамбле учитывает флуктуации энергии в термодинамической системе. Одной из важнейших термодинамических функций является энтропия. Изоэнтропический процесс, происходящей при постоянной энтропии, используется в термодинамических циклах тепловых машин и тепловых двигателей, поэтому тема работы является актуальной темой исследования в области современной статистической физики и термодинамики. Впервые производится сравнение выражений энтропии для реальных газов в термодинамических циклах тепловых машин и холодильников с выражением энтропии идеального газа тепловых машин и холодильников в каноническом ансамбле.

Методы исследования включают в себя статистический метод исследования термодинамических систем для исследования энтропии газов в тепловых машинах и холодильниках, термодинамический метод и математические методы для решения уравнений термодинамики. Для исследования энтропии газа в каноническом ансамбле используются методы статистической физики в применении к рассмотрению распределения вероятностей частиц газа по различным энергетическим состояниям при постоянной температуре и объёме. Основной подход заключается в том, чтобы вычислить вероятность каждого микросостояния системы и затем вычислить энтропию с помощью уравнения Больцмана. Материалы исследования включают в себя литературные источники по термодинамике газов в тепловых машинах и холодильниках. Теоретическая значимость заключается в том, что раскрыт вопрос об энтропии идеального газа и реальных газов, тепловых машин и холодильников в каноническом ансамбле для курса статистической физики и термодинамики. Практическая значимость работы заключается в том, что термодинамические процессы и циклы лежат в основе работы современных тепловых машин и холодильников.

Результаты

Энтропия идеального газа в каноническом ансамбле является функцией состояния системы, которая зависит от микросостояний газа и его термодинамических параметров. Энтропия газа пропорциональна логарифму числа доступных микросостояний системы и может быть вычислена с помощью уравнения $S = k \ln w$. Энтропия газа является аддитивной величиной. Энтропия газа в каноническом ансамбле может быть использована для вычисления термодинамических свойств системы, таких как теплоёмкость и внутренняя энергия. Энтропия газа состоит из двух составляющих: энтропии поступательного движения молекул и энтропии вращательного движения молекул газа. Энтропия газа зависит от температуры, объёма и количества частиц.

Изменение энтропии в политропных процессах может быть вычислено по формулам:

$$\Delta S = C_V \ln \frac{T_2}{T_1} + R \ln \frac{V_2}{V_1} \ , \tag{1}$$

$$\Delta S = C_p \ln \frac{T_2}{T_1} - R \ln \frac{p_2}{p_1} \ , \tag{2}$$

$$\Delta S = C_V \ln \frac{p_2}{p_1} + C_p \ln \frac{V_2}{V_1} \ . \tag{3}$$

Из формулы (1) при $V = const$ получим изменение энтропии в изохорном процессе:

$$\Delta S = C_V \ln \frac{T_2}{T_1} \ . \tag{4}$$

Из формулы (1) при $p = const$ получим изменение энтропии в изобарном процессе:

$$\Delta S = C_p \ln \frac{T_2}{T_1} \ . \tag{5}$$

В адиабатическом процессе изменение энтропии равно нулю.

$$\Delta S = 0 \ . \tag{6}$$

Адиабатический процесс часто называют изоэнтропийным процессом. Адиабатический процесс характеризуется тем, что он происходит без те5плообмена ($\delta Q = 0$).

Формула для расчёта энтропии идеального газа для изотермического процесса:

$$S = \nu R \ln \frac{V_2}{V_1} \ , \tag{7}$$

где S – энтропия газа, ν – количество вещества газа, R – универсальная газовая постоянная, V_1 и V_2 – начальный и конечный объёмы газа соответственно.

Формула для расчёта энтропии идеального газа для адиабатического процесса:

$$S = \nu C_V \ln \frac{T_2}{T_1} \ , \tag{8}$$

где S – энтропия газа, ν – количество вещества газа, C_V – молярная теплоёмкость газа при постоянном объёме, T_1 и T_2 – начальная и конечная температуры газа соответственно.

