Eötvös Loránd Tudományegyetem

Fizika BSc záróvizsga tételek

Berki Péter
Demeter Márton Csaba
Grajzel Dániel
Horváth Dénes
Novák Martin István
ELTE fizika BSc

2016. június 12.

Tartalomjegyzék

1. A klasszikus mechanika alapjai(Novák Martin) 1
1.1. Kinematikai alapfogalmak, koordináta-rendszerek . . . 1
1.2. Newton-törvények, tehetetlen és súlyos tömeg . . . 2
1.3. Gyorsuló koordináta-rendszerek . . . 3
1.4. Tömegpont mozgására vonatkozó tételek . . . 3
1.4.1. Erőlökés és impulzustétel . . . 3
1.4.2. Impulzusmomentum-tétel . . . 4
1.4.3. Munkatétel és energiamegmaradás . . . 4
1.5. Pontrendszerek és rájuk vonatkozó tételek . . . 4
1.5.1. Impulzustétel és tömegközéppont-tétel . . . 4
1.5.2. Impulzusmomentum-tétel . . . 5
1.5.3. Munkatétel és energiamegmaradás . . . 6
1.6. Merev testek . . . 6
1.6.1. Merev testekről általában . . . 6
1.6.2. Egy szabadsági fokú rendszerek . . . 7
1.6.3. A tehetetlenségi tenzor . . . 7
1.6.4. A merev test mozgási energiája, impulzusa, impulzusmomentuma . . . 8
1.6.5. Euler-egyenletek, Euler-szögek és pörgettyűk . . . 9
1.7. Relativisztikus kinematika és dinamika . . . 11
1.7.1. A relativitáselmélethez vezető út . . . 11
1.7.2. Michelson-Morley kísérlet . . . 11
1.7.3. Az elmélet alapjai . . . 11
1.7.4. Paradoxonok . . . 12
1.7.5. Kauzalitás . . . 12
1.7.6. Sajátidő . . . 12
1.7.7. Relativisztikus fizika . . . 12

2. A klasszikus mechanika elvei(Novák Martin) 14
2.1. Lagrange-féle elsőfajú mozgásegyenletek . . . 14
2.2. Virtuális munka elve . . . 15
2.3. A kényszerfeltételek osztályozása . . . 15
2.4. A d'Alembert-elv . . . 16
2.5. Legkisebb hatás elve . . . 16
2.5.1. Variációszámítás alapjai . . . 16
2.5.2. Általánosított mennyiségek . . . 17
2.5.3. d'Alembert-elv → általánosított Hamilton elv, általánosított mozgásegyenlet . . . 17
2.5.4. Hamilton-elv konzervatív rendszerekre . . . 18
2.5.5. Hamilton-elv nem konzervatív rendszerekre . . . 18
2.6. Kanonikus formalizmus . . . 19
2.6.1. Legendre-transzformáció . . . 19
2.6.2. Hamilton-függvény . . . 19
2.7. Kanonikus transzformációk . . . 21
2.8. Szimmetriák és megmaradási tételek . . . 24

3. Egzaktul megoldható fizikai problémák(Novák Martin) 26
3.1. Csillapított-, csatolt-, és kényszerrezgések, lineáris lánc . . . 26
3.1.1. Sebességgel arányos csillapítás . . . 26
3.1.2. Kényszerrezgések . . . 27
3.1.3. Csatolt rezgések . . . 28
3.1.4. Egyatomos lineáris lánc . . . 29
3.1.5. Kétatomos lineáris lánc . . . 30
3.2. Kepler-probléma . . . 31
3.2.1. Nyugvó nap . . . 31
3.2.2. Kéttest-probléma . . . 33
3.2.3. Perihélium elfordulás . . . 34
3.3. Potenciálvölgy . . . 34
3.4. Oszcillátor . . . 35
3.4.1. Schrödinger-egyenletes megoldás . . . 35
3.4.2. Oszcillátoralgebra . . . 36

3.5. Rotátor . . . 37
3.6. Hidrogénatom . . . 40

4. Folytonos közegek mechanikája(Novák Martin) 42
4.1. Rugalmas és képlékeny alakváltozások, speciális deformációk . . . 42
4.1.1. Egyszerű rugalmas alakváltozások . . . 42
4.1.2. Speciális alakváltozások . . . 43
4.2. Feszültség és deformációs tenzor, általános Hooke-törvény . . . 45
4.2.1. Feszültségtenzor . . . 45
4.2.2. A deformációs tenzor . . . 46
4.2.3. Általánosított Hooke-törvény . . . 47
4.3. Hullámterjedés deformálható testekben, Doppler-effektus . . . 48
4.3.1. Hullámterjedés és hangterjedés gázokban . . . 48
4.3.2. Hullámterjedés szilárd testekben . . . 50
4.4. Folyadékok tulajdonságai, hidrosztatika . . . 51
4.4.1. Felületi feszültség, kapilláris emelkedés . . . 52
4.5. Áramlások jellemzése . . . 53
4.6. Bernoulli-egyenlet, tökéletes folyadék áramlása . . . 54
4.6.1. Összenyomhatatlan közeg . . . 54
4.6.2. Összenyomható közeg . . . 54
4.7. Navier-Stokes és Euler egyenletek, örvények, turbulencia . . . 56
4.7.1. Örvények, turbulencia . . . 58

5. Fenomenologikus termodinamika(Novák Martin) 59
5.1. Termodinamikai állapotjelzők, hőtágulás . . . 59
5.2. Nulladik főtétel . . . 59
5.3. Első főtétel . . . 60
5.4. Gázmodellek . . . 60
5.4.1. Ideális gáz kinetikus modellje . . . 60
5.4.2. Van der Waals gázok . . . 62
5.5. Nyílt folyamatok . . . 63
5.5.1. Izoterm . . . 63
5.5.2. Izobár . . . 63
5.5.3. Izochor . . . 63
5.5.4. Adiabatikus . . . 63
5.5.5. Ábrák . . . 64
5.6. Körfolyamatok, Carnot-folyamat . . . 64
5.6.1. Carnot-körfolyamat ideális gázzal . . . 65
5.7. Második főtétel . . . 66
5.8. A fundamentális egyenlet és a termodinamikai potenciálok . . . 68
5.8.1. A fundamentális egyenlet . . . 68
5.8.2. Potenciálok . . . 69
5.8.3. C_p-C_V egyenlőség . . . 70
5.9. Harmadik főtétel . . . 71
5.9.1. Következmények . . . 71
5.10. Fázisátalakulások jellemzői, Gibbs-féle fázisszabály, fázisdiagramok . . . 71
5.10.1. Egykomponensű rendszerek egyensúlyi feltételei . . . 71
5.10.2. Fázisátalakulások . . . 72
5.10.3. Clausius-Clapeyron egyenlet . . . 74
5.10.4. Gibbs-féle fázisszabály, fázisdiagramok . . . 75

6. Elektro- és magnetosztatika, áramkörök(Demeter Márton) 76
6.1. Kísérletek . . . 76
6.1.1. Elektrosztatikus jelenségek . . . 76
6.1.2. Taszító és vonzó erők . . . 76
6.1.3. Elektroszkópok, vezetés és a töltésmegosztás jelensége . . . 77
6.1.4. Vezetés . . . 77
6.1.5. Töltésmegosztás . . . 77
6.2. Coulomb- és Gauss törvény, szuperpozíció elve, stacionárius áram . . . 77
6.2.1. Coulomb törvény . . . 77
6.2.2. Elektromos térerősség és a szuperpozíció elve . . . 79

6.2.3. Az elektrosztatikus erőtér fluxusa . . . 80
6.2.4. Ponttöltés munkája elektrosztatikus térben, elektromos potenciál . . . 82
6.2.5. Az elektrosztatika I. alaptörvénye . . . 83
6.2.6. Ponttöltés potenciálja . . . 84
6.2.7. Folytonos töltéseloszlás potenciálja . . . 85
6.2.8. Az elektromos térerősség és a potenciál kapcsolata . . . 85
6.2.9. Gömbszimmetrikus töltéseloszlások tere . . . 86
6.3. Vezetők, szigetelők, dielektrikumok . . . 88
6.3.1. Elektromos erőtér szigetelőkben . . . 89
6.3.2. Az elektrosztatika I. alaptörvénye szigetelőkben . . . 89
6.3.3. Az elektrosztatika II. alaptörvénye szigetelőkben . . . 90
6.3.4. Elektromos erőtér homogén, izotrop, lineáris dielektrikumokban . . . 91
6.3.5. Az erőtér két dielektrikum határán . . . 92
6.4. Kondenzátor, magnetosztatika . . . 94
6.4.1. Térerősség és potenciál töltött síkok környezetében, a síkkondenzátor . . . 94
6.4.2. Töltéselhelyezkedés vezetőn, kapacitás . . . 95
6.4.3. Csúcshatás . . . 96
6.4.4. Polarizációs síkkondenzátor modellje . . . 97
6.4.5. Kondenzátor energiája és kapcsolások . . . 98
6.4.6. Magnetosztatika . . . 98
6.4.7. Kísérletek . . . 98
6.4.8. Hans Christian Ørsted kísérlete . . . 98
6.4.9. Forgatónyomaték és a mágneses momentum . . . 100
6.4.10. A magnetosztatika I. törvénye . . . 100
6.4.11. A magnetosztatika II. törvénye . . . 101
6.4.12. Anyagok mágnessége . . . 102
6.4.13. Határfeltételek . . . 103
6.5. Stacionárius áram, áramköri törvények . . . 104
6.5.1. Ohm-törvény . . . 104
6.5.2. Fémek vezetése . . . 104
6.5.3. A vezetés Drude modellje . . . 105
6.5.4. Áramköri Kirchoff-törvények . . . 106

7. Elektrodinamika(Demeter Márton) 108
7.1. Maxwell-egyenletek . . . 108
7.1.1. Vektor- és skalárpotenciál . . . 110
7.2. Lorentz-erő . . . 111
7.2.1. Lorentz erő áram járta vezetődrótra és a Biot-Savart törvény . . . 112
7.3. Indukció . . . 113
7.3.1. A Maxwell-egyenletek kvázistacionárius esetben . . . 114
7.3.2. Indukciós együttható . . . 115
7.4. Elektromágneses tér energiája, impulzusa, impulzusmomentuma . . . 116
7.4.1. Töltésrendszer energiája . . . 116
7.4.2. Az energia mérlegegyenlete . . . 117
7.4.3. Az impulzus mérlegegyenlete . . . 118
7.4.4. Elektromágneses tér impulzusmomentuma . . . 119
7.5. Váltakozó áram, transzformátor, rezgőkörök . . . 119
7.6. Általános váltakozó áram jellemzése . . . 120
7.7. Effektív érték . . . 120
7.7.1. Rezgőkörök differenciálegyenletei . . . 120
7.7.2. Zárt vasmagos transzformátor . . . 121

8. Hullámegyenlet és hullámjelenségek(Demeter Márton) 124
8.1. Megismerésének története . . . 124
8.2. Maxwell-egyenletek . . . 124
8.3. Rugalmas és elektromágneses hullámok leírása . . . 125
8.3.1. Hullámegyenlet mechanikai hullámok esetén . . . 125
8.3.2. Hullámegyenletek származtatása a Maxwell egyenletekből . . . 126
8.4. Vezetőben terjedő elektromágneses hullámok . . . 127
8.5. Diszperzió, csoport és fázissebesség, Doppler-effektus . . . 128
8.5.1. Fázis- és csoport sebesség . . . 129

8.6. Doppler-effektus . . . 130
8.6.1. Felfedezése . . . 130
8.6.2. Relativisztikus Doppler-effektus(csak érdekességképpen) . . . 132
8.7. Retardált potenciálok, dipólsugárzás, fényszórás . . . 133
8.7.1. Dipólus-antenna . . . 133
8.7.2. Fényszórás . . . 135
8.8. Hullámvezetők, üregrezonátorok, antennák . . . 136
8.8.1. TE eset . . . 137
8.8.2. TM eset . . . 138
8.8.3. Üregrezonátorok . . . 138
8.9. Interferencia, polarizáció, Fresnel-formulák, diffrakció, nemlineáris optika . . . 139
8.9.1. Interferencia . . . 139
8.9.2. Elektromágneses hullámok polarizációja . . . 140
8.9.3. Diffrakció . . . 141
8.9.4. Fresnel-formulák . . . 141

9. A geometriai optika és alkalmazásai(Grajzel Dániel) 145
9.1. Eikonál . . . 145
9.2. Fermat-elv és kapcsolat a klasszikus mechanikával . . . 147
9.3. Paraxiális közelítés . . . 151
9.4. Optikai, leképezési törvények, felbontóképesség . . . 152
9.5. Optikai eszközök, felbontóképesség . . . 154
9.6. Optikai jelenségek a természetben, kausztikák . . . 155

10. A kvantumelmélet alapvető kísérletei(Grajzel Dániel) 156
10.1. Hőmérsékleti sugárzás . . . 156
10.2. Fotoeffektus . . . 157
10.3. Compton-effektus . . . 158
10.4. Rutherford-kísérlet . . . 158
10.5. Millikan-kísérlet . . . 159
10.6. Atommodellek . . . 160
10.7. Davisson-Germer kísérlet . . . 161
10.8. Stern-Gerlach kísérlet . . . 161
10.9. Einstein-de Haas-kísérlet . . . 162
10.10 Zeeman effektus . . . 162

11. A kvantummechanika alapjai(Grajzel Dániel) 164
11.1. A kvantummechanika matematikai háttere . . . 164
11.2. Schrödinger- és Heisenberg-kép . . . 166
11.3. Határozatlansági reláció . . . 166
11.4. Szabad részecske hullámfüggvénye, szuperpozíció . . . 168
11.5. Anyaghullámok, valószínűségi értelmezés, a fizikai állapot leírása . . . 169
11.6. Fizikai mennyiségek operátorai, sajátfüggvények, sajátértékek . . . 169
11.7. Schrödinger-egyenlet és szeparálása . . . 169
11.8. Impulzusmomentum operátor, sajátértékei, sajátfüggvényei . . . 170
11.9. Spin, Pauli-egyenlet . . . 172
11.10 Korrespondencia-elv . . . 173
11.11 Ehrenfest-tétel . . . 174

12. Atom- és molekulaszerkezet(Novák Martin) 175
12.1. Kvantummechanikai közelítő módszerek . . . 175
12.1.1. Időfüggetlen perturbációszámítás nem degenerált esetben . . . 175
12.1.2. Időfüggetlen perturbációszámítás degenerált esetben . . . 176
12.1.3. Időfüggő perturbációszámítás . . . 177
12.1.4. Variációs módszer . . . 178
12.1.5. Hartree-Fock módszer . . . 178
12.2. Atomi energiaszintek, spektrumok, spektroszkópia . . . 180
12.3. A hidrogénatom spektruma . . . 180
12.3.1. Spin-pálya kölcsönhatás . . . 181
12.3.2. Hiperfinom kölcsönhatás . . . 181
12.4. Felhasadások különböző terekben . . . 182

12.4.1. Stark-effektus . . . 182
12.4.2. Zeeman-effektus . . . 183
12.4.3. Lamb-shift . . . 184
12.5. Szórás centrális térben, hatáskeresztmetszet, alagútjelenség . . . 184
12.6. He-atom . . . 187
12.7. Kétatomos molekulák . . . 188
12.7.1. Általános megjegyzések . . . 188
12.7.2. Pauli-elv . . . 188
12.7.3. Viriáltétel . . . 188
12.7.4. Born-Oppenheimer közelítés . . . 188
12.7.5. Hellman-Feynnman tétel . . . 189
12.8. A periódusos rendszer és a kémiai kötések kvantummechanikai alapjai . . . 189
12.8.1. A kovalens kötés . . . 189
12.8.2. A vegyérték . . . 190

13. A magfizika alapjai(Grajzel Dániel) 191
13.1. Az izotóp térkép, atommagok kötési energiája, tömege, mérete . . . 191
13.2. Energia és tömegekvivalencia, tömegdefektus . . . 193
13.3. A cseppmodell és a félempirikus kötési formula . . . 193
13.4. Maghasadás, magfúzió, radioaktivitás . . . 195
13.5. Sugárzás és anyag kölcsönhatása . . . 198
13.6. Radioaktív bomlások, magátalakulások . . . 201
13.7. Elemi részecskék és alapvető kölcsönhatások . . . 202
13.8. Kísérleti eszközök . . . 202

14. A termodinamika statisztikus alapozás(Grajzel Dániel) 204
14.1. Mikrokanonikus, kanonikus, nagykanonikus sokaság . . . 204
14.2. Mikroállapotok fogalma, Boltzmann-entrópia, egyszerű alkalmazások . . . 208
14.3. Az egyensúly stabilitása, fluktuációk . . . 208
14.4. Maxwell-féle sebességeloszlás . . . 209

15. Kvantumstatisztikák(Berki Péter) 211
15.1. Bose - Einstein és Fermi - Dirac - eloszlások . . . 211
15.2. Klasszikus határesetek . . . 213
15.3. Ideális Fermi-gáz . . . 213
15.4. Elektronfajhő . . . 215
15.5. Ideális Bose-gáz, Bose-Einstein kondenzáció . . . 215
15.6. Hőmérsékleti sugárzás, Stefan-Boltzmann törvény . . . 218
15.7. Fononok . . . 219

16. Mágneses rendszerek(Novák Martin) 220
16.1. Ising modell . . . 220
16.1.1. Egy dimenzió . . . 220
16.1.2. Két dimenzió . . . 221
16.2. Atomi para- és diamágnesség . . . 221
16.3. Pauli szuszceptibilitás, Landau diamágnesség . . . 224
16.4. Ferro-, antiferro-, ferrimágneses anyagok, Curie-Weiss törvény . . . 224
16.4.1. Ferromágneses anyagok . . . 224
16.4.2. A ferromágnesség átlagtérelmélete . . . 224
16.4.3. Antiferromágneses és ferrimágneses anyagok . . . 225
16.5. Ferromágneses domének, hiszterézis . . . 225
16.6. Spinüveg, mágneses ellenállás, szupravezetés . . . 226
16.6.1. Szupravezetés . . . 227

17. Kristályos anyagok fizikája(Novák Martin) 230
17.1. Szimmetriák, pontcsoportok, Bravais-rácsok . . . 230
17.2. Diffrakció, kinematikus elmélet . . . 232
17.2.1. A diffrakció dinamikai elmélete . . . 232
17.2.2. Kinematikus elmélet . . . 234
17.3. Elektron- és röntgendiffrakció sajátosságai . . . 236
17.4. Elektronoptika, elektronmikroszkóp . . . 236

17.5. Rácsrezgések termikus hatásai . . . 237
17.6. Bloch-tétel . . . 238
17.7. Adiabatikus szétcsatolás . . . 239
17.8. Sávszerkezet . . . 240

18. Nemegyensúlyi folyamatok leírása(Demeter Márton) 244
18.1. Irreverzibilis folyamatok . . . 244
18.2. Master egyenlet, részletes egyensúly . . . 245
18.3. Brown-mozgás, diffúzió . . . 246
18.3.1. Einstein-féle leírás . . . 247
18.3.2. A Fokker-Planck egyenlet megoldása . . . 248

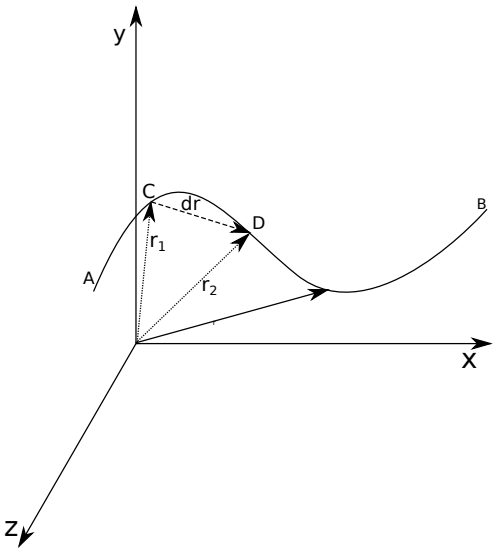
19. Az asztrofizika alapjai(Horváth Dénes) 249
19.1. Az ősrobbanás elmélet alapvető feltevései, A Hubble-törvény . . . 249
19.2. Galaxisok kialakulása, morfológiája . . . 250
19.2.1. Fejlődés . . . 250
19.2.2. Morfológia . . . 251
19.3. A csillagfejlődés szemléletes képe . . . 252
19.3.1. Gravitációs kollapszus . . . 252
19.3.2. Izotermális kollapszus . . . 252
19.3.3. Akkréciós szakasz . . . 252
19.3.4. A csillag születése, és a kontrakciós szakasz . . . 253
19.4. HRD- Hertzsprung-Russell diagram szemléletes képe . . . 254
19.5. Csillagok energiatermelése . . . 255
19.6. Fehértörpék . . . 256
19.7. Neutroncsillagok . . . 257
19.8. Feketelyukak . . . 257
19.9. Megfigyelések alapjai . . . 257
19.9.1. Sugárzás . . . 257
19.9.2. Magnitudóskála . . . 258
19.9.3. Vöröseltolódás . . . 258

20. Függelék 259

1. A klasszikus mechanika alapjai(Novák Martin)

1.1. Kinematikai alapfogalmak, koordináta-rendszerek

A kinematika a testek mozgásának módjával foglalkozik. Ahhoz, hogy a mozgást leírhassuk, ki kell választanunk egy másik testet *(vonatkoztatási rendszer)*, amihez viszonyítjuk a szóban forgó test hely- illetve helyzetváltozását.



