

熱力學與最小作用量原理概論

A Connection between Thermodynamics and The Principle of Least Action

張志振

工研院機械所 先進製造核心技術組 石墨烯專案小組

摘要：古典力學 (Classical Mechanics) 與熱力學 (Thermodynamics) 皆為機械工程學基礎理論，而工程的基礎在於強固的理論。本文試將論述兩者之間的關聯，此舉或盼能為研究人員提供一個關於熱力學的較簡明論述，或盼從而獲得一個簡化處理熱力學問題的方法。

Abstract : Classical mechanics and thermodynamics are two of the basic theories of mechanical engineering. The connection between these two theories is discussed in this article, in hopes of offering engineers a brief statement or a simplified processing method for thermodynamics.

關鍵詞：熱力學、最小作用量原理、配分函數

Keywords : Thermodynamics, The principle of least action, Partition function

前言

熱力學為許多優秀工程師們處理內燃機問題時所逐步建立的科學，熱力學與古典力學的連結除了些許假設外幾乎已無縫接軌 [1]。然而藉由量子論，兩者之間或另可構築一條順暢軌道予以連結，而構築此軌道的基石就是最小作用量原理。

古典力學與最小作用量原理

“物含妙理總堪尋”。當樓頂上的鴿子飛降至鄰近較矮樓頂時，其飛行路徑通常並非直線，而是近似一條最速滑降線 [2]，如圖 1(a) 所示。無獨有偶的，當一顆鋼珠 (粒子)，自某個位勢頂端滑降，不計摩擦力，其路徑亦非直線，而是一條最小作用量路徑，如圖 1(b) 所示。

最小作用量原理就是漢彌爾頓 (W. Hamilton, 1805-1865) 原理，為求精準起見，茲以數學的語

言描述最小作用量路徑，其型式如下 [2]：

$$\delta \int L dt = 0 \quad (1)$$

其中： $\int L dt$ 定義為作用量； $L \equiv K - V$ 稱為拉氏量，其中 $K \equiv m(\text{速度})^2/2 = m[(dx/dt)^2 + (dy/dt)^2]/2$ 為粒子動能， m 為粒子質量； $V \equiv V(x, y)$ 為粒子所遭遇之位勢； x, y 為二維空間直角座標， t 為時間；積分上下限為 t_2 及 t_1 ，分別為粒子運動的初始時間與終端時間；變分算符 δ 之作用乃是：當路徑偏離最小作用量路徑，其變分值大於零；當路徑為最小作用量路徑，其變分值等於零。依變分法，上式可轉化為歐勒 (L. Euler, 1707-1783) 拉格朗治 (J. Lagrange, 1736-1813) 方程式 [2]：

$$\partial L / \partial x_i = d[\partial L / \partial \dot{x}_i] / dt \quad (2a)$$

