

**\*Молдабекова М.С., Асембаева М.К., Федоренко О.В.**

Казахский национальный университет им. аль-Фараби, г. Алматы, Казахстан

\*e-mail: mairamold@mail.ru

## **НЕКОТОРЫЕ ВОПРОСЫ ВЕРОЯТНОСТНОГО ОПИСАНИЯ ЭНТРОПИИ ПРИ ИЗУЧЕНИИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ФИЗИКИ**

Рассмотрена проблема объяснения студентам вероятностного описания энтропии при изучении второго закона термодинамики. Наше обсуждение ограничивается описанием равновесных свойств, которые могут быть вычислены как наиболее вероятные величины. Подчеркивается, что вклад в производство энтропии дают только необратимые процессы. Показывается, что энтропия является случайной переменной, среднее значение которой имеет макроскопический физический смысл. Обращается внимание на то, что система в равновесном состоянии флуктуирует около некоторого среднего состояния. Отмечается, что между макроскопическим поведением системы и флуктуациями имеется четкое разграничение. Показано, что методы статистической механики дают не только описание среднего поведения и способ вычисления вероятностей флуктуаций любой величины около ее среднего значения. Обращается внимание на то, что закон возрастания энтропии Больцмана интерпретируется как тенденция к возрастанию разупорядоченности. Этот метод позволяет определить наиболее вероятное макросостояние системы или наиболее вероятное распределение подсистем в системе.

**Ключевые слова:** энтропия, необратимые процессы, вероятное макросостояние системы.

Moldabekova M.S., Asembayeva M.K., Fedorenko O.V.

Al Farabi Kazakh national university, Almaty, Kazakhstan,

\*e-mail: mairamold@mail.ru

### **Some questions of the probabilistic description of entropy in the study of molecular physics**

The explanation problem of the probabilistic description of entropy in the study of the second law of thermodynamics to students is considered. Our discussion is limited by the description of the equilibrium properties that can be calculated as the most probable values. It is emphasized that only irreversible processes contribute to the production of entropy. It is shown that entropy is a random variable whose mean value has a macroscopic physical meaning. Attention is drawn to the fact that the system fluctuates near an average state in the equilibrium condition. It is noted that there is a clear distinction between the macroscopic behavior of the system and the fluctuations. It is shown that the methods of statistical mechanics give not only a description of the average behavior and a method for calculating the fluctuations probability of any magnitude near its mean value. Attention is drawn to the fact that the Boltzmann law of entropy increment is interpreted as a tendency to the disorder increase. This method allows us to determine the most likely macrostate of the system or the most probable distribution of subsystems in the system.

**Key words:** entropy, irreversible processes, probable macrostate of the system.

Молдабекова М.С., Асембаева М.К., Федоренко О.В.  
 әл-Фараби ат. Қазақ ұлттық университеті, Алматы қ., Қазақстан,  
 e-mail: mairamold@mail.ru

### Молекулалық физиканы оқытуда энтропия ықтималдығын сипаттаудың кейбір мәселелері

Термодинамиканың екінші заңын оқытуда студенттерге энтропияның ықтималдық сипаттамасын түсіндіру мәселесі қарастырылған. Біздің талқылауымыз, ең ықтимал мәндерді есептеуге болатын тепе-тең қасиеттерді сипаттаумен шектеледі. Ол энтропия өндірісінің үлесінде қайтымсыз процестер ғана болатынын көрсетеді. Энтропия ол, орташа мәні макроскоптық физикалық мазмұнға ие кездейсоқ айнымалы ретінде көрсетілген. Бұл жүйе тепе-теңдік күйде кейбір орташа күйлер айналасында өзгеріп отырғанына назар аудартады. Ол жүйенің макроскоптық күйінің арасындағы және нақты айырмашылық ауытқуы бар екені көрсетілді. Статистикалық механика әдістері, ол орташа күйлерді сипаттауды ғана емес ондағы ауытқулардың ықтималдығын есептеу тәсілдерінде кез келген орташа мәннің шамасында тербелетіндігі көрсетілген. Больцман энтропиясының өсу заңы, ол ретсіздіктің бұзылуын ұлғайту үрдісі ретінде түсіндіріледі, бұл шын мәнінде назар аударуды қажет етеді. Бұл әдіс ең ықтимал макрожүйелер немесе ең ықтимал таралуды, яғни, жүйе ішіндегі жүйелерде анықтауға мүмкіндік береді.