1.1 ábra: Koordináta-rendszer

Azt a görbét, amit az anyagi pont a mozgása során leír, a mozgás pályájának nevezzük *(AB görbe)*. A pálya teljes hosszának, vagy egy részének a hossza az út *(CD ívhossza)*. A pálya kezdő- és végpontját összekötő vektor az elmozdulásvektor:

$$\vec{CD} = \Delta\mathbf{r} = \mathbf{r_2} - \mathbf{r_1}$$

Az ábráról is látszik, hogy a megtett út hossza és az elmozdulás nagysága általában nem egyenlő, azaz $s \neq |\Delta r|$. A test mozgásának leírása azt jelenti, hogy megadjuk a helyvektor nagyságát és irányát minden időpillanatban, vagy ami ezzel egyenértékű, a helyvektor koordinátáinak $x(t)$, $y(t)$, $z(t)$ időbeli értékét. Tekintsük a tetszőleges görbén mozgó test esetén az elmozdulás és az elmozdulás alatt eltelt idő hányadosát:

$$\frac{\Delta\mathbf{r}}{\Delta t} = \frac{\mathbf{r}(t_0 + \Delta t) - \mathbf{r}(t)}{\Delta t}$$

Ha Δt értékét minden határon túlcsökkentjük, akkor bevezethető a pont *pillanatnyi sebessége*, azaz

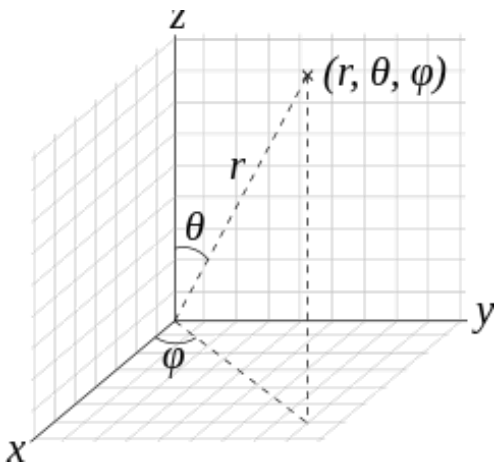
$$\mathbf{v}(t_0) = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\Delta\mathbf{r}}{\Delta t} = \lim_{t \to t_0} \frac{\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(t_0)}{t - t_0} = \frac{d\mathbf{r}(t_0)}{dt} = \dot{\mathbf{r}}(t_0)$$

Hasonlóan bevezethető a pillanatnyi gyorsulás is:

$$\mathbf{a}(t_0) = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\Delta\mathbf{v}}{\Delta t} = \lim_{t \to t_0} \frac{\mathbf{v}(t) - \mathbf{v}(t_0)}{t - t_0} = \frac{d\mathbf{v}(t_0)}{dt} = \dot{\mathbf{v}}(t_0) = \ddot{\mathbf{r}}(t_0)$$

Hengerkoordináták: Vegyünk fel tetszőleges P pontot egy klasszikus, Descartes-féle, jobbsodrású koordinátarendszerben. Jellemezzük a P pont helyzetét az $\mathbf{R}_{HK} = (\rho, \varphi, z)$ számhármassal, amit a P hengerkoordinátáinak nevezünk. Itt $\varphi \in [0, 2\pi[$. Vetítsük le a P pontot az XY síkra, majd képezzük a vetített pont távolságát a Descartes-féle koordináta-rendszer origójától. Ez a ρ érték. A φ érték a vetített pont és az origó közötti szakasz X tengellyel bezárt szöge, z pedig ugyanaz, mint DK-ban. Ezekből látszik, hogy: $x = \rho cos\varphi$, $y = \rho sin\varphi$, $z = z$, valamint $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$, $\varphi = arctg\frac{y}{x}$, $z = z$.

Gömbi koordináták esetén a P pont gömbi koordinátái az $\mathbf{R}_{GK} = (r, \theta, \varphi)$ számhármassal adhatók meg. Itt r az O középpontú gömb sugara *(O értelemszerűen itt is egy DK origója)*. A φ szög ugyanaz, mint amit a hengerkoordináták esetén láttunk, valamint $\varphi \in [0, 2\pi[$. A θ szög pedig az origóból a pontba mutató vektor és a Z tengely által bezárt szög, ami $\theta \in [0, \pi]$. Az átszámítási szabályok a következők: először gömbiből derékszögűbe, aztán vissza:



1.2 ábra: Gömbi koordináta-rendszer

$$x = rsin\theta cos\varphi$$

$$y = rsin\theta sin\varphi$$

$$z = rcos\theta$$

és

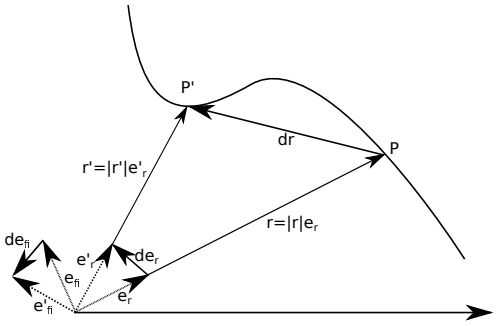
$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

$$\varphi = arctg\frac{y}{x}$$

$$\theta = arctg\frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z}$$

Síkbeli polárkoodináták esetében a pont helyzetére jellemző mennyiség a pont origótól mért távolsága, valamint a pontba mutató vektor X tengellyel bezárt szöge. Az átszámítási szabályok: $x = rcos\varphi$, $y = rsin\varphi$, $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, $\varphi = arctg\frac{y}{x}$.

Ponttal együttforgó és természetes koordinátarendszer: Ha kifejtenénk a különböző mennyiségeket adott koordináta-rendszerekben, akkor láthatnánk, hogy pl. síkbeli polárkoordináták esetén a gyorsulásra már viszonylag egyszerű mozgás esetén is meglehetősen bonyolult kifejezés adódik. Ezért célszerű olyan koordináta-rendszert használni, aminek az egyik tengelye mindig követi a mozgó pontot.



1.3 ábra: Együttforgó koordinátarendszer

A P pontba mutató mindenkori $\mathbf{r}$ vektor iránya meghatározza a $\mathbf{e}_r = \frac{\mathbf{r}}{r}$ egységvektort. Vezessünk be egy $\mathbf{e}_r$-re merőleges egységvektort, $\mathbf{e}_\varphi$-t. Ebből a két vektorból alkotott bázis forogva követi a mozgó pontot, így a mozgó pont helykoordinátája $\mathbf{r} = r \cdot \mathbf{e}_r$. A $\Delta\mathbf{r}$ vektor a t és $t + \Delta t$ időpillanatok között

$$\Delta\mathbf{r} = \mathbf{r}' - \mathbf{r} = r' \cdot \mathbf{e}'_r - r \cdot \mathbf{e}_r = (r' - r) \cdot \mathbf{e}_r + r' \cdot (\mathbf{e}'_r - \mathbf{e}_r)$$

alakban adható meg. Ha az $(r' - r)$ és az $(\mathbf{e}'_r - \mathbf{e}_r)$ sem nulla, és a Δt kicsi, akkor $(r' - r) = r(t + \Delta t) - r(t) \approx \dot{r}(t)\Delta t$.
A $\Delta\mathbf{e}_r = (\mathbf{e}'_r - \mathbf{e}_r)$ hossza $|\Delta\mathbf{e}_r| = |\mathbf{e}_r|\,\Delta\varphi = \dot{\varphi}\Delta t$ iránya pedig $\Delta t \to 0$ esetén merőleges lesz $\mathbf{e}_r$-re, azaz $\mathbf{e}_\varphi$ irányú. Emiatt

$$\lim_{\Delta t \to 0} \frac{\Delta\mathbf{e}_r}{\Delta t} = \dot{\mathbf{e}_r} = \dot{\varphi}\mathbf{e}_\varphi$$

Az $\mathbf{e}_\varphi$ vektor Δt idő alatti változása $-\mathbf{e}_r$ irányú, ahogy az az ábrán is látszik. Változási sebességre az $\mathbf{e}_r$ vektorhoz hasonlóan $\dot{\mathbf{e}}_\varphi = -\dot{\varphi}\mathbf{e}_r$ adódik. Ezekből pedig kifejezhető a sebesség radiális $v_r = \dot{r}$ és tangenciális $v_\varphi = r\dot{\varphi}$. Idő szerinti deriválással képezhető a gyorsulás is, ami

$$\mathbf{a} = (\ddot{r} - r\dot{\varphi}^2)\mathbf{e}_r + (2\dot{r}\dot{\varphi} + r\ddot{\varphi})\mathbf{e}_\varphi$$

Definiálhatjuk még az úgynevezett természetes koordináta-rendszert. Ez a görbe adott pontbeli $\mathbf{t}$ érintő egységvektora, a görbe "kanyarába" írható kör*(simulókör)* középpontjába mutató $\mathbf{n}$ egységvektor és a két vektor által meghatározott síkra *(simulósík)* merőleges $\mathbf{b}$ egységvektorokból alkotott bázis. A $(\mathbf{t}, \mathbf{n}, \mathbf{b})$ vektorhármas jobbsodrású rendszert alkot és kísérő triédernek nevezzük.

1.2. Newton-törvények, tehetetlen és súlyos tömeg

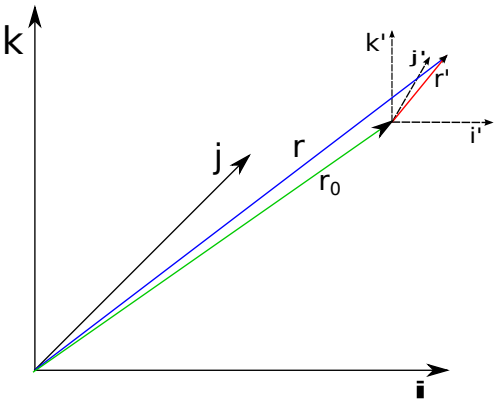
A hétköznapi tapasztalatok azt mutatják, hogy a nyugvó testek csak erőkifejtéssel mozdíthatók el. Azt is láthatjuk tapasztalatokból, hogy, ha elgurítunk vagy csúsztatunk egy testet, akkor az kellő erőkifejtés nélkül egy idő után megáll a különböző mozgást akadályozó hatások, mint például a súrlódás vagy a légellenállás miatt. Kölcsönhatás nélkül viszont a testek tehetetlenül folytatják a mozgásukat. Kimondhatjuk tehát a tehetetlenség törvényét:
Mindent test nyugalomban van, vagy egyenes vonalú egyenletes mozgást végez addig, amíg egy másik test vagy mező a mozgásállapotának megváltoztatására nem kényszeríti.
Más megfogalmazásban ennek a kijelentésnek a tartalma az, hogy
Mindig található olyan koordináta-rendszer, amelyben a többi testtől távol elhelyezkedő testek nyugalomban vannak vagy egyenes vonalú egyenletes mozgást végeznek.
Az ilyen koordináta-rendszereket inerciarendszernek nevezzük. Empirikusan definiálható egy erő fogalom, amely a mechanikai erőhatás "erősségét" méri. Ilyen lehet például két összeütköző kiskocsi közül az egyikre rögzített csavarrugó összenyomódásának a mértéke. Kísérletekből meghatározható, hogy ez az így "definiált" erő arányos a test gyorsulásával. Az erő gyorsító hatását vizsgálva megállapíthatjuk, hogy $\frac{F}{a} = m$ hányados egy testre jellemző mennyiséggel, a tömeggel arányos. Ezt a hányadost átrendezve kaphatjuk Newton II. törvényét, más néven a dinamika alaptörvényét:

$$\mathbf{F} = m \cdot \mathbf{a}$$

Newton ezt a törvényt nem ebben a formában írta fel, hanem a $\mathbf{p} = m \cdot \mathbf{v}$ impulzus definiálásával ő az $\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt}$ összefüggést használta. Ez időben állandó tömeg esetén tényleg ekvivalens a fentebb használt alakkal.
Ha valamely test egyszerre több másikkal van kölcsönhatásban, akkor felmerülhet a kérdés, hogy vajon, ha az egyes kölcsönhatásokat egymás után engednénk hatni, akkor ugyanazt kapnánk-e, mintha egyszerre hatna mindegyik hatás. A válasz az, hogy igen, az erőhatások függetlenek egymástól. Azaz $\sum_i \mathbf{F}_i = \mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt}$ Ez a szuperpozíció elve. Az ütközési kísérletek arra is rámutatnak, hogy két test ütközésekor az egyik test által a másikra és a másik által az egyikre kifejtett erők között fennáll az $\mathbf{F}_{AB} = -\mathbf{F}_{BA}$ összefüggés. Tehát, ha egy Trabant és egy kamion karambolozik, mindkettőre ugyan akkora nagyságú erő hat, csak a Trabanton jobban látszik.

1.3. Gyorsuló koordináta-rendszerek

A fent említett Newton-törvények inerciarendszerben érvényesek. Azonban sokszor adódik olyan helyzet, mikor nem tudunk definiálni a problémához illeszkedő inerciarendszert. Ahhoz, hogy a dinamika alaptörvénye gyorsuló koordináta-rendszerben is alkalmazható legyen, különböző tehetetlenségi erőket kell bevezetni.



1.4 ábra: Gyorsuló rendszer

Tekintsük az ábrán látható rendszert. Az $\mathbf{r}$ vektor a nyugvó rendszerből mutat a tömegpontra, a $\mathbf{r}'$ pedig a gyorsuló rendszerből, $\mathbf{r}_0$ pedig a nyugvó rendszer középpontjából mutat a gyorsulóéba. A gyorsuló rendszer *(legyen innentől K')* ω szögsebességvektorral forog a nyugvó rendszerhez *(innentől K)* képest. Vizsgáljuk meg a deriváltak kapcsolatát a K és a K' rendszerben úgy, hogy ezek origója egy pontban van. Legyen $\mathbf{A} = A_x\mathbf{i}' + A_y\mathbf{j}' + A_z\mathbf{k}'$ a K'-s rendszerben levő vektor. Képezzük a deriváltját a K rendszerből nézve:

$$\frac{d\mathbf{A}}{dt} = \frac{d'A_x}{dt}\mathbf{i}' + \frac{d'A_y}{dt}\mathbf{j}' + \frac{d'A_z}{dt}\mathbf{k}' + A_x\frac{d\mathbf{i}'}{dt} + A_y\frac{d\mathbf{j}'}{dt} + A_z\frac{d\mathbf{k}'}{dt}$$

A tagokat összevonva a következőt kapjuk:

$$\frac{d\mathbf{A}}{dt} = \frac{d'\mathbf{A}}{dt} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{A}$$

Itt a "d'" jelölés azt jelenti, hogy a gyorsuló rendszerbeli deriváltat képezzük, valamint felhasználtuk a szögsebesség vektor azon tulajdonságát, hogy $|\mathbf{v}| = r\omega = r\omega sin\theta \Rightarrow \mathbf{v} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r} = \frac{d\mathbf{r}}{dt}$, ahol θ a forgástengely és a helyvektor által bezárt szög. Az eredmény első tagja az $\mathbf{A}$ vektor K' rendszerbeli mozgásából adódik, a második tag pedig abból, hogy a K' rendszer *(benne az* $\mathbf{A}$ *vektorral)* forog a K körül. Ezt alkalmazva az $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 + \mathbf{r}'$ vektorra a következőket kapjuk:

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{d\mathbf{r}_0}{dt} + \frac{d'\mathbf{r}'}{dt} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}' = \mathbf{v}_{Tr} + \mathbf{v}' + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}'$$

$$\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = \frac{d\mathbf{v}_{Tr}}{dt} + \frac{d'\mathbf{v}'}{dt} + \boldsymbol{\omega}\times\mathbf{v}' + \boldsymbol{\omega}\times\frac{d\mathbf{r}'}{dt} + \frac{d\boldsymbol{\omega}}{dt}\times\mathbf{r}' = \frac{d\mathbf{v}_{Tr}}{dt} + \frac{d'\mathbf{v}'}{dt} + \boldsymbol{\omega}\times\mathbf{v}' + \boldsymbol{\omega}\times\left(\frac{d'\mathbf{r}'}{dt} + \boldsymbol{\omega}\times\mathbf{r}'\right) + \frac{d'\boldsymbol{\omega}}{dt}\times\mathbf{r}' + (\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{\omega})\times\mathbf{r}'$$

Az alsó kifejezés utolsó tagja 0. Felbontva a zárójeleket és a szorzásokat elvégezve, megszorozva m-el az egészet, végül $\mathbf{a}'$-re rendezve az egyenletet, a gyorsuló koordináta-rendszerbeli mozgásegyenletre a következőt kapjuk:

$$m\mathbf{a}' = \mathbf{F} - m\mathbf{a}_{Tr} - m(\boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r})) - 2m(\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{v}) - m\dot{\boldsymbol{\omega}} \times \mathbf{r}$$

A fenti kifejezésben az $\mathbf{F}$ a K rendszerből a K' rendszerre ható erő, a második a K' rendszer transzlációs gyorsulásából származó erő, a harmadik tag a centrifugális, a negyedik tag a Coriolis, az ötödik tag pedig az esetleges szöggyorsulásból adódó Euler erő.
A centrifugális erő iránya a tengelytől kifelé mutat, nagysága pedig lineárisan arányos az adott pillanatbeli forgástengelytől vett távolsággal, valamint a szögsebesség négyzetével. A forgás miatt fellépő erők közül tehát nagyságrendileg ez a legnagyobb. A Coriolis erő a forgó rendszerhez képest $\mathbf{v}'$ sebességgel mozgó testre hat. Ez a Föld forgása miatt a Földön is fellép, sőt nagy jelentőséggel bír például a környezeti áramlások során, de például egy képzett mesterlövésznek is illik figyelembe venni a Coriolis-erőt, ugyanis ez eltéríti a lövedéket a tényleges céltól. Komponensekre felbontva látható, hogy az egyik komponens Föld északi féltekén jobbra, a délin balra térít, a másik komponens pedig súlyváltozást okoz, ami kelet felé csökken, nyugat felé pedig növekszik.

1.4. Tömegpont mozgására vonatkozó tételek

A tömegpont mozgásának a leírására a Newton-törvényeket használjuk. Ezeknek a segítségével bármely tömegpont mozgása meghatározható, ha ismerjük az erőket és kényszerfeltételeket. Célszerű azonban Új fogalmakat bevezetni, melynek segítségével általánosabb állítások vezethetők le, amik megkönnyíthetik a későbbi tárgyalást.

1.4.1. Erőlökés és impulzustétel

Newtontól tudjuk, hogy $\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F}(t)$. Ennek integrálásával meghatározhatjuk az impulzusváltozást adott idő alatt, azaz $\Delta\mathbf{p} = \int_0^\tau \mathbf{F}(t)dt$. Az egyenlet jobb oldalán álló mennyiséget erőlökésnek nevezzük. Azaz a tömegpont impulzusának megváltozása az erőlökéssel egyenlő.
Amennyiben $\mathbf{F}(t) = 0$, akkor $\frac{d\mathbf{p}}{dt} = 0 \Rightarrow \mathbf{p}(t) = const$, azaz ha a testre nem hat erő, akkor az impulzus megmarad. Ez az impulzustétel.

1.4.2. Impulzusmomentum-tétel

A hétköznapi tapasztalatok azt mutatják, hogy ha egy tengellyel rögzített testre erőt fejtünk ki, akkor az forgásba jöhet. Ennek leírására bevezetjük az $\mathbf{M} = \mathbf{r} \times \mathbf{F}$ mennyiséget. Ez az $\mathbf{F}$ erő t tengelyre vonatkoztatott forgatónyomatéka, $\mathbf{r}$ pedig a forgástengelytől az erő támadáspontjába mutató vektor. Ha $\mathbf{F}$-et felbontjuk tengely irányú és arra merőleges komponensek összegére, akkor megmutatható, hogy $|\mathbf{M}| = rF_t$, mivel $|\mathbf{M}| = |\mathbf{r}|\,|\mathbf{F}|\,sin\alpha = rF_t$. Látszik tehát, hogy a forgatónyomaték nagysága nem függ a különböző tengelyt tisztán csak "húzó" vagy "toló" erőktől.
Írjuk fel a dinamika alaptörvényét és szorozzuk meg balról vektoriálisan a test helyvektorával:

$$\mathbf{r} \times \mathbf{F} = \mathbf{r} \times \frac{d\mathbf{p}}{dt}$$

A jobb oldal egyenlő a $\frac{d(\mathbf{r}\times\mathbf{p})}{dt}$ mennyiséggel, ugyanis ha tagonként elvégezzük a deriválást, akkor az $\mathbf{r}$ deriváltját tartalmazó tag 0, mivel a sebesség párhuzamos az impulzussal. Vezessük be az $\mathbf{N} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ jelölést és nevezzük el a test impulzusmomentumának. Ekkor látható, hogy

$$\mathbf{r} \times \mathbf{F} = \mathbf{M} = \frac{d\mathbf{N}}{dt}$$

Látszik, hogy ha nem hat forgatónyomaték akkor az impulzusmomentum megmarad. Ez az impulzusmomentum tétel. Megjegyzendő még, hogy az erőlökéshez hasonlóan bevezethető az úgynevezett forgatólökés, ami analóg az erőlökéssel.

1.4.3. Munkatétel és energiamegmaradás

Ha egy m tömegű anyagi pontra állandó $\mathbf{F}$ erő hat és azt elmozdítja egy egyenes mentén, akkor az erő $W = \mathbf{Fs}$ munkát végez. Ha az erő nem egy egyenes görbén mozgatja a testet, akkor képezni kell az egyes kis szakaszokon végzett munkát: $\delta W = \mathbf{F}d\mathbf{r}$, amiből a teljes munka egy integrálással kapható meg:

$$W = \int_{r_a}^{r_b} \mathbf{F}(\mathbf{r})d\mathbf{r} = \int_{r_a}^{r_b} m\ddot{\mathbf{r}}d\mathbf{r} = \int_{t_a}^{t_b} \frac{1}{2} \cdot \frac{dm\dot{\mathbf{r}}^2}{dt}dt = \frac{1}{2}m\mathbf{v}_b^2 - \frac{1}{2}m\mathbf{v}_a^2$$

Vezessük be továbbá a kinetikus energiának nevezett mennyiséget: $T = \frac{m}{2}v^2$.
Egy erőteret konzervatívnak nevezünk, ha:

$$\oint_{\partial\gamma} \mathbf{F}d\mathbf{r} = \int_{\gamma} \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{F}d\mathbf{S} = 0 \forall\gamma \Rightarrow \exists\phi : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}, \mathbf{F} = -grad\phi$$

Ha ilyen erőtérrel rendelkezünk, akkor a végzett munka nem függ az útvonaltól, csak a két végponttól, ugyanis

$$W_{AB} = \int_A^B \mathbf{F}d\mathbf{r} = \int_A^B -\boldsymbol{\nabla}\phi d\mathbf{r} = -\int_A^B \left(\frac{\partial\phi}{\partial x}dx + \frac{\partial\phi}{\partial y}dy + \frac{\partial\phi}{\partial z}dz\right) = -\int_A^B d\phi = \phi_A - \phi_B = T_B - T_A$$

tehát konzervatív erőtérben a teljes mechanikai energia állandó: $T_A + V_A = T_B + V_B = E$

1.5. Pontrendszerek és rájuk vonatkozó tételek

A Newton-törvényeket pontszerű testekre mondtuk ki. A testek azonban nem pontszerűek. Ezért szükséges kiterjeszteni az érvényességi kört. Modellezzük a kiterjedt testeket tömegpontok halmazával, amik között belső, centrális erők hatnak.

1.5.1. Impulzustétel és tömegközéppont-tétel

Hassanak a pontrendszerre $\mathbf{F}_i^{(k)}$ külső és $\mathbf{F}_{ij}$ belső erők. Ekkor a mozgásegyenlet a következő alakú:

$$\mathbf{F}_i^{(k)} + \sum_j \mathbf{F}_{ij} = m_i\ddot{\mathbf{r}}_i$$

Adjuk össze ezeket az egyenleteket:

$$\sum_i \mathbf{F}_i^{(k)} + \sum_{i,j} \mathbf{F}_{ij} = \sum_i m_i\ddot{\mathbf{r}}_i$$

A bal oldal második tagja a hatás-ellenhatás törvénye miatt 0. Mivel m_i nem függ az időtől, ezért a bal oldal a $\frac{d}{dt}\sum_i m_i\mathbf{v}_i = \frac{d}{dt}\sum_i \mathbf{p}_i$ alakba írható. Összességében tehát azt kapjuk, hogy

$$\mathbf{F}_e^{(k)} = \sum_i \mathbf{F}_i^{(k)} = \frac{d\mathbf{p}}{dt}$$

Ez az impulzustétel pontrendszerekre vonatkozó alakja.
Vezessük be a $\sum_i m_i = M_t$ jelölést a rendszer teljes tömegére, valamint írjuk az impulzust a következő alakba: $\mathbf{p} = M_t \frac{\sum_i m_i \mathbf{v}_i}{\sum_i m_i}$. Ebből látszik, hogy a tört nem más mint az $\mathbf{r}_0 = \frac{\sum_i m_i \mathbf{r}_i}{\sum_i m_i}$ vektor időderiváltja, $\mathbf{v}_0$. Ezt az $\mathbf{r}_0$ vektort nevezzük a rendszer tömegközéppontjának, a $\mathbf{v}_0$ vektort pedig a tömegközéppont sebességének. Ezek segítségével az impulzustételt a következő alakba írhatjuk:

$$\mathbf{F}_e^{(k)} = \sum_i \mathbf{F}_i^{(k)} = M_t \ddot{\mathbf{r}}_0 = \frac{d\mathbf{p}_0}{dt}$$

Ennek az összefüggésnek nagy jelentősége van, ugyanis sikerült a tömegpontokból álló rendszer mozgását egy pont mozgásával jellemezni. Ebből következik az, hogy ha nem hatnak a rendszerre külső erők, akkor

$$\mathbf{p}_0 = const \Rightarrow \mathbf{v}_0 = const$$

Azaz az impulzus megmarad és a tömegközéppont egyenes vonalú egyenletes mozgást végez vagy nyugalomban van.