Проанализированы выражения для определения энтропии идеального газа в каноническом ансамбле. Энтропия идеального газа в каноническом ансамбле определяется как сумма двух составляющих: энтропии поступательного движения молекул и энтропии вращательного движения молекул. В результате исследования изучена зависимость энтропии газов от температуры, объёма и количества частиц газа. Энтропия идеального газа зависит от температуры, объёма и количества частиц газа. При увеличении температуры или уменьшении объёма энтропия увеличивается, а при увеличении количества частиц энтропия уменьшается. Выявлена связь энтропии с другими термодинамическими функциями. Показано, что энтропия идеального газа связана с другими термодинамическими функциями, такими как внутренняя энергия, свободная энергия и потенциал Гиббса.

Заключение

В ходе исследования были получены новые знания об энтропии газа в каноническом ансамбле. Исследование позволило подтвердить теоретические предположения о поведении энтропии идеального газа в каноническом ансамбле, которые соответствуют физическим принципам статистической физики.

Вычисление энтропии идеального газа в каноническом ансамбле с помощью уравнения $S = k \ln w$ является важным результатом, так как оно позволяет связать термодинамические свойства системы с её статистическими характеристиками. Аддитивность энтропии газа в каноническом ансамбле имеет важные последствия для термодинамики, так как она позволяет вычислять энтропию сложных систем путём сложения энтропий составляющих сложной системы. Независимость энтропии газа в каноническом ансамбле от внешних условий, таких как давление и объём, имеет важные последствия для термодинамики, так как она позволяет вычислять энтропию системы в различных условиях. Использование энтропии газа в каноническом ансамбле для вычисления термодинамических свойств системы, таких как теплоёмкость и внутренняя энергия, является важным результатом, так как оно позволяет связать статистические характеристики системы с её термодинамическими свойствами.

По результатам работы могут быть сформулированы следующие выводы:

1. энтропия играет важную роль при описании термодинамических процессов в газах, поскольку вычисление энтропии идеального газа в каноническом ансамбле с помощью уравнения $S = k \ln w$ является важным результатом, так как оно позволяет связать термодинамические свойства системы с её статистическими характеристиками, что имеет важные последствия для термодинамики;
2. изучение энтропии газов в каноническом ансамбле позволяет лучше понять термодинамические свойства газов, например, аддитивность энтропии газа в каноническом ансамбле имеет важное значение для термодинамики, так как она позволяет вычислять энтропию сложных систем путём сложения энтропий составляющих системы, что является важным результатом для термодинамики;
3. результаты исследования могут быть использованы для улучшения прогнозирования поведения термодинамических систем с газами в различных условиях на основе вычисления термодинамических свойств системы, таких как теплоёмкость и внутренняя энергия, являющейся важным результатом, позволяющим связать статистические характеристики системы с термодинамическими свойствами системы.

В результате исследования энтропии газа в каноническом ансамбле были выявлены термодинамические свойства газов и установлена связь между макроскопическими и микроскопическими параметрами системы. Это позволило развить статистический подход к описанию поведения газов на основе методов статистической физики. Полученные результаты имеют важное значение для развития термодинамики.

Гипотеза исследования, состоящая в том, что если внедрить теоретические сведения о методах вычисления энтропии газов тепловых машин и холодильников в каноническом ансамбле, то можно усовершенствовать методологию преподавания раздела по статистической физике и термодинамике в рамках модульного курса теоретической физики в университетах, подтверждена полностью.

Полученные результаты подтверждают гипотезу исследования и позволяют более глубоко понять природу энтропии идеального газа в каноническом ансамбле. Однако некоторые вопросы остаются открытыми, например, влияние внешних факторов на энтропию газа или связь энтропии с другими макроскопическими параметрами системы.

Полученные результаты могут быть использованы для дальнейшего теоретического изучения физических свойств газов и разработки новых методов описания и анализа термодинамических свойств реальных газов, используемых в современных технических системах. Полученные результаты также указывают на необходимость дальнейшего изучения энтропии газа в каноническом ансамбле с целью повышения точности существующих моделей и методов расчёта энергетических и кинетических свойств газов. Это может привести к созданию более эффективных и экологически безопасных технологий в термодинамике.