**Түйін сөздер:** энтропия, қайтымсыз процестер, жүйенің ықтималдылық макрожүйі.

#### Введение

Содержание профессиональных учебных программ высшего образования предусматривает изучение цикла базовых дисциплин, в который входит молекулярная физика. В современной технологии обучения в учебном процессе необходимо развивать учебную мотивацию, что предполагает использование различных методов обучения, которые должны привести к улучшению качества учебно-методического обеспечения. В этой связи необходимо обратить внимание на развивающие ресурсы содержания физического образования, в частности, на содержание отдельных тем дисциплины. Отсюда вытекает насущная потребность поиска путей и способов формирования общепрофессиональных знаний, умений и навыков в предметной области и улучшение качества обучения. Многолетний опыт преподавания нами этой дисциплины показал, что некоторые вопросы вызывают у обучающихся затруднения в понимании основ теории. Рассмотрим, насколько оправданным является обсуждение некоторых вопросов вероятностного описания энтропии при изучении темы «Статистический характер второго начала термодинамики».

#### Постановка проблемы и обсуждение

Обсуждение начинаем со второго закона термодинамики, согласно которому, энтропия адиабатически изолированной системы должна монотонно возрастать до тех пор, пока в системе

не установится состояние термодинамического равновесия. Следует проанализировать члены, входящие в приращение энтропии  $dS$ : первый  $d_e S$ , описывающий перенос энтропии через границы системы (поток энтропии, обусловленный взаимодействием с окружающей средой); второй  $d_i S$ , означающий энтропию, произведенную в системе (часть энтропии, обусловленная изменением внутри системы) [1]:

$$dS = d_e S + d_i S. \quad (1)$$

Далее необходимо ответить на вопрос: «Как открытые системы отличаются от изолированных в выражении для изменения энтропии?» И естественно обсудить в  $dS$  член, соответствующий обмену. Объяснить, почему в противоположность величине  $d_i S$ , которая никогда не бывает отрицательной, член  $d_e S$  не имеет определенного знака, т.е. может быть положительным, отрицательным или равным нулю. Обсудить в этой ситуации роль взаимодействия системы с окружающей средой [2]. И прийти к заключению о том, что согласно второму закону производство энтропии внутри системы, обусловленное необратимыми процессами – положительно; никогда не имеет отрицательного значения:

$$d_i S \geq 0. \quad (2)$$

Следует обсудить знак равенства, т.е. какому состоянию он соответствует. Затем проанализировать следствия из выражений (1) и (2) в сле-

дующем виде. Если  $d_e S = 0$ , то из выражений (1) и (2) следует, что  $dS \geq 0$  – форма записи второго начала термодинамики. Для замкнутых систем, которые могут обмениваться с окружающей средой только тепловой энергией, согласно теореме Карно-Клаузиуса, следует

$$dS \geq \frac{dQ}{T}, \quad (3)$$

что является также известной формой записи второго начала термодинамики.

Для открытых систем общие утверждения в выражениях (1) и (2) остаются справедливыми. Вклад в производство энтропии дают только необратимые процессы. Примерами необратимых процессов могут служить химические реакции, диффузия, теплопроводность, вязкость, распад нестабильных частиц и др. Также из второго начала термодинамики следует, что необратимые процессы приводят к односторонности времени: положительное направление времени второе начало связывает с возрастанием энтропии.

Для изолированной системы поток энтропии  $d_e S$  равен нулю и получаем:

$$dS = d_i S \geq 0, \quad d_e S = 0. \quad (4)$$

Выражение (4) равноценно классической формулировке второго закона термодинамики, утверждающей, что энтропия никогда не уменьшается и это её свойство дает критерий, позволяющий обнаруживать необратимые процессы.

Только после обсуждения свойств энтропии системы обращаем внимание на то, что при макроскопическом описании системы мы интересуемся ограниченным числом переменных, описывающих микроскопическое состояние. Эти переменные могут относиться к экстенсивным свойствам (объем, энтропия и т.д.) макроскопически бесконечно малых областей внутри системы, конечно, которые должны иметь такие размеры, чтобы в них содержалось большое число молекул, составляющих систему. Объясняется, что некоторые результаты относительно среднего по времени поведения этих усредненных переменных можно получить на строгой основе статистической механики.

Согласно постулату Больцмана об энтропии, между вероятностью состояния  $w$  и его энтропией  $S$  существует следующее соотношение:

$$S = k \ln w, \quad (5)$$

где  $k$  – постоянная Больцмана.