1.5.2. Impulzusmomentum-tétel

Hasonlóan a tömegpontokra vonatkozó impulzusmomentum-tétel levezetéséhez, itt is megszorozzuk a mozgásegyenletet balról vektoriálisan $\mathbf{r}_i$ helyvektorral.

$$\mathbf{r}_i \times \mathbf{F}_i^{(k)} + \mathbf{r}_i \times \sum_j \mathbf{F}_{ij} = \mathbf{r}_i \times m_i \ddot{\mathbf{r}}_i$$

Adjuk össze ezeket és vegyük figyelembe az előző részben a jobb oldalra kimondott dolgokat.

$$\sum_i \mathbf{r}_i \times \mathbf{F}_i^{(k)} + \sum_{ij} \mathbf{r}_i \times \mathbf{F}_{ij} = \frac{d}{dt} \sum_i \mathbf{r}_i \times \mathbf{p}_i$$

Mivel a belső erők centrálisak, ezek forgatónyomatéka 0, így teljesen hasonló alakú összefüggést kapunk, mint az egyedüli tömegpont esetében. Bevezetve az eredő mennyiségek jelölését eredményünk a következő:

$$\mathbf{M}_e^{(k)} = \sum_i \mathbf{r}_i \times \mathbf{F}_i^{(k)} = \frac{d}{dt} \sum_i \mathbf{r}_i \times \mathbf{p}_i = \frac{d\mathbf{N}}{dt}$$

Az előzőekhez hasonló módon, itt is látszik, hogy ha nem hat külső forgatónyomaték akkor az impulzusmomentum állandó.
Gyakran célszerű tömegközépponthoz rögzített koordináta-rendszerben vizsgálódni. Ezért meg kell határozni, hogy mi a kapcsolat a tömegközépponti koordináta-rendszerben és az inerciarendszerben felírt impulzusmomentum között. Vezessük be az $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_0 + \boldsymbol{\rho}_i$ és a $\mathbf{v}_i = \mathbf{v}_0 + \boldsymbol{\epsilon}_i$ vektorokat. Ezekből számoljuk végig definíció szerint az impulzusmomentumot.*(ρ a tömegközépponti rendszerből nézett elmozdulása a pontnak, ϵ pedig a sebessége)*

$$\mathbf{N} = \sum_i (\mathbf{r}_0 + \boldsymbol{\rho}_i) \times m_i (\mathbf{v}_0 + \boldsymbol{\epsilon}_i)$$

Tagonként elvégezve a szorzásokat és felhasználva, hogy a tömegközépponti rendszer miatt $\sum_i m_i \boldsymbol{\rho}_i = \sum_i m_i \boldsymbol{\epsilon}_i = 0$. Így a szokásos jelöléseket használva a következő kifejezés marad:

$$\mathbf{N} = \mathbf{r}_0 \times M_t \mathbf{v}_0 + \sum_i \boldsymbol{\rho}_i \times m_i \boldsymbol{\epsilon}_i$$

A fenti kifejezés első tagját $\mathbf{N}_p$ pálya-impulzusmomentumnak, a második tagot pedig $\mathbf{N}_s$ saját-impulzusmomentumnak nevezzük. A pálya-impulzusmomentum a rendszer pálya menti mozgásából adódik, a saját-impulzusmomentum pedig a rendszeren "belüli", tömegközépponthoz viszonyított mozgásokból jön. Megmutatható, hogy ezekre egyenként teljesül az impulzusmomentum megmaradás tétel.
Más vonatkoztatási pontra is levezethető az impulzusmomentum. Ehhez tekintsük az O(forgástengely) pontból O'-be mutató $\mathbf{s}$, az O'-ből P-be mutató $\mathbf{r}'_i$ és az O-ból P-be mutató $\mathbf{r}_i$ vektorokat. Ekkor $\mathbf{r}_i = \mathbf{s} + \mathbf{r}'_i$. Definíció szerint megint végigszámoljuk az impulzusmomentumot az O' pontra.

$$\mathbf{N}' = \sum_i (\mathbf{r}_i - \mathbf{s}) \times m_i (\dot{\mathbf{r}_i - \mathbf{s}})$$

A szorzásokat tagonként elvégezve:

$$\mathbf{N}' = \sum_i \mathbf{r}_i \times m_i \dot{\mathbf{r}}_i - \mathbf{s} \times \sum_i m_i \dot{\mathbf{r}}_i + \dot{\mathbf{s}} \times \sum_i m_i \mathbf{r}_i + \sum_i \mathbf{s} \times m_i \dot{\mathbf{s}} = \mathbf{N} - \mathbf{s} \times M_t \dot{\mathbf{r}}_0 + \dot{\mathbf{s}} \times M_t \mathbf{r}_0 + \sum_i \mathbf{s} \times m_i \dot{\mathbf{s}}$$

Ezt deriválva:

$$\dot{\mathbf{N}}' = \dot{\mathbf{N}} - \dot{\mathbf{s}} \times M_t \dot{\mathbf{r}}_0 - \mathbf{s} \times M_t \ddot{\mathbf{r}}_0 + \ddot{\mathbf{s}} \times M_t \mathbf{r}_0 + \dot{\mathbf{s}} \times M_t \dot{\mathbf{r}}_0 + \dot{\mathbf{s}} \times M_t \dot{\mathbf{s}} + \mathbf{s} \times M_t \ddot{\mathbf{s}}$$

Ebből a második, ötödik és hatodik tagok kiesnek, így a következő marad:

$$\dot{\mathbf{N}}' = \dot{\mathbf{N}} - \mathbf{s} \times M_t \ddot{\mathbf{r}}_0 + \ddot{\mathbf{s}} \times M_t \mathbf{r}_0 + \mathbf{s} \times M_t \ddot{\mathbf{s}} = \sum_i (\mathbf{r}_i - \mathbf{s}) \times \mathbf{F}_i + m(\mathbf{s} - \mathbf{r}_0) \times \ddot{\mathbf{s}} = \mathbf{M}' + m(\mathbf{s} - \mathbf{r}_0) \times \ddot{\mathbf{s}}$$

Ebből az látszik, hogy ahhoz, hogy egy másik, nem forgástengelyre is érvényes legyen az impulzusmomentum-tétel, az szükséges, hogy $\ddot{\mathbf{s}} = 0$, azaz, hogy a tengelyhez képest nem gyorsul az O' pont.

1.5.3. Munkatétel és energiamegmaradás

Szokás szerint a pontrendszerek mozgásegyenletéből indulunk ki. Most skalárisan szorozzuk $\Delta\mathbf{r}_i$-vel.

$$\mathbf{F}_i^{(k)} \Delta\mathbf{r}_i + \sum_j \mathbf{F}_{ij} \Delta\mathbf{r}_i = m_i \ddot{\mathbf{r}}_i \Delta\mathbf{r}_i = \Delta\left(\frac{1}{2} m_i \dot{\mathbf{r}}_i^2\right)$$

A bal oldal első tagját elnevezzük a külső erők munkájának és $\delta W_i^{(k)}$-val jelüljük, a második tag pedig a belső erők munkája, amit $\delta W_i^{(b)}$-vel jelülünk. Bevezetve ezeket a jelöléseket és összeadva az egyenleteket, a rendszer teljes kinetikus energiáját kapjuk:

$$\sum_i \delta W_i^{(k)} + \sum_i \delta W_i^{(b)} = \Delta\left(\sum_i \frac{1}{2} m_i \dot{\mathbf{r}}_i^2\right) = \Delta E_k = W^{(k)} + W^{(b)}$$

Az impulzusmomentum tömegközépponti rendszerbeli kifejezésénél használt jelölésekkel azonos jelölést bevezetve, definíció alapján végigszámolható a tömegközépponti rendszerben kifejezett mozgási energia és a munkatétel. Az eredmények rendre a következők:

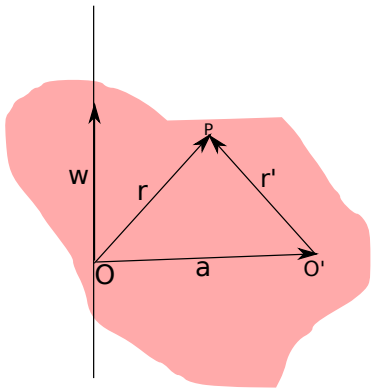
$$E_k = \frac{1}{2} M_t \mathbf{v}_0^2 + \sum_i \frac{1}{2} m_i \boldsymbol{\epsilon}_i^2$$

$$\sum F_i^{(k)} \Delta\boldsymbol{\rho}_i + \sum_{ij} F_{ij} \Delta\boldsymbol{\rho}_i = \Delta\left(\frac{1}{2} \sum_i m_i \dot{\boldsymbol{\epsilon}}_i^2\right)$$

1.6. Merev testek

1.6.1. Merev testekről általában

Merevnek nevezzük azokat a testeket, amikre tetszőleges kölcsönhatás során fennáll, hogy bármely két pontjának távolsága állandó. Három pont megadásához kilenc adat szükséges, viszont a merev kötés miatt felírhatunk három összefüggést, ami szerint három pont közül bármely kettőnek a távolsága állandó. Mivel a kilenc adat közül három nem független egymástól, ezért a merev test helyzete általában hat adattal jellemezhető.
A merev testek mozgása összetehető transzlációs és rotációs mozgások összegéből. Transzlációs mozgásról akkor beszélünk, ha a test bármely két egymással nem párhuzamos szakasza a mozgás során önmagával párhuzamos marad. Rotációs mozgásról akkor beszélünk, ha a testnek van legalább két olyan pontja amely a mozgás során helyben marad. A két pontot összekötő egyenes a forgástengely. Az ezen kívüli pontok ekörül körpályán mozognak. Itt is bevezethető a forgásvektor. Ennek van egy olyan tulajdonsága, hogy nem függ a viszonyítási ponttól. Ennek a bebizonyításához tekintsük a merev test két pontját, O-t és O'-t. Írjuk le mindkét pontból a P pont $\mathbf{v}$ sebességet. A vesszővel ellátott vektor vonatkozik a vesszős pontra. Látható, hogy



1.5 ábra: Szögsebességvektor

$$\mathbf{v}_{telj} = \mathbf{v}_{transz} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}$$

valamint

$$\mathbf{v}_{telj} = \mathbf{v}'_{transz} + \boldsymbol{\omega}' \times \mathbf{r}'$$

Ha az első kifejezésben az $\mathbf{r}$ vektort felbontjuk az $\mathbf{r}'$ és az $\mathbf{a}$ vektorok összegére, akkor láthatjuk, hogy $\mathbf{v}_{telj} = \mathbf{v}_{transz} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{a} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}' = \mathbf{v}'_{transz} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}'$. Tehát egyrészt $\mathbf{v}_{telj} = \mathbf{v}'_{transz} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}'$, másrészt $\mathbf{v}_{telj} = \mathbf{v}'_{transz} + \boldsymbol{\omega}' \times \mathbf{r}'$, azaz $\boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{\omega}'$ és ezt akartuk megmutatni. Statikáról, mozgások összetételéről az [1] könyvben bővebben. Nem túl bonyolult, viszont sok a kép, nem érdemes ide leírni.

1.6.2. Egy szabadsági fokú rendszerek

Tegyük fel, hogy a rendszernek egy szabadsági foka van, azaz egy rögzített tengely körül tud forogni. Ekkor felírhatjuk a következőket:

$$m\ddot{\mathbf{r}}_0 = \mathbf{F}_{sz} + \mathbf{F}_k$$
$$\dot{\mathbf{N}} = \mathbf{M}_{sz} + \mathbf{M}_k$$

Itt az "sz" index a szabad erőre, illetve forgatónyomatékra utal, a k index pedig a tengelyen ébredő kényszererőre és kényszer-forgatónyomatékra. Forgástengelynek válasszuk a t tengelyt. Ekkor a tengelyirányú impulzusmomentum változásra $\dot{\mathbf{N}}_t = \mathbf{M}_{sz_t}$ teljesül. A kényszer-forgatónyomaték kiesik, hiszen a tengely körül szabadon foroghat a test, így arra nem hat semmilyen kényszer.
Írjuk ki az impulzusmomentum z komponensét, és vezessük be az $x_i = l_i cos\varphi$ valamint az $y_i = l_i \sin\varphi$ jelöléseket. Ekkor a következőt kapjuk:

$$N_z = \sum_i (x_i p_{y_i} - y_i p_{x_i}) = \sum_i m_i(x_i\dot{y}_i - y_i\dot{x}_i) = \sum_i m_i\omega(l_i^2 cos^2\varphi + l_i^2 sin^2\varphi) = \omega\sum_i m_i l_i^2 = \Theta_z\omega$$

Azaz

$$\dot{N}_z = \Theta_z\ddot{\varphi}$$

ahol Θ_z a Z tengelyre vonatkoztatott tehetetlenségi nyomaték.

1.6.3. A tehetetlenségi tenzor

Ha folytonos tömegeloszlásra szeretnénk felírni, akkor a szumma helyett integrálás írandó. Azaz a t tengelyre vonatkoztatott tehetetlenségi nyomaték $\Theta_t = \int l^2\rho(\mathbf{r})d^3\mathbf{r}$.
Legyen $\mathbf{e}$ egy tetszőleges tengely, $\mathbf{r}$ pedig a helyvektor. Ekkor látható, hogy $|\mathbf{e}\times\mathbf{r}| = r\sin\theta = l$, ahol θ a forgástengely és a helyvektor közötti szög. Számoljuk ki az l^2 mennyiséget, mert erre a későbbi számolások során szükség lesz.

$$|\mathbf{e}\times\mathbf{r}|^2 \Rightarrow \varepsilon_{klm}e_k r_l \varepsilon_{mpq}e_p r_q = \delta_{kp}\delta_{lq}e_k r_l e_p r_q - \delta_{kq}\delta_{lp}e_k r_l e_p r_q = e_p e_p r_q r_q - e_q r_q e_p r_p$$

A fentit visszaírva indexekről vektorokra a következőt kapjuk:

$$|\mathbf{e}\times\mathbf{r}|^2 = \mathbf{e}^2\mathbf{r}^2 - (\mathbf{er})^2 = \mathbf{r}^2 - (\mathbf{er})^2$$

Felhasználva a fenti kifejezést, definíció alapján végigszámolható a tehetetlenségi tenzor kifejezése:

$$\Theta_t = \int |\mathbf{e}\times\mathbf{r}|^2\rho(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} = \int(\mathbf{e}^2\mathbf{r}^2 - (\mathbf{er})^2)\rho(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} = \int \mathbf{e}(\mathbf{r}^2\underline{\underline{I}} - \mathbf{r}\circ\mathbf{r})\mathbf{e}\rho(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} = \mathbf{e}\underline{\underline{\Theta}}\mathbf{e}$$

Így tehát felírható, hogy

$$\underline{\underline{\Theta}} = \int(\mathbf{r}^2\underline{\underline{I}} - \mathbf{r}\circ\mathbf{r})\rho(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} \to \Theta_{ik} = \int(x_l^2\delta_{ik} - x_i x_k)\rho(\mathbf{r})d^3\mathbf{r}$$

A teljes mátrix tehát

$$\begin{pmatrix} \int\rho(\mathbf{r})(y^2+z^2)d^3\mathbf{r} & -\int\rho(\mathbf{r})(xy)d^3\mathbf{r} & -\int\rho(\mathbf{r})(xz)d^3\mathbf{r} \\ -\int\rho(\mathbf{r})(xy)d^3\mathbf{r} & \int\rho(\mathbf{r})(x^2+z^2)d^3\mathbf{r} & -\int\rho(\mathbf{r})(yz)d^3\mathbf{r} \\ -\int\rho(\mathbf{r})(xz)d^3\mathbf{r} & -\int\rho(\mathbf{r})(yz)d^3\mathbf{r} & \int\rho(\mathbf{r})(x^2+y^2)d^3\mathbf{r} \end{pmatrix}$$

A mátrix főátlójában az adott x,y,z tengelyre vonatkozó tehetetlenségi nyomatékok vannak, a nem diagonális elemek pedig az úgynevezett deviációs*(eltérítő)* nyomatékok. A nevük onnan ered, hogy ezek a nyomatékok el akarják téríteni a forgástengelyt az eredeti iránytól.
Ahhoz, hogy ezt lássuk, tekintsünk egy rögzített z tengely körül forgó merev testet, amire nem hat se szabad erő, se szabad forgatónyomaték, csak az esetleges kényszerek. Ekkor az egyes komponenseket kiírva*(a többi is így néz ki)* és felhasználva, hogy a test pontjai az egyes x-y síkokban körmozgást végeznek*(azaz: $\ddot{x}_i = -\omega^2 x_i$)*, a következőt kapjuk:

$$F_{x_k} = \ddot{x}\sum_i m_i = -\omega^2 x\sum_i m_i$$

Ezt felhasználva

$$M_{x_k} = \frac{d}{dt}\sum_i m_i(y\dot{z} - z\dot{y}) = -\frac{d}{dt}\sum_i m_i z\dot{y} = -\sum_i m_i(\dot{z}\dot{y} - z\ddot{y}) = -\sum_i m_i z\ddot{y} = \omega^2\sum_i m_i zy = -\Theta_{yz}\omega^2$$

Azt kaptuk tehát, hogy a deviációs nyomaték arányos a kényszer-forgatónyomatékkal, ami éppen a tengelyt próbálja elforgatni.
Nézzük meg, hogy mi a kapcsolat két egymással párhuzamos tengelyre kifejezett forgatónyomaték között, ha az egyik tengely a tömegközépponton megy át. "Toljuk el" a tengelyt az x tengelyen s-el. Ekkor

$$\Theta_t = \int \left((x-s)^2 + y^2\right) \rho(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \int (x^2+y^2)\rho(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} - \int 2sx\rho(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} + \int s^2\rho(\mathbf{r})d^3\mathbf{r}$$

Itt a második tag 0, mivel ez egyenlő $2sMx_{tkp}$, és tömegközépponti rendszerben $x_{tkp} = 0$. Összességében tehát:

$$\Theta_t = \Theta_z + s^2 \cdot M$$

Nagyon fontos tulajdonsága még a tehetetlenségi tenzornak, hogy szimmetrikus. Ez a tulajdonság lehetővé teszi a tenzor diagonizálását. Ha a koordináta-rendszer tengelyeit az úgynevezett főtehetetlenségi irányokba vesszük fel*(a tenzor sajátvektorainak az iránya)*, akkor a tenzornak csak diagonális komponensei maradnak. Ekkor a $\Theta_e = \mathbf{e}\underline{\underline{\Theta}}\mathbf{e}$ kifejezést tagonként kiírva és a bal oldalt 1-re normálva a következő eredményre jutunk:

$$1 = \Theta'_{ik}e'_ie'_k = \Theta'_{11}e_1^{'2} + \Theta'_{22}e_2^{'2} + \Theta'_{33}e_3^{'2}$$

Itt a ' arra utal, hogy valamilyen konstanssal le vannak osztva az eredetihez képest. Látható, hogy ez egy másodrendű felület egyenlete, nevezetesen egy ellipszoidé. Ha nem diagonalizáltuk volna a mátrixot, akkor az azt eredményezi, hogy megjelennek különböző vegyes tagok is. Tehát az ellipszoid tengelyeinek az iránya megegyezik az főtehetetlenségi tengelyek irányával. Ezt az ellipszoidot tehetetlenségi ellipszoidnak nevezzük. Megkülönböztethetők speciális esetek. Például, ha a főátlóbeli elemek közül kettő egyenlő, akkor a másodrendű felület egy forgási ellipszoidot ír le, ami azt eredményezi, hogy $\mathbf{e}_1$ illetve $\mathbf{e}_2$ síkban minden tengely főtengely. Ha pedig minden főátlóbeli elem egyenlő, akkor a tehetetlenségi ellipszoidból egy gömb lesz. Ilyenkor minden tengely főtengely.

1.6.4. A merev test mozgási energiája, impulzusa, impulzusmomentuma

Először számoljuk ki a merev test mozgási energiáját. Az általános leírásban közölt sebesség definíciós kifejezését négyzetre emelve és beírva a mozgási energia képletébe, a következőt kapjuk:

$$T = \int \frac{\rho}{2}\mathbf{v}^2 dV = \frac{1}{2}\int \rho\mathbf{v}_0^2 dV + \frac{1}{2}\int \rho(\boldsymbol{\omega}\times\mathbf{r})^2 dV + \int \rho(\boldsymbol{\omega}\times\mathbf{r})\mathbf{v}_0 dV$$

Ebben a kifejezésben az első tag a transzlációs mozgásból, a második tag pedig a rotációs mozgásból ered. A harmadik tag az úgynevezett kölcsönös mozgási energia, ez azonban tömegközépponti rendszerben 0. A második tagot a tehetetlenségi tenzor bevezetésénél látott mellékszámolás eredményének segítségével az $E_{forg} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\omega}\underline{\underline{\Theta}}\boldsymbol{\omega}$ alakra lehet hozni.

Az impulzus meghatározásához is az általános leírásban kimondott sebességdefiníciót használjuk.

$$\mathbf{p} = \sum m_i\mathbf{v}^{(i)} = \sum_i m_i(\mathbf{v}_0 + \boldsymbol{\omega}\times\mathbf{r}^{(i)}) = M\mathbf{v}_0 + \boldsymbol{\omega}\times\mathbf{r}_s M$$

Amennyiben tömegközépponti rendszerben dolgozunk, akkor a második tag 0, tehát a teljes impulzus megegyezik a tömegközéppont impulzusával.

Az impulzusmomentumot is definíció alapján lehet végigszámolni.

$$\mathbf{N} = \int \mathbf{r}\times\mathbf{v}\rho dV = \int \mathbf{r}\times(\mathbf{v_0} + \boldsymbol{\omega}\times\mathbf{r})\rho dV = \int \mathbf{r}\rho dV \times \mathbf{v}_0 + \int \mathbf{r}\times(\boldsymbol{\omega}\times\mathbf{r})\rho dV$$

Ezen kifejezés első tagjában elvégezve az integrálást, valamint a második tagra alkalmazva a kifejtési tételt és a kifejtési tételből kapott újabb két tag negatív előjelű tagjára alkalmazva a diadikus szorzat definícióját a következőt kapjuk:

$$\mathbf{N} = M\mathbf{r_s}\times\mathbf{v}_0 + \underline{\underline{\Theta}}\boldsymbol{\omega}$$

A merev testek mozgásegyenletének a levezetése sima és együtt forgó koordináta-rendszerben benne van a 21. B-s elm. mecha tételben. Ide nem írom le, mert nem olyan nehéz. Elég csak egyszer-kétszer átfutni.

