Klassinen ekvipartitioteoreema

Oletetaan, että Hamiltonin funktio riippuu jonkin vapausasteen x_i neliöstä:

$$H = \alpha_i x_i^2 + H',$$

missä x_i on joko paikka- tai liikemääräkoordinaatti ja H' ei riipu x_i:stä. Sisäinen energia on

$$E = \langle H \rangle = \alpha_i \langle x_i^2 \rangle + H'$$

eli $\alpha_i \langle x_i^2 \rangle$ antaa energiaan kontribuution vapausasteesta x_i. Lasketaan $\langle x_i^2 \rangle$:

$$\langle x_i^2 \rangle = \frac{\int d\Gamma\, x_i^2 e^{-\beta H}}{\int d\Gamma\, e^{-\beta H}} = \frac{\int d\Gamma' e^{-\beta H'}}{\int d\Gamma' e^{-\beta H'}} \cdot \frac{\int dx_i\, x_i^2 e^{-\beta \alpha_i x_i^2}}{\int dx_i\, e^{-\beta \alpha_i x_i^2}},$$

missä $\int d\Gamma'$ tarkoittaa integrointia kaikkien muiden vapausasteiden paitsi x_i:n yli.

$$\langle x_i^2 \rangle = \frac{\int dx_i\, x_i^2 e^{-\beta \alpha_i x_i^2}}{\int dx_i\, x_i e^{-\beta \alpha_i x_i^2}} = \frac{\frac{\sqrt{\pi}}{2} \cdot \frac{1}{(\beta \alpha_i)^{3/2}}}{\sqrt{\frac{\pi}{\beta \alpha_i}}} = \frac{1}{2 \beta \alpha_i}$$

$$\Rightarrow \alpha_i \langle x_i^2 \rangle = \frac{1}{2\beta} = \frac{1}{2} T$$

Tulos on klassinen ekvipartitioteoreema: jokainen Hamiltonin funktiossa esiintyvä neliöllinen vapausaste antaa sisäiseen energiaan kontribuution $\frac{1}{2} T$.

Tästä seuraa, että lämpökapasiteettiin tulee kontribuutio

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V = \frac{1}{2}$$

jokaisesta neliöllisestä x_i.