Список использованных источников

1. Pathria R. K., Beale Paul D. The canonical ensemble // Statistical Mechanics. — Elsevier, 2022. — P. 39–91. — URL: http://dx.doi.org/10.1016/b978-0-08-102692-2.00012-0.

2. Entropy and canonical ensemble of hybrid quantum classical systems / J. L. Alonso [et al.] // Physical Review E. — 2020. — oct. — Vol. 102, no. 4. — P. 042118. — URL: http://dx.doi.org/10.1103/PHYSREVE.102.042118.

3. Ptaszynski Krzysztof, Esposito Massimiliano. Ensemble dependence of information-theoretic contributions to the entropy production // Physical Review E. — 2023. — may. — Vol. 107, no. 5. — P. 052102. — URL: http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.107.L052102.

4. Comparison of canonical and microcanonical definitions of entropy / Michael Matty [et al.] // Physica A: statistical mechanics and its applications. — 2017. — feb. — Vol. 467. — P. 474–489. — URL: http://dx.doi.org/10.1016/J.PHYSA.2016.10.030.

5. Sekerka Robert F. Classical canonical ensemble // Thermal Physics. — Elsevier, 2015. — P. 337–358. — URL: http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-12-803304-3.00020-X.

6. Griffin William, Matty Michael, Swendsen Robert H. Finite thermal reservoirs and the canonical distribution // Physica A: statistical mechanics and its applications. — 2017. — oct. — Vol. 484. — P. 1–10. — URL: http://dx.doi.org/10.1016/J.PHYSA.2017.04.143.

7. Canonical ensemble ground state and correlation entropy of Bose-Einstein condensate / Anatoly Svidzinsky [et al.] // New Journal of Physics. — 2018. — jan. — Vol. 20, no. 1. — P. 013002. — URL: http://dx.doi.org/10.1088/1367-2630/AA910A.

8. Sekerka Robert F. Entropy for any ensemble // Thermal Physics. — Elsevier, 2015. — P. 397–403. — URL: http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-12-803304-3.00022-3.

9. Stephanos Joseph J., Addison Anthony W. Canonical ensemble // Chemical thermodynamics and statistical aspects. — Elsevier, 2023. — P. 643–670. — ISBN: 9780443152955. — URL: http://dx.doi.org/10.1016/b978-0-443-15295-5.00004-1.

10. Baeten Maarten, Naudts Jan. On the thermodynamics of classical micro-canonical systems // Entropy. — 2011. — jun. — Vol. 13, no. 6. — P. 1186–1199. — URL: http://dx.doi.org/10.3390/E13061186.

11. Prestipino Santi, Giaquinta Paolo V. Statistical entropy of a lattice-gas model: multiparticle correlation expansion // Journal of Statistical Physics. — 2000. — Vol. 98, no. 1/2. — P. 507–509. — URL: http://dx.doi.org/10.1023/A:1018603728546.

12. Meirovitch Hagai. A Monte Carlo study of the entropy, the pressure, and the critical behavior of the hard-square lattice gas // Journal of Statistical Physics. — 1983. — mar. — Vol. 30, no. 3. — P. 681–698. — URL: http://dx.doi.org/10.1007/BF01009683.

Сведения об авторах:

Ирина Александровна Малова — студент факультета физико-математического и технологического образования ФГБОУ ВО «Ульяновский государственный педагогический университет имени И. Н. Ульянова», Ульяновск, Россия.

E-mail: ira.malova.02@mail.ru

ORCID iD 0009-0009-2279-7632

Web of Science ResearcherID JRW-5338-2023

Original article
PACS 01.40.-d
OCIS 000.2060
MSC 00A79

Methodological aspects of describing the thermodynamic properties of technical systems using gas entropy in the canonical ensemble

I. A. Malova

Ulyanovsk State Pedagogical University, 432071, Ulyanovsk, Russia

Submitted March 15, 2024
Resubmitted March 18, 2024
Published June 12, 2024

Abstract. The problem of calculating the entropy of a gas in a canonical ensemble is considered, the thermodynamic properties of gases and the relationship between macroscopic and microscopic parameters of the system are analyzed. A statistical approach is being developed to describe the thermodynamic properties of gases using entropy based on the methods of statistical physics. The results of the study can be used to develop methods for calculating the energy and kinetic properties of gases.