1.6.5. Euler-egyenletek, Euler-szögek és pörgettyűk

Az egy pontjukban rögzített merev testeknek három szabadsági foka van, így három egyenlet szükséges ahhoz, hogy a mozgásokat leírhassuk. Vizsgáljuk a test mozgását együtt forgó rendszerben, állandó tehetetlenségi tenzor mellett úgy, hogy az együtt forgó rendszer a főtengely rendszer. Ekkor az adódó három egyenletet Euler-egyenleteknek nevezik. Ezek a $\frac{d\mathbf{N}}{dt} = \frac{d\mathbf{N}'}{dt} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{N} = \mathbf{M}$ összefüggésből jönnek:

$$\Theta_1\dot{\omega}_1 + (\Theta_3 - \Theta_2)\omega_3\omega_2 = M_1$$

$$\Theta_2\dot{\omega}_2 + (\Theta_1 - \Theta_3)\omega_1\omega_3 = M_2$$

$$\Theta_3\dot{\omega}_3 + (\Theta_2 - \Theta_1)\omega_2\omega_1 = M_3$$

Az egyenletek első tagja a közönséges forgásból ered, a második tag pedig a testre ható centrifugális erő forgatónyomatéka. Ez levezethető a definíciókból. A centrifugális erő kifejezésére használni kell a kifejtési tételt, majd arra a forgatónyomaték definícióját, ami után ki kell használni, hogy a deviációs nyomatékok főtengely rendszerben eltűnnek.

Szimmetrikus erőmentes pörgettyű: Az, hogy a pörgettyű erőmentes, azt jelenti, hogy nem hatnak forgatónyomatékok, valamint a szimmetria miatt a három tehetetlenségi nyomaték közül kettő megegyezik. Legyen pl. $\Theta_1 = \Theta_2 \neq \Theta_3$, ilyenkor az egyenletrendszer

$$\Theta_1\dot{\omega}_1 + (\Theta_3 - \Theta_2)\omega_3\omega_2 = 0$$

$$\Theta_1\dot{\omega}_2 + (\Theta_1 - \Theta_3)\omega_1\omega_3 = 0$$

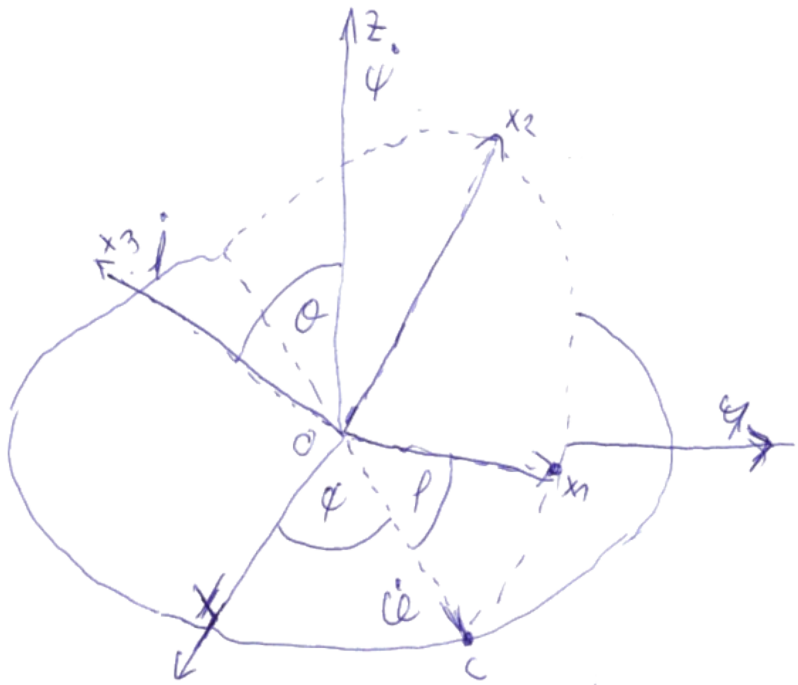
$$\Theta_3\dot{\omega}_3 = 0$$

alakú. A harmadik egyenletből az következik, hogy $\omega_3 = const.$ Ilyenkor ha bevezetjük az $\alpha = \frac{\Theta_3 - \Theta_1}{\Theta_1}\omega_3$ jelölést, akkor az első két egyenletből azt kapjuk, hogy

$$\dot{\omega}_1 = -\alpha\omega_2$$

$$\dot{\omega}_2 = \alpha\omega_1$$

Ennek a differenciálegyenletnek a megoldásából azt kapjuk, hogy $\omega_1 = acos(\alpha t + \delta)$, valamint $\omega_2 = asin(\alpha t + \delta)$. Azaz szögsebességvektor egyenletes körmozgással egy kúpot jár körbe a szimmetriatengely körül, miközben a pörgettyű is forog a forgástengely körül, valamint a szögsebességvektor abszolút értéke állandó.



1.6 ábra: Euler-szögek

Jelenleg egy együtt forgó rendszerben dolgoztunk, ami nem inerciarendszer. Ahhoz, hogy rendszer viselkedését a K inerciarendszerből leírhassuk, célszerű bevezetni az úgynevezett Euler-szögeket. Ezek definíciója az 1.6-os ábrán látható. A $\theta \in [0, \pi]$, $\psi \in [0, 2\pi]$ és a $\varphi \in [0, 2\pi]$. Fejezzük ki a jelzett $\dot{\theta}$, $\dot{\psi}$, $\dot{\varphi}$ szögsebességek vetületeit az x_1, x_2, x_2 tengelyekre. Ez ahhoz kell, hogy később ki tudjuk fejezni az $\boldsymbol{\omega}$ szögsebességvektor komponenseit a mozgó koordináta-rendszerben. Mint látjuk a $\dot{\theta}$ vektort az OC csomóvonal irányába mutat, így a $\dot{\theta}$ vetületei:

$$\dot{\theta}_{x_1} = \dot{\theta}cos\varphi$$

$$\dot{\theta}_{x_2} = -\dot{\theta}sin\varphi$$

$$\dot{\theta}_{x_3} = 0$$

Itt az első egyenletben a $cos\varphi$ az x_1 tengelyre vetít, míg a $sin\varphi$ az x_2-re, a harmadik komponens pedig nulla, mivel ez a vektor merőleges az x_3 tengelyre.
A $\dot{\psi}$ vektor z tengely irányú. A vetített komponensek a következők:

$$\dot{\psi}_{x_1} = \dot{\psi} sin\theta sin\varphi$$
$$\dot{\psi}_{x_2} = \dot{\psi} sin\theta cos\varphi$$
$$\dot{\psi}_{x_3} = \dot{\psi} cos\theta$$

Itt a miérteket könnyebb úgy látni, hogy először a harmadik komponenst nézzük. Ugyanis nagyon könnyen látszik az, hogy a $cos\theta$ az x_3 tengelyre vetít. Így már könnyen látszik, hogy a $sin\theta$ pedig az erre merőleges x_1-x_2 síkra vetít. Ezen a síkon belül pedig már látszik, hogy a maradék két szögfüggvény hova vetít. A $\dot{\varphi}$ vektor x_3 irányú, ami merőleges mind az x_1-re, mind az x_2-re, ezért egyedül a $\dot{\varphi}_{x_3} = z$ komponens nem 0.
Ezekkel kifejezve a szögsebesség komponenseket és beírva az inerciarendszerben érvényes mozgásegyenletbe a következő egyenletrendszert kapjuk:

$$N_{x_1} = N sin\theta sin\varphi = \Theta_1(\dot{\theta} cos\varphi + \dot{\psi} sin\theta sin\varphi)$$
$$N_{x_2} = N sin\theta cos\varphi = \Theta_2(-\dot{\theta} sin\varphi + \dot{\psi} sin\theta cos\varphi)$$
$$N_{x_3} = N cos\theta = \Theta_3(\dot{\varphi} + \dot{\psi} cos\theta)$$

Tudjuk az előző számolásból, hogy $\omega_3 = const$. Ez az Euler-szögek szempontjából azt jelenti, hogy $\theta = const$, tehát a θ deriváltjait tartalmazó tagok eltűnnek. Így tehát:

$$N_{x_1} \Rightarrow \dot{\psi} = \frac{N}{\Theta_1} \Rightarrow \omega_1 = acos(\alpha t + \delta) = \frac{N}{\Theta_1} sin\theta_0 \cdot sin\varphi$$

hasonlóan

$$\omega_2 = asin(\alpha t + \delta) = \frac{N}{\Theta_1} sin\theta_0 \cdot cos\varphi$$

A két fenti egyenletből azt kapjuk, hogy

$$\theta = \theta_0$$
$$\psi = \frac{N}{\Theta_1} t + \psi_0$$
$$\varphi = -\alpha t + \varphi_0$$

Az első és a második egyenlet azt jelenti, hogy a pörgettyű szimmetriatengelye az inerciarendszerben állandó impulzusmomentum körül egy θ_0 félnyílásszögű kúp mentén egyenletesen forog $\frac{N}{\Theta_1}$ szögsebességgel. A harmadik egyenlet pedig a test szimmetriatengely körüli forgására vonatkozik. Ez szerint α szögsebességgel egyenletesen forog. Ez a szögsebesség függ a különböző tehetetlenségi nyomatékoktól*(α definíciója)*. A pillanatnyi forgástengelyt meghatározó ω a $\dot{\psi}$ és a $\dot{\varphi}$ vektorok összege, tehát ez mindig a z-x_3 által meghatározott síkban van és az x_3 tengellyel együtt forog az z tengely körül. A pillanatnyi forgástengely iránya tehát folyton változik.

Rögzített, súlyos, szimmetrikus pörgettyű, nem a tömegközéppontban alátámasztva: Ebben az esetben is működnek az Euler-egyenletek, de bonyolulttá válnak. Célszerű helyette Lagrange-formalizmusban dolgozni. Ekkor a rendszer Lagrange-függvénye:

$$L = \frac{\Theta_1}{2}\omega_1^2 + \frac{\Theta_1}{2}\omega_2^2 + \frac{\Theta_3}{2}\omega_3^2 - V(\theta, \psi, \varphi) = \frac{\Theta_1}{2}(\dot{\theta}^2 + \dot{\psi}^2 sin^2\theta) + \frac{\Theta_3}{2}(\dot{\varphi} + \dot{\psi} cos\theta)^2 - mglcos\theta$$

Ebből kiszámíthatók az egyes komponensek:

$$\varphi : \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = \frac{\partial L}{\partial \varphi} = 0 \Rightarrow \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = \Theta_3(\dot{\varphi} + \dot{\psi} cos\theta) = \Theta_3\omega_3 = N_{z'} = const$$

$$\psi : \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}} = \frac{\partial L}{\partial \psi} = 0 \Rightarrow \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}} = (\Theta_1 sin^2\theta + \Theta_3 cos^2\theta)\dot{\psi} + \Theta_3 cos\theta\dot{\varphi} = const = N_z$$

Ebből $\dot{\psi}$-t kifejezve:

$$\dot{\psi} = \frac{N_z - \Theta_3\omega_3 cos\theta}{\Theta_1 sin^2\theta}$$

Hasonló átalakításokkal ki lehet fejezni a $\dot{\varphi}$ és a $\dot{\theta}$ mennyiségeket is. A $\dot{\theta}^2$ mennyiségből számítható lenne a periódusidő, de ez a kifejezés egy elliptikus integrálra vezet.
Ebben a példában egyébként a θ szög nem állandó, hanem egy $[\theta_1; \theta_2]$ intervallumban változik. Ezt nutációnak nevezik. A ψ szög sem egyenletesen változik, ahogy az a fenti kifejezésen is látszik. Ezek azt eredményezik, hogy a pörgettyű szimmetriatengelye "hímestojás" szerű mintákat "rajzol", ahogy egyszerre nutál és precesszál. A pörgettyű szimmetriatengely körüli forgása sem egyenletes, hanem ez is ingadozik. Ezek mind láthatóak lennének a fent használt Euler-szögek deriváltjaiból, ha meghatároztam volna a teljes kifejezést.

1.7. Relativisztikus kinematika és dinamika

1.7.1. A relativitáselmélethez vezető út

Ez itt nagyon meseszerű. Érdemes átnézni dgy specrel specijét.
A speciális relativitáselmélet a fizikának azon területein megkerülhetetlen, amelyek nagy sebességű mozgásokkal és a részecskék átalakulásaival foglalkoznak. A newtoni mechanika, a relativisztikus mechanika és az általános relativitáselmélet kiindulópontjában egy-egy gondolatkísérlet áll, amelyben valamilyen vonatkoztatási rendszer játszik alapvető szerepet.
A newtoni mechanikában az egymáshoz képest egyenes vonalú egyenletes mozgást végző inerciarendszerek között az áttérést a Galilei-transzformációval lehet megtenni.

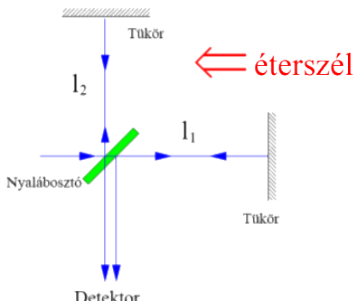
$$r' = r + vt$$

$$t' = t$$

Nagy felfordulást okozott a fizikában az elektrodinamika megjelenése. Vizsgáljunk például egy, a saját koordináta-rendszerében nyugvó elektront. Ebben a rendszerben az elektronnak csak elektrosztatikus tere van, nem sugároz. Ugyanakkor nézzük a rendszert egy olyan koordináta-rendszerből, amiből nézve az elektron rendszere egyenes vonalú egyenletes mozgást végez**(az elektron ugyan úgy nyugszik a saját rendszerében)**. Ekkor viszont az álló rendszerből azt látjuk, hogy az elektron sugároz. A két inerciarendszer tehát nem ekvivalens, nem ugyanazt látjuk. Úgy is lehet mondani, hogy a hullámegyenlet nem invariáns a Galilei-transzformációra. A Maxwell egyenletek tehát csak egyetlen kitüntetett, az éterhez rögzített koordináta-rendszerben érvényesek.

1.7.2. Michelson-Morley kísérlet

Az éter létezésének kimutatására szolgált a Michelson-Morley kísérlet, melyet 1883-ban végeztek el. Az elméletileg feltételezett éter a fény terjedésének közege lett volna. Ha ez igaz lenne, akkor a közeghez képest relatív mozgást végző megfigyelő másnak méri a fénysebességet. A kísérleti elrendezés egy fényforrásból állt, annak a fényét egy féligáteresztő tükörrel kettéosztották, majd az azonos utakon visszaverődő fénysugarakkal interferenciát hoztak létre. Ez az elrendezés elvileg lehetővé teszi azt, hogy van-e eltérés a különböző helyeken mért fénysebesség között. Ugyanis ha az interferométer azonos útjain más a fénysebesség, akkor eltérés jelentkezik az interferencia képekben. A kísérletet félév különbséggel megismételték, ekkor ugyanis a Föld éppen ellenkező irányban halad a feltételezett éterben, akármilyen mozgást is végez az. Az elméletileg megjósolt eltérések a vizsgálati időpontokban nem jelentkeztek, ezért erőteljesen kétségessé vált az éter elmélet tarthatósága.



1.7 ábra: Michelson interferométer

1.7.3. Az elmélet alapjai

Ennek a feloldására több próbálkozás is volt, győztesként az a megállapítás került ki, hogy módosítani kell az inerciaelveket, valamint jelen formájában a klasszikus mechanika nem teljesen igaz. Az elmélet alapjait Albert Einstein tette le. A speciális relativitáselmélet alapgondolata az, hogy a módosított inerciaelvekkel már minden inerciarendszer egyenértékű. Nem csak a mechanikában, de az egész fizikában. Másik alapelv az, hogy a fénysebesség minden inerciarendszerben ugyanaz. Tehát $\frac{\Delta x}{\Delta t} = c$ minden inerciarendszerben. Ezt átrendezve azt kapjuk, hogy

$$c^2\Delta t - \Delta x^2 = 0$$

Azaz ez a mennyiség invariáns arra a transzformációra, ami egyik inerciarendszerből a másikba visz át. Ezt a transzformációt kell megtalálni. Levezethető, hogy ez nem más, mint egy hiperbolikus forgatás a téridőben.

$$\begin{pmatrix} ct \\ x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ch\chi & sh\chi \\ sh\chi & ch\chi \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} ct' \\ x' \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} ct_0 \\ x_0 \end{pmatrix}$$

Itt $\chi = arcth\frac{v}{c}$-t a rapiditás paraméternek nevezzük, magát a transzformációt pedig Lorentz-transzformációnak. Ha egymás után alkalmazunk két különböző rapiditás paraméterű Lorenzt-transzformációt, akkor ezt végigszámolva és a hiperbolikus függvények tulajdonságait felhasználva, megmutatható, hogy a rapiditás paraméter additív, azaz $\underline{\underline{L}}(\chi_1)\underline{\underline{L}}(\chi_2) = \underline{\underline{L}}(\chi_1 + \chi_2)$. A csoportaxiómák vizsgálatával az is megmutatható, hogy a Lorentz-transzformációk csoportot alkotnak.

A rapiditás definíciójából v-t kifejezve azt kapjuk, hogy $|v| = c\,|\chi|$, azaz az inerciarendszerek egymáshoz viszonyított sebessége kisebb mint c. Vegyünk két különböző sebességet a rapiditással kifejezve, és adjuk össze őket:

$$v_3/c = th(\chi_1 + \chi_2) = \frac{th\chi_1 + th\chi_2}{1 + th\chi_1 th\chi_2} = \frac{\frac{v_1}{c} + \frac{v_2}{c}}{1 + \frac{v_1}{c}\frac{v_2}{c}} \Rightarrow v_3 = \frac{v_1 + v_2}{1 + \frac{v_1 v_2}{c^2}}$$

Ezt Einstein-féle sebesség összeadási képletnek nevezzük.

1.7.4. Paradoxonok

Taylor-Wheelerben.

1.7.5. Kauzalitás

A Lorentz-transzformáció képletéből lehet látni, hogy két esemény egymáshoz képesti ideje sem egyezik meg feltétlenül. Lehet, hogy az egyik rendszerben A esemény van a B előtt, a másik rendszerben B az A előtt, egy harmadik rendszerben pedig egyidejűek. Ez így magában sértheti a kauzalitást. Mert legyen pl. A esemény az, hogy letettünk valahova egy bombát, B pedig az, hogy ugyanott felrobbant. Ilyenkor a fentiek alapján lehet olyan rendszer, ahol előbb robban fel a bomba*(esetleg nem is ugyanott)* mint, hogy letetettük volna. Ez értelemszerűen nem lehetséges, hiszen ellent mond a kauzalitásnak. Meg kell tehát mondani, hogy egy eseménypárhoz mikor milyen rendszert találhatunk. Ehhez csoportosítani kell az eseményeket. Megkülönböztetünk térszerűen, időszerűen és fényszerűen elválasztott eseményeket. Az időszerűen elválaszott eseményekre az teljesül, hogy $c^2\Delta t^2 - \Delta x^2 > 0$. Tehát ha az eseményeket egy x-t rendszerben szeretnénk ábrázolni, akkor ezek az események az $x = ct$ egyenes "felett" helyezkednek el. Ilyenkor olyan rendszereket találhatunk, ahol az események egy helyen vannak, de egymás után. Térszerűen elválaszott események azok, amikre $c^2\Delta t^2 - \Delta x^2 < 0$, tehát ezek az $x = ct$ egyenes "alatt" vannak. Ilyenkor olyan rendszereket lehet találni, ahol az események egy időben vannak, de nem ugyanott. Az események fényszerűen vannak elválasztva, ha $c^2\Delta t^2 - \Delta x^2 = 0$.
Vizsgáljuk meg, hogy mely események között lehet kauzális kapcsolat. Időszerűen elválasztott eseményeknél $c^2 t_F^2 - x_F^2 > 0$. Ebből az következik, hogy $v_F = \left|\frac{x_F}{t_F}\right| < c$. Időszerűen elválasztott események esetén tehát a lehetséges hatás c-nél kisebb sebességgel terjed. Ugyanilyen módon végigszámolva azt kapjuk, hogy térszerű események között viszont nem lehet hatást közvetíteni, ugyanis ahhoz $v_F > c$ kellene, ami nem lehetséges. Fényszerűen elválasztott eseményeknél pedig $v_F = c$, ami szintén nem lehetséges. Kauzális kapcsolat tehát csak időszerűen elválasztott események között lehet. Tehát bárhogy is válogatjuk az inerciarendszereket, nem fogunk olyat találni, amelyben két időszerű esemény időpontja felcserélődik.

1.7.6. Sajátidő

A Lorentz-transzformáció képletéből kifejezhető, hogy $\Delta t = ch\chi(t)\Delta t' = \frac{1}{\sqrt{1+\frac{v^2(t)}{c^2}}}\Delta t' = \frac{1}{\sqrt{1+\frac{v^2(t)}{c^2}}}\Delta\tau$.
$\Delta\tau$ a mozgó rendszerben eltelt idő, vagy más néven sajátidő. A mozgó rendszerben eltelt teljes idő, tehát előáll a

$$\tau = \int \Delta\tau = \int_{t_1}^{t_2} dt\sqrt{1 + \frac{v^2(t)}{c^2}} \leq \int_{t_1}^{t_2} dt = t_2 - t_1$$

Az űrutazó tehát mindig fiatalabb mint a Földön maradt testvére.