其中 $i=1, 2$ ；位移 $x_1 \equiv x$ ， $x_2 \equiv y$ ；速度 $v_i = dx_i /$

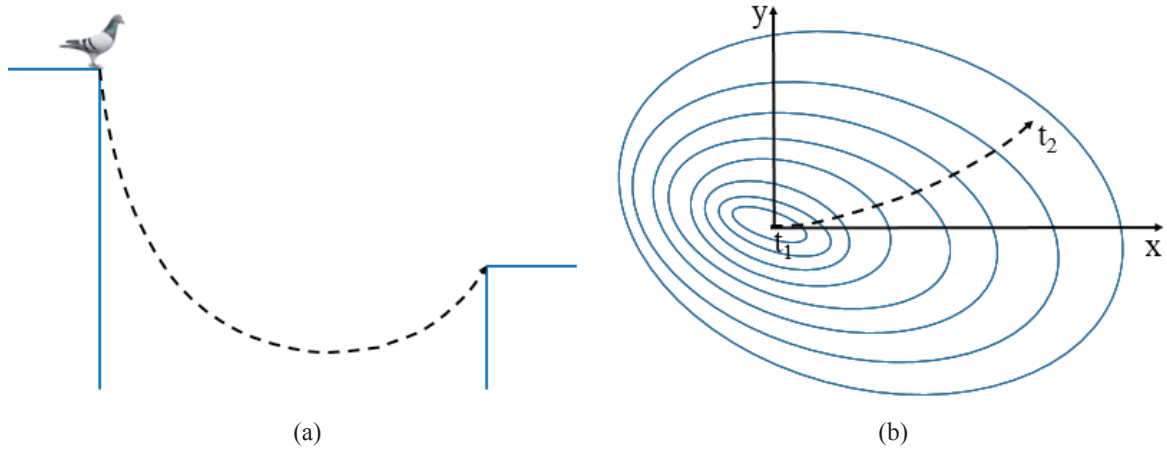


圖 1 兩條類似路徑：(a) 最速滑降路徑；(b) 最小作用量路徑

$dt \equiv xi'$ ，將 $L=K-V= m[(x')^2 + (y')^2]/2-V(x, y)$ 代入上式而有：

$$-\partial V/\partial xi = d[\partial K/\partial xi']/dt \quad (2b)$$

以向量表示如下：

$$-\nabla V = m x'' \quad (3)$$

其中 ∇ 為梯度算符，粗體 x 代表 x 及 y 方向位移之向量和， $x'' \equiv d^2 x/dt^2$ 為粒子加速度。因位勢的負梯乃為粒子在位勢中的受力 [2]，故 $F=-\nabla V$ 於是上式可寫成：

$$F = m x'' \quad (4)$$

是謂牛頓第二運動定律，由此可見：最小作用量原理乃為牛頓第二運動定律之基本原理，至少應為其充份條件。

量子力學與最小作用量原理

就量子力學而言，粒子不全然為質點，同時也是物質波；最小作用量路徑不再是粒子遵循的唯一路徑，而是發現粒子'行蹤'(註 1)之機率最大者。此現象可以由單狹縫繞射實驗表明 [3]。

如圖 2(a) 所示，粒子於時間 $t1$ 由單狹縫粒子源發出，於時間 $t2$ 在屏幕上形成繞涉圖形，其中最小作用量路徑，在無位勢情況下顯為直線路徑，

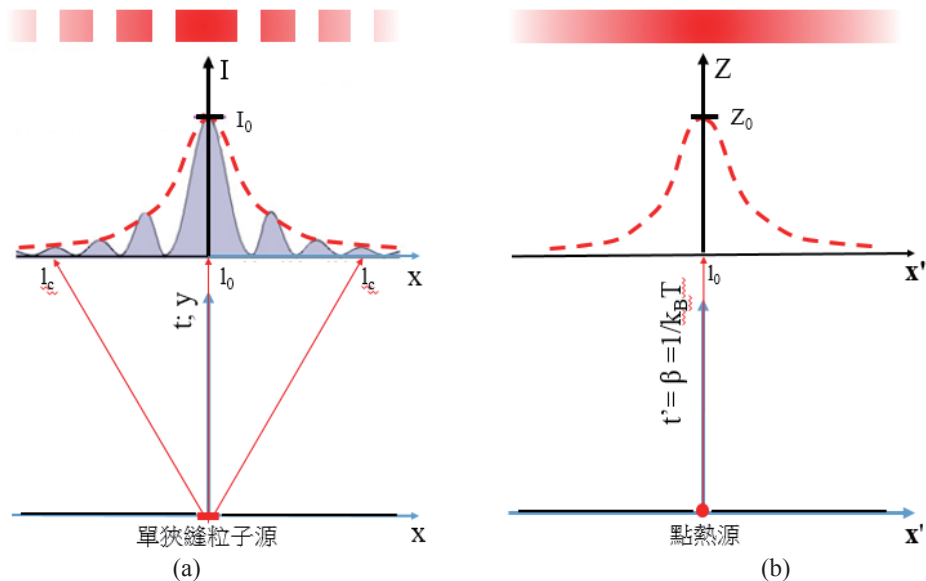


圖 2 兩種類似現象：(a) 單狹縫繞射；(b) 熱傳

更完整的內容

詳見【機械工業雜誌】423 期・107 年 6 月號

機械工業雜誌・每期 220 元・一年 12 期 2200 元

劃撥帳號：07188562 工業技術研究院機械所

訂書專線：03-591-9339

傳 真：03-582-2011

機械工業雜誌・官方網站：www.automat.tw

機械工業雜誌・信箱：jmi@itri.org.tw