Keywords: gas, entropy, entropy properties, canonical ensemble, statistical approach, thermodynamic process

References

1. Pathria R. K., Beale Paul D. The canonical ensemble // Statistical Mechanics. — Elsevier, 2022. — P. 39–91. — URL: http://dx.doi.org/10.1016/b978-0-08-102692-2.00012-0.

2. Entropy and canonical ensemble of hybrid quantum classical systems / J. L. Alonso [et al.] // Physical Review E. — 2020. — oct. — Vol. 102, no. 4. — P. 042118. — URL: http://dx.doi.org/10.1103/PHYSREVE.102.042118.

3. Ptaszynski Krzysztof, Esposito Massimiliano. Ensemble dependence of information-theoretic contributions to the entropy production // Physical Review E. — 2023. — may. — Vol. 107, no. 5. — P. 052102. — URL: http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.107.L052102.

4. Comparison of canonical and microcanonical definitions of entropy / Michael Matty [et al.] // Physica A: statistical mechanics and its applications. — 2017. — feb. — Vol. 467. — P. 474–489. — URL: http://dx.doi.org/10.1016/J.PHYSA.2016.10.030.

5. Sekerka Robert F. Classical canonical ensemble // Thermal Physics. — Elsevier, 2015. — P. 337–358. — URL: http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-12-803304-3.00020-X.

6. Griffin William, Matty Michael, Swendsen Robert H. Finite thermal reservoirs and the canonical distribution // Physica A: statistical mechanics and its applications. — 2017. — oct. — Vol. 484. — P. 1–10. — URL: http://dx.doi.org/10.1016/J.PHYSA.2017.04.143.

7. Canonical ensemble ground state and correlation entropy of Bose-Einstein condensate / Anatoly Svidzinsky [et al.] // New Journal of Physics. — 2018. — jan. — Vol. 20, no. 1. — P. 013002. — URL: http://dx.doi.org/10.1088/1367-2630/AA910A.

8. Sekerka Robert F. Entropy for any ensemble // Thermal Physics. — Elsevier, 2015. — P. 397–403. — URL: http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-12-803304-3.00022-3.

9. Stephanos Joseph J., Addison Anthony W. Canonical ensemble // Chemical thermodynamics and statistical aspects. — Elsevier, 2023. — P. 643–670. — ISBN: 9780443152955. — URL: http://dx.doi.org/10.1016/b978-0-443-15295-5.00004-1.

10. Baeten Maarten, Naudts Jan. On the thermodynamics of classical micro-canonical systems // Entropy. — 2011. — jun. — Vol. 13, no. 6. — P. 1186–1199. — URL: http://dx.doi.org/10.3390/E13061186.

11. Prestipino Santi, Giaquinta Paolo V. Statistical entropy of a lattice-gas model: multi-particle correlation expansion // Journal of Statistical Physics. — 2000. — Vol. 98, no. 1/2. — P. 507–509. — URL: http://dx.doi.org/10.1023/A:1018603728546.

12. Meirovitch Hagai. A Monte Carlo study of the entropy, the pressure, and the critical behavior of the hard-square lattice gas // Journal of Statistical Physics. — 1983. — mar. — Vol. 30, no. 3. — P. 681–698. — URL: http://dx.doi.org/10.1007/BF01009683.

Information about authors:

Irina Aleksandrovna Malova — student of the Faculty of Physical and Technological Education of the Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education "Ulyanovsk State Pedagogical University", Ulyanovsk, Russia.

E-mail: ira.malova.02@mail.ru

ORCID iD 0009-0009-2279-7632

Web of Science ResearcherID JRW-5338-2023