1.7.7. Relativisztikus fizika

Terjeszkedjünk ki több dimenzióba. Ekkor a $c^2\Delta t - \Delta x^2 - \Delta y^2 - \Delta z^2 = 0$ mennyiségnek kell invariánsnak lennie. A relativisztikus fizika műveléséhez a tér és az idő koordinátákat egyben kell kezelni, hiszen ezek egybe tartoznak*(téridő)*. Ezért be kell vezetni a négyesvektorokat és a fizika törvényeit ezekkel a négyesmennyiségekkel megfogalmazni. A téridő négyesvektor

$$x^\mu = \begin{pmatrix} ct \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

Vezessük be még a négyesvektorok skaláris szorzását is $a_\mu b^\mu = a_0 b_0 - a_1 b_1 - a_2 b_2 - a_3 b_3$. Az alsó indexes vektort kovariáns vektornak, a felső indexeset pedig kontravariáns vektornak nevezik. A kettő között formailag annyi a különbség, hogy a kovariáns vektor tér része -1-szerese a kontravariáns vektor tér részének.
Ha kicsit elgondolkozunk, akkor észrevehetjük, hogy az optikában már láttunk négyesvektorokat, nem máshol mint a fázis kifejezésénél:

$$e^{i\Phi} = e^{i(\mathbf{kr} - \omega t)} = e^{-i(\frac{\omega}{c}ct - k_1 x - k_2 y - k_3 z)}$$

Ezek alapján vezessük be a négyeshullámszám vektort a következő definicióval:

$$k^\mu = \begin{pmatrix} \frac{\omega}{c} \\ k_1 \\ k_2 \\ k_3 \end{pmatrix}$$

Nézzük meg, hogy 1+1 dimenzióban mi történik a hullámszámvektor transzformálódásakor az első komponenssel. Alkalmazva a Lorentz-transzformációt és ω'-re rendezve

$$\omega' = \omega ch\chi - c \cdot ksh\chi = ch\chi(\omega - c \cdot kth\chi) = ch\chi(\omega - vk) = \frac{\omega - vk}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

a relativisztikus Doppler-effektus képlete adódik. Speciálisan fényre $k = \frac{\omega}{c}$ esetén $\omega' = \omega e^{-\chi}$ adódik.
Az optikaival analóg módon vezessük be mechanikában a négyesimpulzus vektort a következő definicióval:

$$p^\mu = \begin{pmatrix} \frac{E}{c} \\ p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{pmatrix}$$

Az energia transzformálódására az előző számolással azonos módon

$$E' = \frac{E - pv}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

adódik. Így változik a rendszer energiája transzformálódás során. Az is látszik, hogy E önmagában nem határozza meg E'-t, csak p-vel együtt, de ha az adott rendszer Hamilton-függvénye ismert, akkor $E'(E)$ is kiszámolható.
Számítsuk ki a négyesimpulzus vektor abszolút értékét is. $p_\mu p^\mu = \frac{E^2}{c^2} - p^2 := M^2c^2$. Itt M egy tömeg dimenziójú skalár, ami a transzformáció során nem változik. Ha K'-ben $p' = 0$, akkor $E_0 = Mc^2$. Ez a rendszer nyugalmi energiája. Áttranszformálva K-ra, az $E = \frac{Mc^2}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$ kifejezést kapjuk.

Tömegdefektus, Novobáztky-effektus a diában

2. A klasszikus mechanika elvei(Novák Martin)

A mechanika mozgástörvényének Newtontól származó megfogalmazása a differenciálszámítással együtt lehetővé tette, hogy pl. egy pontrendszer mechanikai állapotát a kezdeti állapotból a környezettel való kölcsönhatás ismeretében bármely későbbi időpontban meghatározzuk. Mintegy két évszázadon keresztül sok kiváló matematikus érdeklődése irányult a mechanikai problémák felé, és tulajdonképpen ennek eredményeként alakult ki a klasszikus mechanika, amely az elméleti fizikai tanulmányoknak ma is az alapját képzi. Ezek a matematikai jellegű kutatások nemcsak egy-egy fizikai probléma megoldásával járultak hozzá az elmélet teljes kiépítéséhez, hanem az alapegyenletek más alakban való megfogalmazásait is adták. Így születtek a mechanikai elvei. Ezek egyenértékűek a Newton-féle mozgásegyenletekkel, de sokszor előnyösebb a használatuk, mert különösen kényszermozgások esetén könnyebben kezelhetők, másrészt a mozgástörvény általánosabb érvényű megfogalmazását teszik lehetővé. A mechanika elvei nem bizonyítható axiómák, amelyek helyességéről és érvényességéről a tapasztalat útján győződünk meg.

2.1. Lagrange-féle elsőfajú mozgásegyenletek

A testre ható erőkön kívül más külső körülmények is hatással vannak a testek mozgására. Például a mozgás során egy meghatározott felületen kell mozognia. Az ilyen mozgásokat kényszermozgásnak nevezzük.
Használjuk fel azt a tapasztalati tényt, hogy ha nincs súrlódás, akkor a kényszerfelület csak "támasztékként" viselkedik, tehát a kényszererő mindig merőleges az f kényszerfelületre. Írjuk fel amit tudunk: a dinamika alaptörvényét úgy, hogy a kényszererő iránya megegyezik a felületi normálissal, és arányos egy konstanssal, amit Lagrange-multiplikátornak nevezünk, valamint a kényszerfelület egyenletét.

$$m\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F} + \lambda \boldsymbol{\nabla} f$$

$$f(\mathbf{r}, t) = 0$$

Először tegyük fel, hogy a felület explicit módon nem időfüggő. Deriváljuk kétszer idő szerint és fejezzük ki az $\ddot{x}$, $\ddot{y}$, $\ddot{z}$ mennyiségeket a mozgásegyenletből. Ezzel a λ mennyiség meghatározható, amit ha visszahelyettesítünk a mozgásegyenletbe, megkapjuk a mozgást leíró differenciálegyenlet-rendszert.

Példa: Mozgás lejtőn: A kényszerfelület egy α hajlásszögű lejtő, egyenlete és gradiense és idő szerinti második deriváltja rendre:

$$f(\mathbf{r}) = z - y \cdot tg\alpha \tag{1}$$

$$\boldsymbol{\nabla} f = \begin{pmatrix} 0 \\ -tg\alpha \\ 1 \end{pmatrix} \tag{2}$$

$$\ddot{f} = \ddot{z} - \ddot{y} \cdot tg\alpha = 0 \Rightarrow \ddot{z} = \ddot{y} \cdot tg\alpha \tag{3}$$

Szabad erőként hasson egyedül a nehézségi erő:

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -mg \end{pmatrix}$$

A mozgásegyenletek komponensei tehát

$$\begin{cases} m\ddot{x} = 0 \\ m\ddot{y} = -\lambda \cdot tg\alpha \\ m\ddot{z} = -mg + \lambda \end{cases}$$

A mozgásegyenletek második és harmadik tagját behelyettesítve a (3) egyenletbe és azt megoldva λ-ra, azt kapjuk, hogy:

$$\lambda = \frac{mg}{1 + tg^2\alpha}$$

Ezt visszahelyettesítve a mozgásegyenletekbe, azok megoldhatóvá válnak. *(ha máshogy nem akkor számítógéppel)*

2.2. Virtuális munka elve

Gondoljunk el egy N anyagi pontból álló mechanikai rendszert. Vezessük be a $\delta\mathbf{r}_i$ mennyiséget, az i-edik anyagi pont olyan elgondolt lehetséges elmozdulását, amelyet a kényszerfeltételek megengednek. Ezt virtuális elmozdulásnak nevezzük. *(Ez tulajdonképpen a pálya egy olyan nem idő szerinti variációja, ami eleget tesz a kényszereknek.)*

A virtuális munka elve: Szabad erők virtuális munkája 0. Azaz $\sum_{i=1}^{N} \mathbf{F}_i \delta\mathbf{r}_i = 0$

Megmutatható, hogy ez ekvivalens Newton II. törvényével. Ha ugyanis az anyagi pontok szabadon mozognak, tehát nincsenek kényszerek, akkor $\mathbf{F}_i = 0$ minden i-re. Ha nem mozognak szabadon, akkor a virtuális elmozdulásoknak a kényszereket is ki kell elégíteniük. Tegyük fel, hogy ezek leírhatók

$$\varphi_k(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, ..., \mathbf{r}_N) = 0$$

alakban, ahol $k \in [1 : s], s < 3N$. Ha elmozdulna a rendszer $\delta\mathbf{r}_i$-vel, akkor a kényszerfeltételeknek ezen a helyen is teljesülnie kell. Azaz

$$\varphi_k(\mathbf{r}_1 + \delta\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 + \delta\mathbf{r}_2, ..., \mathbf{r}_N + \delta\mathbf{r}_N) = 0$$

Fejtsük Taylor-sorba φ_k-t a helyvektorok környezetében, annak figyelembevételével, hogy a virtuális elmozdulások olyan kicsik, hogy az elsőrendűnél magasabb tagok elhagyhatók.

$$\varphi_k(..., \mathbf{r}_i + \delta\mathbf{r}_i, ...) = \varphi_k(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, ..., \mathbf{r}_N) + \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{\nabla}_i \varphi_k \delta\mathbf{r}_i$$

Itt a $\boldsymbol{\nabla}_i$ azt jelzi, hogy az i helyváltozó szerint kell elvégezni a deriválást. A kényszerfeltétel tehát azzal egyenértékű az, hogy a

$$\sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{\nabla}_i \varphi_k \delta\mathbf{r}_i = 0$$

egyenletek teljesülését megköveteljük. Ahogy a Lagrange-féle elsőfajú mozgásegyenleteknél tettük, a kényszert itt is egy Lagrange-multiplikátorral vesszük figyelembe. Így a főegyenlet így írandó:

$$\sum_{i=1}^{N} \left(\mathbf{F}_i + \sum_{k=1}^{s} \lambda_k \boldsymbol{\nabla}_i \varphi_k \right) \delta\mathbf{r}_i = 0.$$

A $\delta\mathbf{r}_i$ virtuális elmozdulások $3N$ komponense közül most $f = 3N - s$ független, ezért csak f számú együttható lesz zérus. A multiplikátorok viszont tetszőlegesek, így azokat úgy választjuk meg, hogy a fennmaradó s számú együttható is eltűnik. Formálisan tehát a virtuális elmozdulások úgy tekinthetők, mintha függetlenek lennének és az együtthatójuk zérus. Így:

$$\mathbf{F}_i + \sum_{k=1}^{s} \lambda_k \boldsymbol{\nabla}_i \varphi_k = 0$$

Itt az összegzés alatt szereplő erő dimenziójú mennyiséget kényszererőnek tekintve az egyensúlyi feltétel így írható:

$$\mathbf{F}_i + \mathbf{F}'_i = 0$$

Eszerint a pontrendszer mechanikai egyensúlyi állapotában az egyes anyagi pontokra ható szabad és kényszererők eredőjének kell zérusnak lennie ha a rendszer mozgása kényszerekkel korlátozott. Azt is lehet látni, hogy a kényszererő minden pontban merőleges a felületre, ugyanis a kényszererő "vektor részét" a kényszerfelület gradiense adja, ami éppen a felület normálisvektora.

2.3. A kényszerfeltételek osztályozása

Mivel a kényszerek sokfélék lehetnek, ennek megfelelően a feltételi egyenletek is több alakban megfogalmazhatóak. Alapvetően két csoportot különböztetünk meg, melyeken belül két-két másik csoport van. Az első csoport az integrálható, vagy más néven holonom kényszerek. Holonom kényszernek nevezik azokat a kényszereket, ahol léteznek olyan $a_{ki}(x_i, t)$ függvények, hogy $a_{ki} = \frac{\partial \varphi_k}{\partial x_i}$. Ezen belül megkülönböztetünk szkleronom és reonom kényszereket. Szkleronom akkor, ha $a_{k0} = \frac{\partial \varphi_k}{\partial t} = 0$ és reonom, ha $a_{k0} = \frac{\partial \varphi_k}{\partial t} \neq 0$.
Anholonóm, vagy más néven nem integrálható kényszerek esetén nem létezik olyan $a_{ki}(x_i, t)$ függvény, hogy az felírható a kényszerfeltételek koordináták, vagy idő szerinti differenciálhányados alakjában. Itt is megkülönböztetünk reonom és szkleronom esetet, ezek ugyan azok mint a holonom esetben voltak.

2.4. A d'Alembert-elv

A mechanikai egyensúly általános feltételét kifejező virtuális munka elvéhez hasonló elvet talált d'Alembert a mozgástörvény egyetlen egyenlet alakjában történő megfogalmazására. Az elvet a

$$\sum_{i=1}^{N}(\mathbf{F}_i - \dot{\mathbf{p}}_i)\delta\mathbf{r}_i = 0$$

alakban írta fel. Ezt **d'Alembert elvnek nevezik**. Eszerint a rendszer az erők hatására úgy mozog, hogy a $\delta\mathbf{r}_i$ virtuális elmozdulásokkal képzett fenti egyenlet mindig teljesül. Ez érvényes szabad és kényszermozgásokra is. A kettő között annyi a különbség, hogy kényszermozgás esetén $\delta\mathbf{r}_i$ nem tetszőleges. Megmutatható, hogy ez ekvivalens a dinamika alaptörvényével.
Szabad mozgás esetén a kifejezés csak akkor zérus, ha a zárójelen belüli kifejezés 0: $\dot{\mathbf{p}}_i = \mathbf{F}_i$. Ezek éppen a pontrendszer Newton-féle mozgásegyenletei.
Holonom-szkleronom kényszer esetén figyelembe vehetjük a kényszert Lagrange-multiplikátorokkal, majd a virtuális munka elvénél alkalmazott meggondolások alapján az eredmény:

$$m_i\ddot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{F}_i + \sum_{k=1}^{s}\lambda_k\boldsymbol{\nabla}_i\varphi_k$$

ami éppen a kényszermozgásra vonatkozó Lagrange-féle elsőfajú mozgásegyenlet.
Láthatjuk tehát, hogy a d'Alembert-elv is ekvivalens a Newton-féle mozgásegyenletekkel, de ezen túlmenően az az előnye, hogy egyetlen egyenlet formájában fogalmazza meg a mechanika mozgástörvényeit, ami egyaránt érvényes szabad és kényszermozgásokra is.

2.5. Legkisebb hatás elve

Ahhoz, hogy ezt a fejezetet érdemben lehessen tárgyalni, meg kell ismerkedni egy az eddig használttól kissé eltérő matematikával. Ezt variációszámításnak nevezik.

2.5.1. Variációszámítás alapjai

A variációszámítás a matematikai analízis egy területe, ami az úgynevezett funkcionálok szélsőértékeivel foglalkozik. A funkcionál egy valamilyen függvényhez skalárt rendelő leképezés. Ilyenek például a határozott integrálok. Például az

$$F[y(x)] = \int_a^b f(y(x), y'(x), x)dx \tag{4}$$

integrál valójában egy funkcionál, hiszen az f függvényhez rendel hozzá valamilyen számot.
Kérdezzük meg, hogy milyen $y(x)$ mellett van az F funkcionálnak szélsőértéke, amennyiben a végpontok értékét rögzítjük. Itt nem vizsgáljuk, hogy a szélsőérték minimum vagy maximum-e. Képezzük a függvény deriváltjának analógiájára a következő mennyiséget:

$$f(x_0 + \delta x) = f(x_0) + \delta f(x_0) \approx f(x_0) + f'(x_0)\delta x.$$

Ha a függvénynek x_0 lokális extrémuma, akkor a a δx eltérésben lineáris tag eltűnk, $f'(x_0) = 0$. Ez csak az értelmezési tartomány belső pontjára érvényes.
A funkcionálokra vonatkozó eljárás esetén változtatjuk*(variáljuk)* az y argumentum függvényt és vizsgáljuk, hogy mikor lesz az F funkcionál megváltozása vezető rendben zérus. Ezt a funkcionál stacionárius helyének nevezzük. Módosítsuk tehát az argumentumfüggvényt: $y(x) \to y(x) + \delta y(x)$. A $\delta y(x)$-t függvén variációjának nevezzük, a végpontokban rögzítjük, y függvénytől függetlenül választjuk, és előírjuk róla, hogy legyen kicsi. A módosított funkcionál így a (4)-es definíciós egyenlet alapján a következő:

$$F[y(x) + \delta y(x)] = F[y(x)] + \delta F[y(x)] = F[y(x)] + \int_{x_0}^{x_1}\left[\frac{\partial f}{\partial y}\delta y + \frac{\partial f}{\partial y'}\delta y'\right]dx + ...$$

ahol csak a variációban lineáris tagokat tartottuk meg. A $\delta F[y(x)]$ megváltozásra parciális integrálással nyerjük

$$\delta F[y(x)] = \int_{x_0}^{x_1}\left[\frac{\partial f}{\partial y} - \left(\frac{\partial f}{\partial y'}\right)'\right]\delta y dx + \left(\frac{\partial f}{\partial y'}\delta y\right)_{x_0}^{x_1}$$

Kihasználva, hogy a határokon a variáció eltűnik, ezért csak az integrálos tag marad. meg. Ennek az elnevezése variációs derivált:

$$\delta F = \int_{x_0}^{x_1}\frac{\delta F}{\delta y}\delta y dx$$

tehát

$$\frac{\delta F}{\delta y} = \frac{\partial f}{\partial y} - \left(\frac{\partial f}{\partial y'}\right)'$$

A stacionaritás feltétele az, hogy a fenti kifejezés egyenlő nullával. Ez az úgynevezett Euler-Lagrange-egyenlet.

2.5.2. Általánosított mennyiségek

A későbbi egyszerűbb tárgyalás érdekében vezessünk be úgynevezett általánosított koordinátákat és egyéb általánosított mennyiségeket. Először kezdjük az általános koordinátákkal. Válasszuk q_i $i \in [1 : F]$ *(F a szabadsági fokok száma)* mennyiségek egy halmazát, ami leírja a rendszer pillanatnyi konfigurációját *(ezt nevezik konfigurációs térnek)*. A halmaz minden q_i eleme függetlenül változhat a másiktól és teljesítsék a mellékfeltételeket *(ez a lényeg!!!)*. Ezek lehetnek bármilyen koordináták, akár Descartes, akár gömbi, vagy csak egy-egy szög, vagy akár ezek keveréke is, a lényeg, hogy egymástól függetlenek legyen és teljesítsék a mellékfeltételeket. Az általános koordináták deriváltjai az általános sebességek.
A rendszer általános impulzusának a $p_i = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i}$ mennyiséget nevezik. Az általánosított erő meghatározásához számoljuk ki az éppen ható erők virtuális munkáját.

$$\delta W = \sum_{i=1}^{3N} F_i \delta x_i = \sum_{i=1}^{3N} F_i \sum_{k=1}^{f} \frac{\partial x_i}{\partial q_k} \delta q_k = \sum_{k=1}^{f} Q_k \delta q_k$$

ahol bevezettük a $Q_k = \sum\limits_{i=1}^{3N} F_i \frac{\partial x_i}{\partial q_k}$ általánosított erőnek nevezett mennyiséget.

2.5.3. d'Alembert-elv → általánosított Hamilton elv, általánosított mozgásegyenlet

Jelen szakaszban a mechanikai mozgástörvények egy olyan általános megfogalmazása a cél, amely egyenértékű a Newton-félével, de túlmutat a mechanikán.
A legkisebb hatás elve: A rendszer mechanikai állapota két rögzített időpont között úgy változik az időben, hogy az

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t) \cdot dt$$

úgynevezett hatásintegrál szélsőérték. Tehát a kényszerek által megengedett lehetséges *(elgondolt)* állapotváltozásokhoz képest a valóságban bekövetkező mozgásállapot változás a fenti integrált szélsőértékké teszik. Ezért cél a mozgásegyenletek általános koordinátákkal való megadása. Mielőtt számolni kezdenénk, rögzítsünk le néhány dolgot: Csak olyan virtuális elmozdulásokat vizsgálunk, amik idő szerint deriválhatóak. Sem a végpontokat, sem időt nem variáljuk, valamint azonos időkhöz feleltetünk meg variált pontokat. A variációk eleget tesznek a kényszereknek, valamint a variálás és az idő szerinti deriválás felcserélhető. Ez utóbbi egyszerűen belátható:

$$\frac{d}{dt}\delta x_i = \frac{dx_i'}{dt} - \frac{dx_i}{dt} = \delta \frac{dx_i}{dt}$$

Tekintsük a d'Alembert elvet és szorozzunk be a virtális elmozdulással és végezzük el a következő átalakítást:

$$\ddot{x}_i \delta x_i = \frac{d}{dt}(\dot{x}_i \delta x_i) - \dot{x}_i \delta \dot{x}_i = \frac{d}{dt}(\dot{x}_i \delta x_i) - \frac{1}{2}\delta \dot{x}_i^2$$

Ezzel a d'Alembert elv a következő alakú:

$$\sum_{i=1}^{N} \left(F_i \delta x_i - m_i \left(\frac{d}{dt}(\dot{x}_i \delta x_i) - \frac{1}{2}\delta \dot{x}_i^2 \right) \right) = 0$$

Ezt átrendezve:

$$\sum_{i=1}^{N} \left(F_i \delta x_i + \frac{1}{2} m_i \delta \dot{x}_i^2 \right) = m_i \frac{d}{dt}(\dot{x}_i \delta x_i)$$

Az első tagot nevezzük el $\delta A'$-nek. Ez olyan mintha a szabad erők variációja lenne, de ez valójában nem igazi variáció. A második tagról pedig vegyük észre, hogy az nem más mint a kinetikus energia variációja, δT. Integráljuk az egészet $[t_1 : t_2]$ intervallumon és használjuk ki, hogy emiatt a jobb oldal eltűnik, ugyanis ott az integrálás után a variációt a határokon kellene tekinteni, ahol az 0. Így az végleges alak:

$$\int_{t_1}^{t_2} (\delta A' + \delta T)\, dt = 0$$

Ezt általánosított Hamilton elvnek nevezik.
Helyettesítsük be most az általánosított erővel kifejezett virtuális munkát a $\delta A'$ helyére, hiszen az a szabad erők virtuális munkája, valamint a variációs deriváltra vonatkozó összefüggéssel számítsuk ki a kinetikus energia variációját, majd integráljuk a kifejezést $[t_1 : t_2]$ intervallumon. Az eredmény a következő:

$$\int_{t_1}^{t_2} \sum_{k=1}^{f} \left(\frac{\partial T}{\partial q_k} - \frac{d}{dt}\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k} + Q_k \right) \delta q_k \cdot dt = 0$$

Ennek a kifejezésnek minden δq_k-ra igaznak kell lennie, ami csak úgy lehetséges, ha az együtthatója 0, azaz

$$\frac{\partial T}{\partial q_k} - \frac{d}{dt}\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k} + Q_k = 0$$

Ezt általánosított mozgásegyenletnek nevezik.

2.5.4. Hamilton-elv konzervatív rendszerekre

Tekintsünk egy konzervatív erőteret. Ekkor $Q_i = -\frac{\partial V(q_i)}{\partial q_i}$. Írjuk fel az általánosított mozgásegyenletet:

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} = Q_i + \frac{\partial T}{\partial q_i} = \frac{\partial T}{\partial q_i} - \frac{\partial V(q_i)}{\partial q_i}$$

Vezessük be az $L = T - V$ mennyiséget és írjuk fel úgy a mozgásegyenletet:

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L + V}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial L}{\partial q_i}$$

Használjuk ki azt is, hogy a bal oldalon a potenciál deriváltja eltűnik, ugyanis az nem függ az általánosított sebességtől. Így:

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial L}{\partial q_i} \tag{5}$$

Ez a probléma Euler-Lagrange-egyenlete, ami egy Lagrange-féle másodfajú mozgásegyenlet A teljesség kedvéért írjuk fel a legkisebb hatás elvét, de immár az $L(q_1, q_2, ..., q_F, \dot{q_1}, \dot{q_2}, ..., \dot{q_F})$ Lagrange-függvénnyel.

$$\int_{t_1}^{t_2} (\delta T - \delta V)\, dt = \delta \int_{t_1}^{t_2} (T - V)\, dt = \delta \int_{t_1}^{t_2} L \cdot dt = 0$$

A Lagrange-függvény fontos tulajdonságai:

- Ha két részrendszerből álló rendszer részrendszereinek Lagrange-függvénye L_A és L_B, akkor a teljes rendszer Lagrange-függvénye $L = L_A + L_B$
- A Lagrange-függvény konstanssal megszorozható
- Ha a Lagrange-függvény nem függ közvetlenül az időtől, akkor lesz egy megmaradó mennyiség

Ez utóbbi könnyen belátható:

$$\frac{dL}{dt} = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\partial L}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\ddot{q}_i \right) = \sum_{i=1}^{N} \left(\dot{q}_i \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\ddot{q}_i \right) = \frac{d}{dt}\sum_{i=1}^{N} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\dot{q}_i \;\Rightarrow \frac{d}{dt}\left(\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\dot{q}_i - L \right) = 0$$

itt a

$$B = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\dot{q}_i - L$$

függvényt a rendszer Beltrami-függvényének nevezik.