Энтропия при этом является случайной переменной, только среднее значение которой имеет макроскопический физический смысл. Мы получаем возможность на уровне теории случайных процессов обсуждать свойства и поведение энтропии. В статистической механике можно дать и другое определение энтропии. В этом случае энтропия определяется через функцию распределения по возможным состояниям по так называемому «постулату Гиббса об энтропии». Энтропия, определенная по выражению (5) относится к состоянию, характеризуемому максимальной вероятностью. Состояние с максимальной вероятностью, часто называется равновесным состоянием. Хотя мы знаем, что система в равновесном состоянии флуктуирует около некоторого среднего состояния. Следует заметить, что в термодинамике не делается различия между равновесным состоянием и равновесным распределением.

При объяснении студентам возникновения флуктуаций в системе мы исходим из того, что они обусловлены тем, что в процессе хаотического движения молекулы пересекают границы объема, в котором находятся и поэтому число молекул в каждом небольшом объеме является существенно непредсказуемой величиной. Порождаемые этим механизмом отклонения называем флуктуациями. Благодаря этим случайным флуктуациям поведение системы меняется, но между макроскопическим поведением и флуктуациями имеется четкое разграничение. Становится понятным, что при анализе проблемы флуктуаций в системе естественно воспользоваться подходами теории вероятностей.

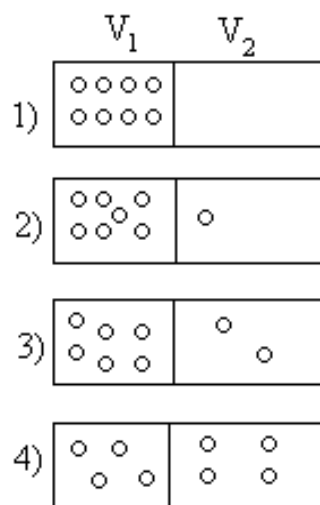


Рисунок – Распределение молекул в ящике с воображаемой перегородкой

Закон возрастания энтропии интерпретируется как тенденция к возрастанию разупорядоченности, поскольку в статистической механике энтропия ассоциируется с числом допустимых состояний при определенных условиях, наложенных на систему. Следовательно, чем меньше допустимых состояний имеет система, тем более она упорядочена. Например, в газе молекулы слабо взаимодействующие.

Рассмотрим ящик (рис), разделенный воображаемой перегородкой, где в начальном состоянии 8 молекул находились лишь в одной половине, тогда со временем молекулы перейдут к состоянию с равномерным распределением по всему объему [3]. Очевидно, что количество способов, которыми реализуются переходы, представляют собой различные комбинации, достигая 70 при равном распределении молекул, т.е. по четыре на каждой половине. Ясно, что конечное состояние с четырьмя молекулами в каждом объеме представляет максимальный беспорядок и менее структурировано, нежели исходное состояние. Таким образом, если определить энтропию как меру числа доступ-

ных микросостояний, становится очевидным, что процесс на рисунке отражает тенденцию к необратимому росту разупорядоченности. Из изложенного следует, что в изолированной системе, в отсутствие внешних воздействий, после переходного процесса, осуществляющегося необратимо, в системе установится конечное состояние равновесия.

Тем самым, статистическая теория раскрывает вероятностный характер второго закона термодинамики для необратимых процессов.

### Заключение

В равновесном состоянии энтропия максимальна, и, следовательно, равновесное состояние отвечает максимуму неопределенности по сравнению с неопределенностью любого неравновесного состояния, через которое система проходила в процессе развития. В результате, будет более эффективно использован значительный научно-теоретический материал, представляющий основу для формирования профессиональной компетентности.

### Литература

- 1 Пригожин И. Введение в термодинамику необратимых процессов. – М.: Комкнига, URSS, 2001. – 160 с.
- 2 Молдабекова М.С. Термодинамика необратимых процессов: Учебное пособие. – Алматы: Қазақ университеті, 2004. – 102 с.
- 3 Аскарова Ә.С., Молдабекова М.С. Молекулалық физика: Оқулық. – Алматы: Қазақ университеті. – 246 б.

### References

- 1 Prigozhin I. Vvedenie v termodinamiku neobratimyyh processov, M.: Komkniga, URSS, 2001. –160 s. (in russ.)
- 2 Moldabekova M.S. Termodinamika neobratimyyh processov: Uchebnoe posobie. – Almaty: Qazaq universiteti, 2004. – 102 s. (in russ.)
- 3 Askarova Ә.S., Moldabekova M.S. Molekulalyq fizika: Oqulyq. – Almaty: Qazaq universiteti. – 246 b. (in kaz.)