2.5.5. Hamilton-elv nem konzervatív rendszerekre

Nem konzervatív rendszerek esetén az energia nem állandó. Súrlódó rendszerek esetén nem is tudunk olyan potenciált találni amellyel kifejezhető lenne az általánosított erő. A súrlódási erők általában $Q_i^{fr} = -\alpha_i \dot{x}_i$ alakúak.
Vezessük be a $-\frac{\partial R}{\partial \dot{q}_i} = Q_i^{fr}$ úgynevezett Rayleigh-féle disszipációs függvényt. Ezt a tagot tegyük az Euler-Lagrange-egyenlet jobb oldalára:

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = \frac{\partial R}{\partial \dot{q}_i}$$

Állítás: Ezt megtehettük és működik

2.6. Kanonikus formalizmus

2.6.1. Legendre-transzformáció

Egy változóban: Konvex vagy konkáv f függvény esetén f'' állandó előjelű, ezért $y(x) = f'(x)$ invertálható, azaz a meredekség egyértelműen meghatározza az x-et. Jelölje az inverzet $x(y)$, amellyel vezessük be a következő függvényt:

$$g(y) = [xf'(x) - f(x)]_{x(y)} = x(y)y - f(x(y))$$

Ezt az f függvény Legendre-transzformáltjának nevezzük. Ez tulajdonképpen az érintő negatív tengelymetszete. Deriválva a g függvényt azt kapjuk, hogy

$$g'(y) = x'(y)y + x(y) - f'(x)x'(y) = x(y)$$

Tehát g és f' egymás inverzei. A Legendre-transzformált argumentumába az $y(x)$ függvényt írva adódik az inverz Legendre-transzformáció:

$$f(x) = xf'(x) - g(y(x)) = [g'(y)y - g(y)]_{y(x)}$$

Az f és g függvényt Legendre-transzformált pároknak is nevezik.

Több változóban: A fentieket általánosíthatjuk többváltozós $f(\mathbf{x})$ skalár értékű függvényre. Tegyük fel, hogy a gradiens invertálható

$$\mathbf{y} = \boldsymbol{\nabla} f(\mathbf{x}) \sim \mathbf{x} = \mathbf{x}(\mathbf{y})$$

ez konvex függvényekre teljesül. Definiáljuk a LT-t a következő relációval:

$$g(\mathbf{y}) = \mathbf{x}(\mathbf{y}) \cdot \mathbf{y} - f(\mathbf{x}(\mathbf{y}))$$

Ennek a gradiense:

$$\boldsymbol{\nabla} g(\mathbf{y}) = \mathbf{x}(\mathbf{y}) + \sum_i y_i \boldsymbol{\nabla} x_i - \sum_i \partial_i f \boldsymbol{\nabla} x_i = \mathbf{x}(\mathbf{y})$$

Azaz a $\boldsymbol{\nabla} f(\mathbf{x})$ és a $\boldsymbol{\nabla} g(\mathbf{y})$ egymás inverze. Itt a gradiens a saját változóban értendő. A LT inverzét az előzőhöz hasonlóan kapjuk:

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}\mathbf{y}(\mathbf{x}) - g(\mathbf{y}(\mathbf{x}))$$

A LT tehát involotorikus.
Ha a LT olyan függvényre hat, amiben más, a LT által nem érintett α paraméter is fellép, akkor a derivált inverze $\mathbf{x}(\mathbf{y}, \alpha)$ és a transzformált is függeni fog. Határozzuk meg a paraméter szerinti deriváltat:

$$\partial_\alpha g(\mathbf{y}, \alpha) = \mathbf{y} \cdot \partial_\alpha \mathbf{x} - \partial_\alpha f - \boldsymbol{\nabla} f \cdot \partial_\alpha \mathbf{x} = -\partial_\alpha f(\mathbf{x}(\mathbf{y}), \alpha)$$

Tehát a LT párok külső paraméter szerinti deriváltjai egymás ellentettjei.

2.6.2. Hamilton-függvény

A Lagrange-függvényes tárgyalás esetén egy f szabadsági fokú rendszer esetén f darab másodrendű differenciálegyenletet kaptunk a rendszer leírásaként. Ekkor $L(q_i, \dot{q}_i, t)$ volt adott. Azonban matematikai értelemben q_i és $\dot{q}_i$ nem függetlenek, mert egyik a másiknak a deriváltja. Vezessük be a

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$$

q_i-hez kanonikusan konjugált impulzust, így a rendszer állapotát 2f számú, de immár független változóval adjuk meg, ami 2f darab elsőrendű differenciálegyenletre vezet. Ebben a tárgyalásban a rendszert nem Lagrange, hanem Hamilton függvénnyel adjuk meg. Ez nem más mint a Lagrange-függvény $\dot{q}_i$ szerinti Legendre-transzformáltja.

$$dL(q_i, \dot{q}_i, t) = \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i + \sum_i \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial L}{\partial t} dt = \sum_i p_i d\dot{q}_i + \sum_i \dot{p}_i dq_i + \frac{\partial L}{\partial t} dt$$

Itt a kifejezés első tagjában felhasználtuk a kanonikusan konjugált impulzus definícióját, a második tagban pedig az Euler-Lagrange-egyenletet. Írjuk át továbbá az első tagot a $\sum_i p_i d\dot{q}_i = d\left(\sum_i p_i \dot{q}_i\right) - \sum_i \dot{q}_i dp_i$ alakra. Ekkor:

$$dL = \sum_i \dot{p}_i dq_i + d\left(\sum_i p_i \dot{q}_i\right) - \sum_i \dot{q}_i dp_q + \frac{\partial L}{\partial t} dt$$

Vonjuk ki a második tagot a bal oldalból és szorozzuk meg -1-el.

$$d\left(\sum_i p_i\dot{q}_i - L\right) = -\sum_i \dot{p}_i dq_i + \sum_i \dot{q}_i dp_i - \frac{\partial L}{\partial t}dt$$

A bal oldalon tényleg látszik, hogy az a Lagrange-függvény Legendre-transzformáltja $\dot{q}_i$ szerint. Ez a Hamilton-függvény, $H(p_i, q_i, t)$. Képezzük ennek magában a teljes differenciálját:

$$dH(p_i, q_i, t) = \sum_i \frac{\partial H}{\partial p_i}dp_i + \sum_i \frac{\partial H}{\partial q_i}dq_i + \frac{\partial H}{\partial t}dt$$

Ez egyenlő az egyel fentebb levő kifejezéssel, így leolvasható, hogy:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \tag{6}$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \tag{7}$$

$$\frac{\partial L}{\partial t} = -\frac{\partial H}{\partial t} \tag{8}$$

Ezeket kanonikus egyenleteknek nevezik. Vegyük észre, hogy a Hamilton-függvény konzervatív rendszer esetén felírható másképpen is:

$$H = \sum_i p_i\dot{q}_i - L = \sum_i m_i v_i^2 - T + V = 2T - T + V = T + V = E$$

Tehát, ha $\frac{dH}{dT} = 0$, akkor az energia megmarad. Ha valamelyik koordináta nem fordul elő a Hamilton-függvényben, akkor azt ciklikus koordinátának nevezik és a hozzá konjugált impulzus megmarad. Abban az esetben, ha az összes koordináta ciklikus, akkor a rendszert teljesen integrálhatónak nevezik.
Az idő szerinti teljes differenciálás tömörebb jelöléséhez vezessük be az úgynevezett Poisson-zárójelet, valamint egy $A(p, q, t)$ mennyiséget:

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial A}{\partial p_i}\dot{p}_i\right) = \frac{\partial A}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\right) = \frac{\partial A}{\partial t} + \{A, H\}$$

A második tagot A és H Poisson-zárójelének nevezik. Ez a következő tulajdonságokkal rendelkezik:
$\{A, B\} = -\{B, A\}$, $\{A, A\} = 0$, $\{A, B + C\} = \{A, B\} + \{A, C\}$, $\{A, BC\} = \{A, B\}C + \{A, C\}B$ valamint, ha $\{q_i, q_j\} = 0$ és $\{p_i, p_j\} = 0$, akkor $\{q_i, p_j\} = \delta_{ij}$, valamint teljesíti a Jacobi azonosságot is, azaz:

$$\{A, \{B, C\}\} + \{B, \{C, A\}\} + \{C, \{A, B\}\} = 0$$

Ezzel a jelöléssel tömörebb alakba írhatjuk a kanonikus egyenleteket:

$$\dot{q}_i = \{q_i, H\} \tag{9}$$

$$\dot{p}_i = -\{p_i, H\} \tag{10}$$

Ebből az is látszik, hogy egy $A(p, q)$ mennyiség mozgásállandó, ha $\{A, H\} = 0$. Generálhatunk mozgásállandókat is, hiszen, ha f és g mozgásállandók, akkor ezek $h = \{f, g\}$ Poisson-záróljele is az lesz.

Bizonyítás:

$$\frac{dh}{dt} = \frac{\partial h}{\partial t} + \{h, H\} = \frac{\partial\{f, g\}}{\partial t} + \{h, H\} = \left\{\frac{\partial f}{\partial t}, g\right\} + \left\{f, \frac{\partial g}{\partial t}\right\} + \{h, H\}$$

A fenti kifejezés utolsó tagjára alkalmazzuk a Jacobi-azonosságot:

$$\{H, h\} = \{H, \{f, g\}\} = -\{g, \{H, f\}\} + \{f, \{H, g\}\}$$

Mivel $\dot{g} = 0 = \dot{f}$, ezért:

$$\{H, h\} = -\left\{g, \frac{\partial f}{\partial t}\right\} + \left\{f, \frac{\partial g}{\partial t}\right\} = \frac{\partial h}{\partial t} \Rightarrow \frac{dh}{dt} = 0$$

2.7. Kanonikus transzformációk

Ha egy koordináta ciklikus, akkor a hozzá tartozó impulzus állandó és így könnyű megoldani az erre a koordinátára vonatkozó mozgásegyenletet. Valahogy el kellene érni, hogy minden koordináta ciklikus legyen. Tegyük fel, hogy a Hamilton-függvény nem függ explicit az időtől. Ebben az esetben a Hamilton-függvény csak az állandó p_k-któl függ. Ezért tehát $\dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial \alpha_k} = \omega_k \Rightarrow q_k = \omega_k t + \beta_k$, ahol β_k integrálási állandó a kezdeti feltételekből határozható meg. Ugyanakkor a feladathoz jól illeszkedő koordináták nem mindig ciklikusak. Például a bolygómozgást polárkoordinátákban érdemes tárgyalni, ahol a szög ciklikus koordináta lesz, de a sugárfüggés nem. Vizsgáljuk azokat a koordináta-transzformációkat amik változatlanul hagyják a kanonikus egyenleteket. A régi koordinátákat illetve impulzusokat kis, az újakat nagy betűvel jelöljük.

$$\begin{aligned} Q_k &= Q_k(q_1, q_2, ..., q_f, p_1, p_2, ..., p_f, t) \\ P_k &= P_k(q_1, q_2, ..., q_f, p_1, p_2, ..., p_f, t) \end{aligned} \tag{11}$$

valamint a kanonikus egyenletek ugyan úgy érvényesek az új koordinátákban és impulzusokban is.

$$\begin{aligned} \dot{Q}_k &= \frac{\partial H'}{\partial P_k} \\ \dot{P}_k &= -\frac{\partial H'}{\partial Q_k} \end{aligned} \tag{12}$$

itt $H'(Q_k, P_k, t)$ valamilyen módosított Hamilton-függvény. Mivel a kanonikus egyenletek variációs elvből származtathatók, ez azt jelenti, hogy a

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L dt = \delta \int_{t_1}^{t_2} \left(\sum_{k=1}^{f} P_k \dot{Q}_k - H'(Q_k, P_k, t) \right) dt = 0$$

teljesül az új koordinátákra is. Természetesen teljesül ugyan ez a régi koordinátákra és impulzusokra is:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \left(\sum_{k=1}^{f} p_k \dot{q}_k - H(q_k, p_k, t) \right) dt = 0$$

Ebből viszont még nem következik, hogy egyenlőek, mivel egy tetszőleges függvény teljes időderiváltban eltérhetnek, hiszen a határokon nem variálunk, így ez a tag kiesik.
Ennél fogva, egy fent említett transzformáció akkor hagyja szabadon a kanonikus egyenleteket, ha

$$\sum_{k=1}^{f} p_k \dot{q}_k - H(q_k, p_k, t) = \sum_{k=1}^{f} P_k \dot{Q}_k - H'(Q_k, P_k, t) + \frac{dW}{dt}$$

A W függvénynek négy típusa lehetséges attól függően, hogy milyen kombinációban tartalmazza a régi és az új koordinátákat: $W_1(q_k, Q_k, t)$, $W_2(q_k, P_k, t)$, $W_3(p_k, Q_k, t)$, $W_4(p_k, P_k, t)$. Azt, hogy melyiket érdemes használni, azt a feladat milyensége szabja meg.
A W_1 esetén

$$\sum_{k=1}^{f} p_k \dot{q}_k - H = \sum_{k=1}^{f} P_k \dot{Q}_k - H' + \frac{d}{dt} W_1(q_k, Q_k, t)$$

összefüggésnek kell teljesülnie, ahol

$$\frac{dW_1}{dt} = \frac{\partial W_1}{\partial t} + \sum_{k=1}^{f} \left(\frac{\partial W_1}{\partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial W_1}{\partial Q_k} \dot{Q}_k \right)$$

Mivel a régi és az új koordináták függetlenek, a fenti egyenlőség csak akkor állhat fenn, ha a q_k és a Q_k együtthatói az egyenlet két oldalán megegyeznek, tehát

$$\begin{aligned} p_k &= \frac{\partial W_1}{\partial q_k} \\ P_k &= -\frac{\partial W_1}{\partial Q_k} \\ H' &= H + \frac{\partial W_1}{\partial t} \end{aligned}$$

Az első egyenlet f számú összefüggést teremt p_k, q_k, Q_k és t idő között. Ezekből valamennyi Q_k kifejezhető a régi koordinátákkal és impulzusokkal, valamint idővel. A második egyenletcsoportból kifejezhető P_k a régi

koordinátákkal, impulzusokkal és idővel. A harmadik egyenletcsoportból pedig az új Hamilton-függvény adódik P_k, Q_k függvényeként. Látható, hogy minden a W_1 függvényből származtatható, ezért ezt a transzformáció alkotófüggvényének nevezzük.
A $W_2(q_k, P_k, t)$ esetben a q_k,Q_k független változókról a q_k, P_k változókra való áttérés Legendre-transzformációval közvetlenül megtehető. Mivel $\frac{\partial W_1}{\partial Q_k} = -P_k$, ezért:

$$W_2(q_k, P_k, t) = W_1(q_k, Q_k, t) + \sum_{k=1}^{f} P_k Q_k$$

Ebből W_1-et behelyettesítve a W_1-re kapott kritériumba:

$$\sum_{k=1}^{f} p_k \dot{q}_k - H = \sum_{k=1}^{f} P_k \dot{Q}_k - H' + \frac{d}{dt}\left(W_2(q_k, P_k, t) - \sum_{k=1}^{f} Q_k P_k\right) = -\sum_{k=1}^{f} Q_k \dot{P}_k - H' + \frac{dW_2}{dt}$$

A keresett transzformációra az előző gondolatmenettel kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} p_k &= \frac{\partial W_2}{\partial q_k} \\ Q_k &= \frac{\partial W_2}{\partial P_k} \\ H' &= H + \frac{\partial W_2}{\partial t} \end{aligned}$$

A harmadik transzformációtípus esetében is Legendre-transzformálunk:

$$W_3(p_k, Q_k, t) = W_1(q_k, Q_k, t) - \sum_{k=1}^{f} q_k p_k$$

Ebből az előzőekhez hasonlóan:

$$-\sum_{k=1}^{f} q_k \dot{p}_k - H = \sum_{k=1}^{f} P_k \dot{Q}_k - H' + \frac{d}{dt} W_3(p_k, Q_k, t)$$

$$\begin{aligned} q_k &= -\frac{\partial W_3}{\partial p_k} \\ P_k &= -\frac{\partial W_3}{\partial Q_k} \\ H' &= H + \frac{\partial W_3}{\partial t} \end{aligned}$$

A negyedik transzformáció esetén az elsőből kettős Legendre-transzformációval adódnak a következők:

$$W_4(p_k, P_k, t) = W_1(q_k, Q_k, t) + \sum_{k=1}^{f} P_k Q_k - \sum_{k=1}^{f} p_k q_k$$

$$-\sum_{k=1}^{f} q_k \dot{p}_k - H = \sum_{k=1}^{f} Q_k \dot{P}_k - H' + \frac{d}{dt} W_4(p_k, P_k, t)$$

$$\begin{aligned} q_k &= -\frac{\partial W_4}{\partial p_k} \\ P_k &= \frac{\partial W_4}{\partial P_k} \\ H' &= H + \frac{\partial W_4}{\partial t} \end{aligned}$$

Látható, hogy a régi és az új koordináták és impulzusok transzformációs képleteiben sehol nem fordul elő a rendszer Hamilton-függvénye, ezért a transzformáció kanonikus jellege teljesen független a vizsgált problémától. Példaként nézzünk meg egy feladatot a harmonikus oszcillátorra, melynek Hamilton függvénye:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} q^2$$

Valamint a varázskalapunkból húzzuk elő a következő alkotófüggvényt:

$$W(q,Q,t) = W(q,Q) = \frac{m\omega q^2}{2}\cot Q$$

Ez láthatóan az első típusba esik, alkalmazzuk a transzformációs képleteket:

$$p = \frac{\partial W}{\partial q} = m\omega q \cot Q$$

$$P = \frac{\partial W}{\partial Q} = \frac{m\omega q^2}{2}\frac{1}{\sin^2 Q}$$

A másodikból fejezzük ki q-t, és helyettesítsük az elsőbe:

$$q = \sqrt{\frac{2}{m\omega}}\sqrt{P}\sin Q$$

$$p = \sqrt{2m\omega}\sqrt{P}\cos Q$$

Ezeket behelyettesítve az eredeti Hamilton-függvénybe, és kihasználva, hogy az alkotófüggvény nem függ expliciten az időtől, a következőt kapjuk:

$$H' = \frac{2m\omega}{2m}P\cos^2 Q + \frac{m\omega}{2}\frac{2}{m\omega}P\sin^2 Q = P\omega$$

Ebből láthatjuk, hogy ezekkel, a módosított koordinátákkal a Hamilton-függvény jóval egyszerűbb lesz, sikerült egy ciklikus koordinátát csinálni, mivel H' nem függ a Q-tól. Így tehát:

$$\dot{P} = -\frac{\partial H'}{\partial Q} = 0 \Rightarrow P = P_0 = const$$

$$\dot{Q} = \frac{\partial H'}{\partial P} = \omega \Rightarrow Q = \omega(t+t_0)$$

Ezeket visszahelyettesítve az eredeti koordinátákba a következőket kapjuk:

$$p = \sqrt{2m\omega}\sqrt{P_0}\cos\left(\omega(t+t_0)\right)$$

$$q = \sqrt{\frac{2}{m\omega}}\sqrt{P_0}\sin\left(\omega(t+t_0)\right)$$

Önellenőrzés: $p = m\dot{q}$, pont ahogy az lenni szokott. Látható tehát a módszer előnye, a transzformáció elvégzésével az új koordinátákban olyan lett a Hamilton-függvény, hogy a kanonikus egyenletek jóval könnyebben megoldhatóak voltak, mintha nem végeztük volna el a transzformációt. Innentől pedig már csak egy egyszerű visszahelyettesítés.
Felmerül bennünk az ötlet, hogy micsoda jó lenne a Hamilton-függvényt 0-ba transzformálni, mert ilyenkor könnyebb dolgunk nem is lehetne a kapott egyenletek megoldásával. Mivel később látni fogjuk, hogy az az alkotófüggvény ami ezt megcsinálja nekünk, az igen speciális, ezért jelöljük S-el. Tehát a következőre vagyunk kíváncsiak:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H(q_k, p_k, t) = H' = 0$$

Az S alkotófüggvényt célszerű a q_k régi koordináták és a P_k új(állandó) impulzusok és az idő függvényének tekinteni, ahogy azt a W_2 esetében tettük. Ekkor $p_k = \frac{\partial S}{\partial q_k}$, amit beírva az előző kifejezésbe, a

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(q_k, \frac{\partial S}{\partial q_k}, t\right) = 0 \tag{13}$$

parciális differenciálegyenlet adódik. Ezt Hamilton-Jacobi-egyenletnek nevezik. A mechanika alapfeladatának a megoldása ebben a tárgyalásmódban tehát egyetlen egy egyenlet megoldására van visszavezetve. Az eredeti p_k és q_k mennyiségek meghatározása az állandónak adódó újakból nem okoz semmi nehézséget, mert a transzformációs képletek alapján könnyen elvégezhető. A matematikai nehézséget az okozza, hogy ez egy parciális differenciálegyenlet, szemben a Hamilton-féle kanonikus egyenletekkel, amik közönségesek.
Az eljárás menete a következő: Megkeressük a HJ-egyenlet teljes megoldását. Mivel az egyenlet $f+1$ független változót*(koordináták+idő)* tartalmaz, a teljes megoldásban $f+1$ független állandó lép fel: α_1, α_2,...,α_{f+1}. Maga az S nem szerepel az egyenletben, hanem annak a koordináták és az idő szerinti deriváltjai fordulnak elő, ezért ha S megoldása a HJ-egyenletnek, akkor az $S+\alpha$ is az, ahol α tetszőleges állandó. Ebből következik,

hogy az $f+1$ állandó közül egy additívan szerepel a megoldásban. Számunkra ennek nincs jelentősége, mert a transzformációs képletek S deriváltjait tartalmazzák. Így a HJ-egyenlet megoldása

$$S = S(q_1, q_2, ..., q_f, \alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_f, t)$$

alakba írható, ahol az α_k-k közül egyik sem additív.
Tegyük fel, hogy ismerjük a megoldást. Mivel P_k-k állandóak, az α_k integrálási állandókat tekintjük az új impulzusoknak:$P_k = \alpha_k$. A régi impulzusok pedig a transzformációs képlet alapján:

$$p_k = \frac{\partial S(q_k, \alpha_k, t)}{\partial q_k}$$

Ebből az f darab egyenletből a $t = 0$ valamint a q_k és a p_k kezdetei értékeinek behelyettesítésével az α_k integrálási állandók meghatározhatók. A transzformációs képletek második csoportja az ugyancsak állandó új, Q_k koordinátákat adja meg:

$$Q_k = \beta_k = \frac{\partial S(q_k, \alpha_k, t)}{\partial \alpha_k}$$

Ha az egyenletek jobb oldalára $t = 0$-t, valamint a q_k-k kezdeti értékeit helyettesítjük, megkapjuk a β_k állandókat. Ez után az előző összefüggésből kifejezzük a $q_k = q_k(\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_f, \beta_1, \beta_2, ..., \beta_f, t)$ régi koordinátákat. Ezzel a mozgásfeladatot megoldottuk, mert meghatároztuk a régi koordinátákat az idő függvényeként.
Nézzük meg az S alkotófüggvény fizikai jelentését. Képezzük e célból S teljes idő szerinti deriváltját:

$$\frac{dS}{dt} = \sum_{k=1}^{f} \frac{\partial S}{\partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial S}{\partial t}$$

Tudjuk, hogy $\frac{\partial S}{\partial q_k} = p_k$, valamint $\frac{\partial S}{\partial t} = -H$. Ezekből:

$$\frac{dS}{dt} = \sum_{k=1}^{f} p_k \dot{q}_k - H = L \Rightarrow S = \int_{t_0}^{t} L dt$$

A Hamilton-Jacobi-egyenletben szereplő S alkotófüggvény tehát megegyezik a Hamilton-elv hatásintegráljával folytonosan változó felső határral. Ezért S-et hatásfüggvénynek is szokás nevezni. Láthatjuk tehát, hogy az alkotófüggvény tényleg speciális volt.

2.8. Szimmetriák és megmaradási tételek

A mechanikában az energiára, az impulzusra és az impulzusmomentumra vonatkozó megmaradási tételek léteznek. A belőlük nyert információk összhangban vannak a rendszerrel. De vajon mikor marad meg egy mennyiség?
Noether-tétel: Minden folytonos szimmetriához tartozik egy megmaradási tétel.

Rendszer eltolásinvarianciája→ impulzusmegmaradás: Legyen

$$\mathbf{r}_i' = \mathbf{r}_i + \mathbf{a} = \mathbf{r}_i + \delta \mathbf{r}_i$$

$$\dot{\mathbf{r}}_i' = \dot{\mathbf{r}}_i$$

Ekkor:

$$\delta L = \sum_i \frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}_i} \delta \mathbf{r}_i = 0 = \mathbf{a} \sum_i \frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}_i} \Rightarrow \frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}_i} = \dot{p}_i = 0 \Rightarrow \mathbf{p}_i = const$$

azaz az impulzus megmarad.

Rendszer elforgatásinvarianciája → impulzusmomentum megmaradás: Vezessünk be egy $\mathbf{e}$ tengely körüli $\delta\varphi$ szögű forgatást. Mivel a tér izotrop, ezért a koordináta-rendszer elforgatás nem változtatja meg a rendszer mechanikai állapotát.

$$\mathbf{r}_i' = \mathbf{r}_i + \delta \mathbf{r}_i$$

$$\delta \mathbf{r}_i = \delta\varphi \mathbf{e} \times \mathbf{r}_i$$

valamint

$$\mathbf{p}_i' = \mathbf{p}_i + \delta \mathbf{p}_i$$

$$\delta \mathbf{p}_i = \delta\varphi \mathbf{e} \times \mathbf{p}_i$$

Alkalmazzuk a variációs elvet a Hamilton-függvényre:

$$\delta H = \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i} \delta \mathbf{r}_i + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i} \delta \mathbf{p}_i \right) = 0 = \delta\varphi \left(\sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i} \mathbf{e} \times \mathbf{r}_i + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i} \mathbf{e} \times \mathbf{p}_i \right) \right)$$

Azaz

$$0 = \delta\varphi \mathbf{e} \sum_i \left(\mathbf{r}_i \times \frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i} + \mathbf{p}_i \times \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i} \right) = \delta\varphi \mathbf{e} \sum_i \left(-\mathbf{r_i} \times \dot{\mathbf{p}}_i + \mathbf{p_i} \times \dot{\mathbf{r}}_i \right) = 0$$

Ebben a második tag 0, hiszen a sebesség párhuzamos az impulzussal. Azt kapjuk tehát, hogy $\mathbf{r_i} \times \dot{\mathbf{p}}_i = 0 = \dot{\mathbf{N}}_i \Rightarrow \mathbf{N}_i = const$, azaz az impulzusmomentum megmarad.

Időeltolás invariancia → Energiamegmaradás Képezzük a Hamilton-függvény teljes idő szerinti deriváltját:

$$\frac{dH}{dt} = \{H, H\} + \frac{\partial H}{\partial t}$$

A Poisson-zárójel tulajdonságából következik, hogy az első tag 0. Mivel az idő homogén, ezért a tetszőlegesen megválasztott kezdeti időpont a zárt rendszer mozgásállapotát nem befolyásolja. A Hamilton-függvénynek invariánsnak kell lennie a $t' = t + t_0$ időeltolásra, tehát:

$$\delta H = \frac{\partial H}{\partial t} \delta t = \frac{\partial H}{\partial t} t_0 = 0$$

Mivel t_0 tetszőleges, ezért $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$, tehát a teljes időderivált is 0, tehát $H = const$ és tudjuk, hogy konzervatív rendszer esetén $H = T + V = const$. Ez az energiamegmaradás tétele.

3. Egzaktul megoldható fizikai problémák(Novák Martin)

3.1. Csillapított-, csatolt-, és kényszerrezgések, lineáris lánc

3.1.1. Sebességgel arányos csillapítás

Vegyük a következő differenciálegyenletet:

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -Dx - k\frac{dx}{dt}$$

Rendezzük át és vezessük be a $\frac{k}{m} = 2\beta$ és a $\frac{D}{m} = \omega_0^2$ jelöléseket, így

$$\frac{d^2x}{dt^2} + 2\beta\frac{dx}{dt} + \omega_0^2 x = 0$$

Keressük a megoldást $x(t) = A(t)sin(\omega t+\varphi)$ alakban. Ezt visszahelyettesítve az egyenletbe a következőt kapjuk:

$$sin(\omega t + \varphi)\left[\ddot{A} + 2\beta\dot{A} + \left(\omega_0^2 - \omega^2\right)A\right] + cos(\omega t + \varphi)\left[2\omega\left(\dot{A} + \beta A\right)\right] = 0$$

A bal oldal csak akkor nulla minden időpillanatban, ha a szögfüggvényeket szorzó együtthatók is nullák.

$$\ddot{A} + 2\beta\dot{A} + \left(\omega_0^2 - \omega^2\right)A = 0$$

$$2\omega\left(\dot{A} + \beta A\right) = 0$$

A második tag alapján könnyen adódik, hogy

$$A(t) = A_0 e^{-\beta t}$$

Ennek az első és második deriváltját képezve majd azt visszahelyettesítve a szinuszos tag együtthatójába a következő adódik:

$$A_0 e^{-\beta t}\left(\omega_0^2 - \omega^2 - \beta^2\right) = 0 \Rightarrow \omega = \sqrt{\omega_0^2 - \beta^2}$$

Ezeket visszaírva a megoldás alakjába az egyenlet általános megoldása a következő:

$$x(t) = A_0 e^{-\beta t} sin\left(\sqrt{\omega_0^2 - \beta^2}t + \varphi\right)$$

Ez egy exponenciálisan lecsengő oszcilláció. A lecsengés milyensége függ ω_0 és β viszonyától. Ha $\beta < \omega_0$, akkor a rendszer alulcsillapított, $\tau = \frac{1}{\beta}$ idő alatt a rezgés amplitúdója e-ad részére csökken. Ha $\beta > \omega_0$ akkor a rendszer túlcsillapított és a kezdőfeltételektől függően egyáltalán nem, vagy csak egyszer metszi az egyensúlyi helyzetet jellemző $y(x) = 0$ egyenest.
Az energiaviszonyok jellemzéséhez képezzük a sebességet:

$$v(t) = \frac{dx}{dt} = -\beta A_0 e^{-\beta t} sin\left(\omega t + \varphi\right) + \omega A_0 e^{-\beta t} cos\left(\omega t + \varphi\right)$$

Ezt behelyettesítve a kinetikus energia kifejezésébe és a négyzetre emelést elvégezve a következőt kapjuk:

$$E_k(t) = \frac{m}{2}A_0^2 e^{-2\beta t}\left[\beta^2 sin^2\left(\omega t + \varphi\right) + \omega^2 cos^2\left(\omega t + \varphi\right) - 2\beta\omega sin\left(\omega t + \varphi\right)cos\left(\omega t + \varphi\right)\right]$$

A potenciális energia:

$$E_p(t) = \frac{D}{2}x^2 = \frac{D}{2}A_0^2 e^{-2\beta t} sin^2\left(\omega t + \varphi\right)$$

A két energia időátlagához képezzük az energiakifejezésekből következő alakú integrálokat:

$$\langle E\rangle = \frac{1}{T}\int_t^{t+T} E(t)dt$$

Ezeket kiszámolva majd összeadva azt kapjuk, hogy

$$\langle E_k\rangle = \langle E_p\rangle = \frac{1}{4}DA_0^2 e^{-2\beta t} \Rightarrow \langle E\rangle = E_0 e^{-2\beta t}$$

3.1.2. Kényszerrezgések

Tegyünk az előző differenciálegyenletbe egy periodikus erőt:

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -Dx - k\frac{dx}{dt} + F_0 sin\left(\omega t\right)$$

Átrendezve

$$\frac{d^2x}{dt^2} + 2\beta\frac{dx}{dt} + \omega_0^2 x = \frac{F_0}{m} sin\left(\omega_g t\right) = a_0 sin\left(\omega_g t\right)$$

Az előző pontból láttuk, hogy homogén egyenlet általános megoldása

$$x(t) = A_0 e^{-\beta t} sin\left(\sqrt{\omega_0^2 - \beta^2} t + \varphi\right)$$

Keressük a partikuláris megoldást a következő alakban:

$$x(t) = Asin\left(\omega t - \delta\right) = Asin\left(\omega t\right) cos\left(\delta\right) - Acos\left(\omega t\right) sin\left(\delta\right)$$

Végezzük el a deriválásokat és helyettesítsünk vissza a gerjesztett egyenletbe. Az eredmény:

$$Asin\left(\omega t\right)\left[\left(\omega_0^2 - \omega^2\right) cos\left(\delta\right) + 2\beta\omega sin\left(\delta\right)\right] + Acos\left(\omega t\right)\left[-\left(\omega_0^2 - \omega^2\right) sin\left(\delta\right) + 2\beta\omega cos\left(\delta\right)\right] = a_0 sin\left(\omega t\right)$$

Ez megint csak akkor teljesül, ha a két oldalon a szögfüggvények együtthatói megegyeznek. Tehát

$$A\left[\left(\omega_0^2 - \omega^2\right) cos\left(\delta\right) + 2\beta\omega sin\left(\delta\right)\right] = a_0$$

$$A\left[-\left(\omega_0^2 - \omega^2\right) sin\left(\delta\right) + 2\beta\omega cos\left(\delta\right)\right] = 0$$

Négyzetre emelve a két tagot, majd összeadva őket kifejezhető az A együttható:

$$A\left(\omega\right) = \frac{a_0}{\sqrt{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\beta^2\omega^2}}$$

A egyenletet rendezve pedig a következő kapható:

$$tg\delta = \frac{2\beta\omega}{\omega_0^2 - \omega^2}$$

A teljes megoldás felírható a homogén általános és az inhomogén partikuláris megoldás összegeként:

$$x(t) = A_0 e^{-\beta t} sin\left(\sqrt{\omega_0^2 - \beta^2} t + \varphi\right) + Asin\left(\omega t + \delta\right)$$

Ez tehát egy rezgőmozgás, ami először a gerjesztő és a csillapított rezgés összegének megfelelően rezeg. Majd mikor a csillapított rezgés már lecsengett, akkor valamilyen fázistolással, azonos frekvenciával rezeg a gerjesztő rezgéssel.
Ha deriváljuk az amplitúdó kifejezést és megoldjuk a szélsőérték problémát, akkor megkaphatjuk, hogy milyen gerjesztő frekvenciánál rezeg maximális amplitúdóval a rendszer. Mivel az amplitúdó kifejezésének csak a nevezője függ a gerjesztés frekvenciájától, így elég csak annak a szélsőértékét meghatározni:

$$f(\omega) = (\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\beta^2\omega^2$$

$$\frac{df}{d\omega} = -4\omega(\omega_0^2 - \omega^2) + 8\beta^2\omega = 0 \Rightarrow \omega_r = \sqrt{\omega_0^2 - 2\beta^2}$$

Ez a kifejezés csak alulcsillapított esetben értelmes. Ezt beírva az amplitúdó kifejezésébe a következő adódik:

$$A_{max} = \frac{a_0}{2\beta\sqrt{\omega_0^2 - 2\beta^2}}$$

Az energiaviszonyokat meg disszipált teljesítményeket érdemes lehet megnézni.

3.1.3. Csatolt rezgések

Vegyünk egy a falakhoz D_1 és D_2 rugóállandójú rugóval, egymáshoz pedig k rugóállandójú rugóval kapcsolt testet. A mozgásegyenletek:

$$m_1\ddot{x_1} = -D_1x_1 + k(x_2 - x_1)$$
$$m_2\ddot{x_2} = -D_2x_2 + k(x_1 - x_2)$$

Ha a két egyenletet összeadjuk, illetve kivonjuk egymásból és bevezetjük az $u_1 = \frac{x_1+x_2}{2}$ és $u_2 = \frac{x_1-x_2}{2}$ változókat, akkor összeadás esetén az

$$m\ddot{u_1} = -Du_1$$

kivonás esetén pedig a

$$m\ddot{u_2} = -(D + 2k)u_2$$

egyenletek adódnak. Ezeket rendezve

$$\ddot{u_1} = -\frac{D}{m}u_1 = -\omega_1^2u_1$$
$$\ddot{u_2} = -\frac{D+2k}{m}u_2 = -\omega_2^2u_2$$

harmonikus oszcillátor mozgásegyenletek adódnak. Így a megoldások

$$u_1 = A_1sin\left(\omega_1t + \varphi_1\right)$$
$$u_2 = A_2sin\left(\omega_2t + \varphi_2\right)$$

Visszaírva x_1-re és x_2-re

$$x_1 = A_1sin\left(\omega_1t + \varphi_1\right) + A_2sin\left(\omega_2t + \varphi_2\right)$$
$$x_2 = A_1sin\left(\omega_1t + \varphi_1\right) - A_2sin\left(\omega_2t + \varphi_2\right)$$

Az $A_{1,2}$ $\varphi_{1,2}$ paraméterek a kezdőfeltételekből határozhatóak meg. Ennek a függvényében különböző módokon tud rezegni a rendszer. Vegyük például az $x_1(0) = A$, $x_2(0) = 0$, $v_1(0) = 0$, $v_2(0) = 0$ kezdőfeltételeket. Ekkor $A_1 = A_2 = \frac{A}{2}$, $\varphi_1 = \varphi_2 = \frac{\pi}{2}$ és

$$x_1(t) = \frac{A}{2}\left[cos\left(\omega_1t\right) + cos\left(\omega_2t\right)\right] = Acos\left(\frac{\omega_1+\omega_2}{2}t\right)cos\left(\frac{\omega_2-\omega_1}{2}t\right)$$
$$x_2(t) = \frac{A}{2}\left[cos\left(\omega_1t\right) - cos\left(\omega_2t\right)\right] = Asin\left(\frac{\omega_1+\omega_2}{2}t\right)sin\left(\frac{\omega_2-\omega_1}{2}t\right)$$

Gyenge csatolás$(\frac{k}{D} << 1)$ esetén $(1+x)^\alpha = 1 + \alpha x$-et alkalmazva

$$\Delta\omega = \omega_2 - \omega_1 = \sqrt{\frac{D}{m}}\left[\left(1 + \frac{2k}{d}\right)^{\frac{1}{2}} - 1\right] \approx \omega_1\frac{k}{D}$$

Ekkor éppen a lebegés jelenségét kapjuk:

$$x_1 \approx A_1(t)cos\left(\omega_0t\right)$$
$$x_2 \approx A_2(t)sin\left(\omega_0t\right)$$
$$A_1(t) = Acos\left(\frac{\Delta\omega}{2}t\right)$$
$$A_2(t) = Asin\left(\frac{\Delta\omega}{2}t\right)$$

Ekkor az energiákra jó közelítés:

$$E_1 = \frac{1}{2}DA_1^2 = E_0cos^2\left(\frac{\Delta\omega}{2}t\right)$$
$$E_2 = \frac{1}{2}DA_2^2 = E_0sin^2\left(\frac{\Delta\omega}{2}t\right)$$

Tehát az energia periodikusan cserélődik a két test között. Erős csatolás esetén a csatoló rugó energiája nem hanyagolható el. Vegyük az egyes testek mozgását leíró egyenletek nullára rendezett alakját és szorozzuk meg a megfelelő sebességekkel és adjuk össze őket.

$$[m_1\ddot{x_1}\dot{x_1} + D_1x_1\dot{x_1} - k(x_2 - x_1)\dot{x_1}] + [m_2\ddot{x_2}\dot{x_2} + D_2x_2\dot{x_2} + k(x_2 - x_1)\dot{x_1}] = 0$$

Ez átírható a következő alakba:

$$\frac{d}{dt}\left[\frac{1}{2}m_1\dot{x_1}^2+\frac{1}{2}D_1x_1^2+\frac{1}{2}m_2\dot{x_2}^2+\frac{1}{2}D_2x_2^2+\frac{1}{2}k(x_2-x_1)^2\right]=0$$

Ebben az első két tag az éppen az első test energiája, a harmadik és negyedik tag a második test energiája, az ötödik tag pedig a rendszer csatolási energiája. A normálmódusokat, kényszerített csatolt rezgéseket érdemes még megnézni, de a normálmódusok azok tök magától értetődőek, a kényszerített rezgések meg majdnem ugyan az mint ahogy simán volt.

3.1.4. Egyatomos lineáris lánc

Az előzőekben láttuk, hogy az ilyen csatolt rezgéseket mindig fel lehet bontani normálrezgésekre. Vegyünk egy N darab, ugyan olyan tömegű golyóból és ugyan akkora erősségű rugókkal összekapcsolt láncot, valamint kössük össze az első golyót az utolsóval.*(ez annak felel meg, mintha egy kör alakú drótra lennének felfűzve és azon mozognának súrlódás nélkül).* Az i-edik golyó mozgásegyenlete ekkor:

$$m_i\ddot{u}_i = D\left(u_{i+1}-u_i\right)+D\left(u_{i-1}-u_i\right)$$

Átrendezve és a szokásos $\omega_0^2=\frac{D}{m}$ jelölést bevezetve

$$\ddot{u}_i=\omega_0^2\left(u_{i+1}+u_{i-1}-2u_i\right)\Rightarrow \ddot{\mathbf{u}}=\underline{\underline{D}}\mathbf{u}$$

alakot kapjuk, ahol

$$\underline{\underline{D}}=\omega_0^2\begin{pmatrix}-2 & 1 & 0 & \cdots & 1\\ 1 & -2 & 1 & 0 & \cdots\\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0\cdots\\ \vdots & & & & \\ 1 & 0 & \cdots & & \end{pmatrix}$$

A sarkokban az 1-es a periodikus határfeltétel miatt jelenik meg. Keressük A megoldást

$$u_i(t)=A_ie^{j\omega t}$$

alakban, valamint legyen $A_i=A(q)e^{jiqa}$. Itt most a szokásostól eltérően j a képzetes egység, i pedig az index. Az a a golyók távolsága nyugalmi helyzetben, q pedig egy reciprok rácsvektor. Tehát

$$u_i(t)=A(q)e^{j(\omega t+iqa)}$$

Ezt behelyettesítve a megfelelő differenciálegyenletbe, a következőt kapjuk:

$$-\omega^2A(q)e^{jiqa}=\omega_0^2A(q)\left(e^{j(i+1)qa}+e^{j(i-1)qa}-2e^{jiqa}\right)$$

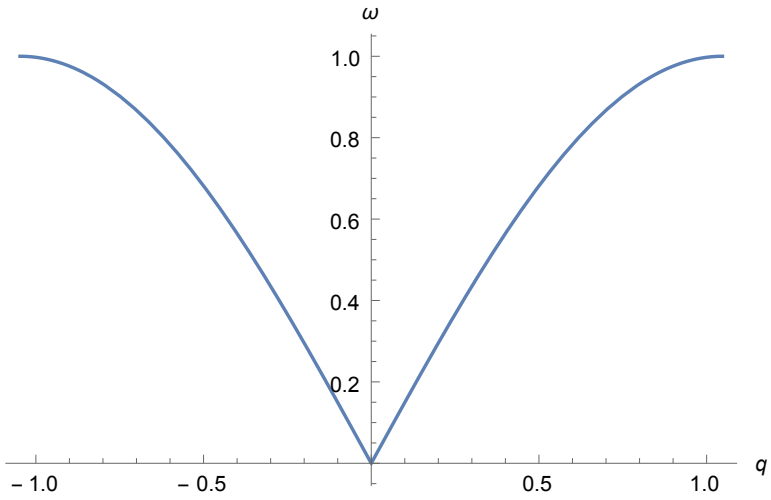
Elvégezve az egyszerűsítéseket, a következő marad:

$$-\omega^2=\omega_0^2\left(e^{jqa}+e^{-jqa}-2\right)$$

Ez átrendezhető a következő módon:

$$\omega^2=2\omega_0^2\left(1-cos(qa)\right)\Rightarrow\omega=2\omega_0\left|sin\left(\frac{qa}{2}\right)\right|$$

Ezzel tehát megkaptuk a diszperziós relációt. A reciprok rácsvektorok tulajdonsága miatt q csak $-\frac{\pi}{a}$ és $\frac{\pi}{a}$ között vehet fel értéket.



3.1 ábra: Egyatomos lineáris lánc diszperziós relációja $\omega_0 = 1$, $a = 3$ esetén

3.1.5. Kétatomos lineáris lánc

A probléma nagyon hasonló az egyatomoshoz, itt azonban minden második golyót kicserélünk egy más tömegűre. A határfeltétel ugyan az és a rugók itt is ugyanolyan erősek az atomok között. Itt két egyenletünk lesz. Az egyik típusú atom elmozdulását u-val, a másikét v-vel jelölve:

$$m_1\ddot{u}_i = D\left(v_i - u_i\right) + D\left(v_{i-1} - u_i\right) = D\left(v_i + v_{i-1} - 2u_i\right)$$

$$m_2\ddot{v}_i = D\left(u_{i+1} - v_i\right) + D\left(u_i - v_i\right) = D\left(u_{i+1} + u_i - 2v_i\right)$$

Alkalmazzuk itt is az előző részben alkalmazott ansatzot külön-külön a két egyenletre. Így az előzővel teljesen azonos számolás alapján a következő adódik:

$$-\omega^2 m_1 u(q) e^{j(iqa+\omega t)} = D\left(v(q) + v(q)e^{-jqa} - 2u(q)\right)$$

$$-\omega^2 m_2 v(q) e^{j(iqa+\omega t)} = D\left(u(q) + u(q)e^{jqa} - 2v(q)\right)$$

Elvégezve az egyszerűsítéseket, a maradék mátrix alakba rendezhető:

$$-\omega^2 \begin{pmatrix} u(q) \\ v(q) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{2D}{m_1} & \frac{D}{m_1}(1+e^{-jqa}) \\ \frac{D}{m_2}(1+e^{jqa}) & -\frac{2D}{m_2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u(q) \\ v(q) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{2D}{m_1} & \frac{2D}{m_1} e^{-\frac{jqa}{2}} cos\left(\frac{qa}{2}\right) \\ \frac{2D}{m_2} e^{\frac{jqa}{2}} cos\left(\frac{qa}{2}\right) & -\frac{2D}{m_2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u(q) \\ v(q) \end{pmatrix}$$

Ez tehát egy sajátértékprobléma. A sajátértékegyenletet a szokásos módon képezve a következőt kapjuk:

$$\left(\omega^2 - \frac{2D}{m_1}\right)\left(\omega^2 - \frac{2D}{m_2}\right) - \frac{4D^2}{m_1 m_2} cos^2\left(\frac{qa}{2}\right) = 0$$

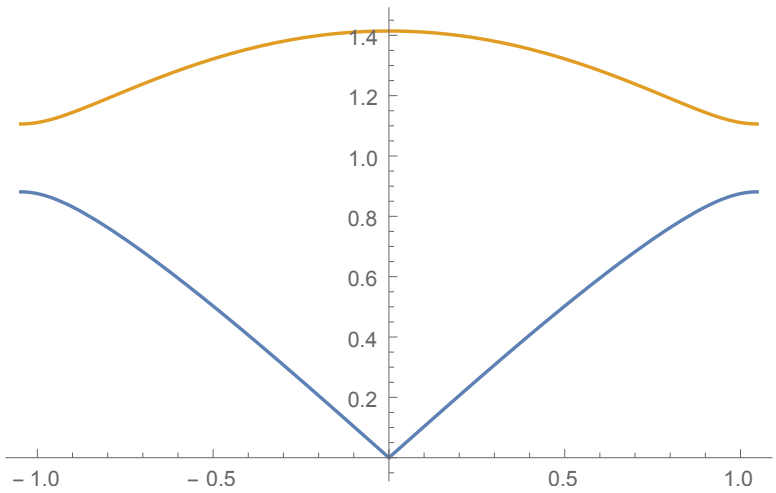
$$\omega^4 - \omega^2\left(\frac{2D}{m_1} + \frac{2D}{m_2}\right) + \frac{4D^2}{m_1 m_2}\left(1 - cos^2\left(\frac{qa}{2}\right)\right) = 0$$

$$\omega^4 - \omega^2\left(\frac{2D}{m_1} + \frac{2D}{m_2}\right) + \frac{4D^2}{m_1 m_2} sin^2\left(\frac{qa}{2}\right) = 0$$

$$\omega_{1,2}^2 = \frac{2D\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right) \pm \sqrt{4D^2\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right)^2 + 4\frac{4D^2}{m_1 m_2} sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)}}{2}$$

bevezetve az $\omega_0^2 = D\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right)$ és a $\gamma = \frac{4m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ jelöléseket, a fenti kifejezés a következő alakba írható:

$$\omega_{1,2}^2 = \omega_0^2\left(1 \pm \sqrt{1 - \gamma^2 sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)}\right)$$



3.2 ábra: Kétatomos lineáris lánc diszperziós relációja

3.2. Kepler-probléma

3.2.1. Nyugvó nap

Vizsgáljuk a bolygók Nap körüli mozgását. Legyen m adott bolygó tömege, M pedig a Napé. Mivel a Nap tömege sokkal nagyobb a bolygókénál, így azt első közelítésben nyugvónak képzeljük a koordináta-rendszerünk középpontjában. Mivel a bolygó centrális erőtérben mozog, így az impulzusmomentum állandó, tehát síkmozgást végez. Írjuk fel a mozgó bolygó energiáját síkbeli polárkoodrinátarendszerben:

$$E = \frac{m}{2}v^2 + V(r) = \frac{m}{2}\left(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2\right) - \frac{\gamma m M}{r}$$

Használjuk fel az impulzusmomentum-megmaradás tételt, azaz $mr^2\dot{\varphi} = N = const \Rightarrow \dot{\varphi} = \frac{N}{mr^2}$. Helyettesítsük ezt be az energia kifejezésébe:

$$E = \frac{m}{2}\left(\dot{r}^2 + \frac{N^2}{m^2r^2}\right) - \frac{\gamma m M}{r}$$

Ebből kifejezve $\dot{r}$-t meghatározható lesz az $r(\varphi)$ pálya.

$$\dot{r} = \sqrt{\frac{2E}{m} - \frac{N^2}{m^2r^2} + \frac{2\gamma M}{r}}$$

Vegyük a következő helyettesítést:

$$dt = \frac{dr}{\sqrt{\frac{2E}{m} - \frac{N^2}{m^2r^2} + \frac{2\gamma M}{r}}}$$

és integráljuk a szögsebességet:

$$\varphi = \int \frac{N}{mr^2}dt = \int \frac{\frac{N}{mr^2}}{\sqrt{\frac{2E}{m} - \frac{N^2}{m^2r^2} + \frac{2\gamma M}{r}}}dr + \varphi_0$$

Alkalmazzuk az $u = -\frac{N}{mr} + \frac{\gamma m M}{N} \Rightarrow \frac{du}{dr} = \frac{N}{mr^2}$ helyettesítést, így az integrál a következő módon írható:

$$\varphi - \varphi_0 = \int \frac{1}{\sqrt{\frac{2E}{m} + \frac{\gamma^2m^2M^2}{N^2} - u^2}}du = -arccos\left(\frac{u}{\sqrt{\frac{2E}{m} + \frac{\gamma^2m^2M^2}{N^2}}}\right)$$

rendezve

$$u = -\sqrt{\frac{2E}{m} + \frac{\gamma^2m^2M^2}{N^2}}cos(\varphi - \varphi_0) = -\frac{N}{mr} + \frac{\gamma M m}{N}$$

Ezt rendezve r-re a pálya egyenletére a következő adódik:

$$r(\varphi) = \frac{1}{\frac{\gamma M m^2}{N^2} + \frac{m}{N}\sqrt{\frac{2E}{m} + \frac{\gamma^2m^2M^2}{N^2}}cos(\varphi - \varphi_0)} = \frac{\frac{N^2}{\gamma m^2 M}}{1 + \frac{N}{\gamma M m}\sqrt{\frac{2E}{m} + \frac{\gamma^2m^2M^2}{N^2}}cos(\varphi - \varphi_0)}$$

Vezessük be a $p = \frac{N^2}{\gamma m^2 M}$ és $\varepsilon = \frac{N}{\gamma M m}\sqrt{\frac{2E}{m} + \frac{\gamma^2 m^2 M^2}{N^2}} = \sqrt{1 + \frac{2EN^2}{\gamma^2 M^2 m^2}}$ jelöléseket, így az egész a következő módon írható:

$$r(\varphi) = \frac{p}{1 + \varepsilon cos(\varphi - \varphi_0)}$$

Ez egy kúpszelet polárkoordinátás egyenlete. Ismert, hogy ha $\varepsilon < 1$ akkor a kúpszelet ellipszis, ha $\varepsilon = 1$ akkor parabola, ha $\varepsilon > 1$ akkor pedig hiperbola a fenti összefüggés által leírt kúpszelet. Ezek a feltételek kifejezhetőek a tömegpont energiájával is. Az energia állandó, azaz a pálya minden pontján ugyan az. Ez lehetővé teszi azt, hogy az energiát olyan pontban számítsuk ki, ahol a képletek egyszerűek. A félnagytengely irányát vegyük fel a polártengely irányába, így $\varphi_0 = 0$, valamint számoljuk ki az energiát Napközelben, mivel ekkor $\varphi = 0$. Így

$$r_0 = \frac{p}{1 + \varepsilon}$$

adódik. A sebesség $v^2 = r_0^2\dot{\varphi}^2 = \frac{N^2}{m^2 r^2} = \frac{N^2(1+\varepsilon)^2}{m^2 p^2} = \frac{\lambda^2(1+\varepsilon)^2}{p^2}$. Itt bevezettük a $\lambda = \frac{N}{m}$ jelölést. Ezt visszahelyettesítve az energiakifejezésbe:

$$E = \frac{m}{2}v^2 - \gamma\frac{mM}{r} = \frac{m}{2}\frac{\lambda^2(1+\varepsilon)^2}{p^2} - \gamma m M\frac{1+\varepsilon}{p} = \frac{m\lambda^2}{2p^2}(\varepsilon^2 - 1)$$

Ebbe behelyettesítve az ε-ra kapott feltételeket megkapjuk a bolygó energiájára vonatkozó feltételeket. Ha $E < 0$ akkor a pálya ellipszis, ha $E = 0$ akkor a pálya parabola, ha $E > 0$ akkor a pálya hiperbola. Bolygókra az $E < 0$ eset teljesül. Tehát **a bolygók ellipszispályán mozognak, melynek gyújtópontjában a Nap áll.** Ez Kepler első törvénye.
Számítsuk ki a periódusidőt. Ehhez előbb határozzuk meg a súrolt területet. Tudjuk, hogy $mr^2\dot{\varphi} = N = const \Rightarrow r^2\dot{\varphi} = \lambda = const$. Ha t időpontban a rádiuszvektor az r, φ pontban volt, akkor $t + \Delta t$ idő múlva az $r + \Delta r, \varphi + \Delta\varphi$ pontban lesz. A két rádiuszvektor és az Δr*(itt most nem az r koodináta megváltozásának a deltája)* elmozdulás által alkotott háromszög területe

$$\Delta f = \frac{1}{2}(r + \Delta r)\, r sin\Delta\varphi \approx \frac{1}{2}r^2\Delta\varphi$$

Átrendezve, mindkét oldalt leosztva Δt-vel és $\Delta t \to 0$ határesetet képezve a következőt kapjuk:

$$\frac{df}{dt} = \frac{r^2\dot{\varphi}}{2}$$

Visszatérve az eredeti problémához, ez alapján a bolygó mozgása során súrolt terület

$$\frac{df}{dt} = \frac{\lambda}{2} \Rightarrow f(T) = \int_0^T \frac{\lambda}{2}dt = \frac{\lambda T}{2}$$

Itt egy teljes periódusra integráltunk, ami az ellipszis teljes $f = ab\pi$ területét adja a bal oldalon. Így

$$T = \frac{2\pi ab}{\lambda}$$

Az ellipszisek fél nagy és kistengelyei a paraméterrel és az excentricitással kifejethetők:

$$\varepsilon = \frac{\sqrt{a^2 - b^2}}{a}$$

$$p = \frac{b^2}{a}$$

Négyzetre emelve a periódusidőt kifejező egyenlet mindkét oldalát:

$$T^2 = \frac{4\pi^2 a^2 b^2}{\lambda^2} = \frac{4\pi^2 a^3 p}{\lambda^2} = \frac{4\pi^2\frac{N^2}{\gamma m^2 M}}{\frac{N^2}{m^2}} = \frac{4\pi^2 a^3}{\gamma M}$$

Leosztva a^3-el

$$\frac{T^2}{a^3} = \frac{4\pi^2}{\gamma M} \Rightarrow \frac{T_1^2}{a_1^3} = \frac{T_2^2}{a_2^3}$$

Azaz **a bolygók keringési idejeinek négyzetei úgy aránylanak egymáshoz, mint az ellipszispályák fél nagytengelyeinek köbei**. Ez Kepler második törvénye.
Az impulzusmomentum megmaradásból pedig Kepler harmadik törvénye következik:

$$r^2\dot{\varphi} = const \Rightarrow \frac{df}{dt} = \frac{r^2\dot{\varphi}}{2} = const$$

Vagyis **a bolygók vezérsugara egyenlő idők alatt egyenlő területeket súrol**. A Nagy Károly könyvben máshogy van, de elvileg ugyan az. Érdemes azt is megnézni és úgy a kéttest probléma jobban érthető.

3.2.2. Kéttest-probléma

Vegyük figyelembe a Nap mozgását is. Legyen M a Nap tömege, $\mathbf{r}_1$ a Nap helyvektora, m a bolygó tömege, $\mathbf{r}_2$ a bolygó helyvektora. A közöttük ható gravitációs erő $\mathbf{F}_{12} = -\mathbf{F}_{21} = \frac{\gamma m M}{r^2}\frac{\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1}{r}$. Így a mozgásegyenletek:

$$M\ddot{\mathbf{r}}_1 = \frac{\gamma m M}{r^2}\frac{\mathbf{r}}{r}$$

$$m\ddot{\mathbf{r}}_2 = -\frac{\gamma m M}{r^2}\frac{\mathbf{r}}{r}$$

A rendszer tömegközéppontja

$$\mathbf{r}_0 = \frac{M\mathbf{r}_1 + m\mathbf{r}_2}{m+M}$$

egyenes vonalú egyenletes mozgást végez, mivel a két mozgásegyenletet összeadva azt kapjuk, hogy $M\ddot{\mathbf{r}}_1 + m\ddot{\mathbf{r}}_2 = 0$. Ebbe behelyettesítve a tömegközéppont definícióját pont azt kapjuk, hogy $(M+m)\ddot{\mathbf{r}}_0 = 0$. Ez egy inerciarendszer, tehát vizsgáljuk innen a mozgást, azaz $\mathbf{r}_0 = 0$, így $M\mathbf{r}_1 + m\mathbf{r}_2 = 0$. Felírva a rendszer impulzusmomentumát:

$$\mathbf{N} = M\left(\mathbf{r_1} \times \dot{\mathbf{r}}_\mathbf{1}\right) + m\left(\mathbf{r_2} \times \dot{\mathbf{r}}_\mathbf{2}\right)$$

Ezt megszorozva $\mathbf{r}_1$-el és $\mathbf{r}_2$-vel, azt kapjuk, hogy

$$\mathbf{N}\mathbf{r}_1 = \mathbf{N}\mathbf{r}_2 = 0$$

Azaz mindkét vektor merőleges az impulzusmomentumra, tehát a Nap és a bolygó is a tömegközépponton átmenő $\mathbf{N}$ normálisú síkban mozog. A következő számolás erejéig alkalmazzuk a következő jelöléseket $M \to m_1$, $m \to m_2$, $M \to m_1 + m_2$ így a tömegközéppont

$$\mathbf{r}_0 = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{M}$$

alakban írható. Fejezzük ki $m_1\mathbf{r}_1$-et a tömegközéppont és az $\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$ helyvektorokkal:

$$m_1\mathbf{r}_1 = m_1\frac{M}{M}\mathbf{r}_1 = m_1\frac{m_1+m_2}{M}\mathbf{r}_1 = \frac{m_1^2+m_1m_2}{M}\mathbf{r}_1 = \frac{m_1^2}{M}\mathbf{r}_1 + \frac{m_1m_2}{M}\mathbf{r}_1 + \frac{m_1m_2}{M}\mathbf{r}_2 - \frac{m_1m_2}{m}\mathbf{r}_2 =$$

$$= m_1\frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{M} + \frac{m_1m_2}{M}\left(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2\right) = m_1\left(\mathbf{r}_0 - \frac{m_2}{M}\mathbf{r}\right)$$

Teljesen hasonló számolásból

$$m_2\mathbf{r}_2 = m_2\left(\mathbf{r}_0 + \frac{m_1}{M}\mathbf{r}\right)$$

Visszatérve az eredeti jelölésekre tehát:

$$M\mathbf{r}_1 = M\left(\mathbf{r}_0 - \frac{m}{M+m}\mathbf{r}\right)$$

$$m\mathbf{r}_2 = m\left(\mathbf{r}_0 + \frac{M}{M+m}\mathbf{r}\right)$$

Ezeket idő szerint deriválva kétszer, kihasználva, hogy $\ddot{\mathbf{r}}_0 = 0$, és kivonva az elsőt a másodikból a következőt kapjuk:

$$\frac{mM}{m+M}\ddot{\mathbf{r}} = -\frac{\gamma m M}{r^2}\frac{\mathbf{r}}{r}$$

egyenlet az eredmény. Vezessük be a $\mu = \frac{mM}{m+M}$ redukált tömeget. Ismét síkbeli polárkoordinátákat használva, az előző pontban követett eljárással azonosan adódik a megoldás, csak a konstansok mások. Az eredmény tehát a bolygó Naphoz viszonyított relatív mozgása:

$$r(\varphi) = \frac{p}{1 + \varepsilon cos(\varphi - \varphi_0)}$$

itt azonban

$$p = \frac{\lambda^2}{\gamma(m+M)}$$

$$\varepsilon = \frac{A\lambda^2}{\gamma(m+M)}$$

Kepler első és harmadik törvénye továbbra is változatlan, de a második módosításra szorul:

$$\frac{T^2}{a^3} = \frac{4\pi^2}{\gamma(m+M)} = \frac{4\pi^2}{\gamma M\left(1+\frac{m}{M}\right)}$$

Meghatározható a Nap és bolygónak a tömegközépponthoz viszonyított mozgása is:

$$\mathbf{r}_1 = -\frac{m}{M+m}\mathbf{r}$$

$$\mathbf{r}_2 = \frac{M}{m+M}\mathbf{r}$$

Látható, hogy a Nap pályája jóval "kisebb", mivel $\frac{m}{M+m} << \frac{M}{m+M}$, valamint a bolygó tömegközépponthoz viszonyított mozgása csak kicsit tér el a relatív mozgástól.

3.2.3. Perihélium elfordulás

Ez nálam rosszul van leírva. Elkérni Dani jegyzetét

3.3. Potenciálvölgy

Vegyünk egy véges mély potenciálban mozgó részecskét:

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{ha } x \in [-a,a] \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases}$$

Így a Schrödinger-egyenletet felírva a három különböző tartományra, feltéve, hogy $V_0 < E < 0$ a következőt kapjuk:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''_{1,3} = -\left|E\right|\psi_{1,3} \Rightarrow \psi''_{1,3} = \frac{2m\left|E\right|}{\hbar^2}\psi_{1,3} = \gamma^2\psi_{1,3}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''_2 - V_0\psi_2 = -\left|E\right|\psi_2 \Rightarrow \psi''_2 = -\frac{2m\left(V_0-\left|E\right|\right)}{\hbar^2}\psi_2 = -k^2\psi_2$$

Ezek megoldása egyszerűen adódik:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\gamma x} + Be^{-\gamma x} & \text{ha } x < -a \\ Csin\left(kx\right) + Dcos\left(kx\right) & \text{ha } x \in [-a,a] \\ Fe^{\gamma x} + Ge^{-\gamma x} & \text{ha } x > a \end{cases}$$

Kihasználva a normálási feltételt, tehát, hogy $\psi_{1,3}$ a $\pm\infty$-ben lecseng, ezért $B = F = 0$.

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\gamma x} & \text{ha } x < -a \\ Csin\left(kx\right) + Dcos\left(kx\right) & \text{ha } x \in [-a,a] \\ Ge^{-\gamma x} & \text{ha } x > a \end{cases}$$

Vezessük be a $\hat{P}f(x) = f(-x)$ hatású úgynevezett paritás operátor. Könnyen belátható, hogy ennek sajátfüggvényei a páros függvények $\lambda = 1$ sajátértékkel, valamint a páratlan függvények $\lambda = -1$ sajátértékkel. Lássuk be, hogy ez az operátor szimmetrikus potenciál esetén kommutál a Hamilton-operátorral, azaz létezik közös sajátfüggvény rendszer.

$$\left[\hat{P},\hat{H}\right] = \left(\hat{P}\hat{H} - \hat{H}\hat{P}\right)f(x) = \hat{P}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} + V(x)f(x)\right) - \hat{H}f(-x) =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 f(-x)}{\partial x^2} + V(-x)f(-x) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 f(-x)}{\partial x^2} - V(x)f(-x) = V(-x)f(-x) - V(x)f(-x)$$

Kihasználva, hogy a potenciál szimmetrikus, azaz $V(x) = V(-x)$, azt kapjuk, hogy

$$\left[\hat{P},\hat{H}\right] = 0\square$$

Ezek alapján a megoldást felbonthatjuk két részre. Egyikben páros, a másikban pedig páratlan függvények szerepelnek. Azaz:

$$\psi_A(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = Ae^{\gamma x} & \text{ha } x < -a \\ \psi_2(x) = Csin\left(kx\right) & \text{ha } x \in [-a,a] \\ \psi_3(x) = Ge^{-\gamma x} & \text{ha } x > a \end{cases}$$

valamint

$$\psi_B(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = Ae^{\gamma x} & \text{ha } x < -a \\ \psi_2(x) = Dcos\,(kx) & \text{ha } x \in [-a, a] \\ \psi_3(x) = Ge^{-\gamma x} & \text{ha } x > a \end{cases}$$

Alkalmazva a határfeltételeket a ψ_A csoportra, azaz

$$\psi_1(-a) = \psi_2(-a) \Rightarrow Ae^{-\gamma a} = Csin\,(-ka) = -Csin\,(ka)$$

$$\psi_1'(-a) = \psi_2'(-a) \Rightarrow \gamma Ae^{-\gamma a} = -Ckcos\,(ka)$$

leosztva a másodikat az elsővel, majd beszorozva a-val, azt kapjuk, hogy

$$\gamma a = -ka \cdot ctg\,(ka)$$

Alkalmazva a határfeltételeket a ψ_B csoportra, azaz

$$\psi_1(-a) = \psi_2(-a) \Rightarrow Ae^{-\gamma a} = Dcos\,(-ka) = Dsin\,(ka)$$

$$\psi_1'(-a) = \psi_2'(-a) \Rightarrow \gamma Ae^{-\gamma a} = -Dksin\,(-ka) = Dksin\,(ka)$$

Itt is leosztva a másodikat az elsővel és beszorozva a-val, a következőt kapjuk:

$$\gamma a = ka \cdot tg\,(ka)$$

Vezessük be az $X^2 = k^2a^2$ és $Y^2 = \gamma^2 a^2$ változókat és számoljuk ki $X^2 + Y^2$-et:

$$X^2 + Y^2 = \frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2}a^2 + \frac{2m\,|E|}{\hbar^2}a^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}a^2$$

Ezek $\frac{2mV_0}{\hbar^2}a^2$ sugarú körök az $X - Y$ koordinátarendszerben. Páros függvények esetén tehát a lehetséges energiaszinteket páros esetben az

$$\begin{cases} X^2 + Y^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}a^2 \\ Y = Xtg(X) \end{cases}$$

görbék metszéspontjai adják, míg páratlan esetben

$$\begin{cases} X^2 + Y^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}a^2 \\ Y = Xctg(X) \end{cases}$$

3.4. Oszcillátor

3.4.1. Schrödinger-egyenletes megoldás

Legyen a potenciál

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

Felírva a Schrödinger-egyenletet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi = E\psi$$

vezessük be a $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ és a $k = \frac{2E}{\hbar\omega}$ változókat. Így a következőt kapjuk:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial\xi^2} = \left(\xi^2 - k\right)\psi$$

Keressük az aszimptotikus megoldást, azaz $\xi \to \infty \Rightarrow \xi^2 \to \infty\xi^2 >> k$. Így

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} \approx \xi^2\psi \Rightarrow \psi = Ae^{-\frac{\xi^2}{2}} + Be^{\frac{\xi^2}{2}}$$

A normáltság teljesülése miatt a $B = 0$. Keressük a további megoldást egy ξ-től függő polinom alakban.

$$\psi(\xi) = h(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

Képezve az első és második deriváltat:

$$\frac{d\psi}{d\xi} = \frac{dh}{d\xi}e^{-\frac{\xi^2}{2}} + h(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}} = \left(\frac{dh}{d\xi} - \xi h(\xi)\right)e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = \left(\frac{d^2h}{d\xi^2} - h - 2\xi\frac{dh}{d\xi} + \xi^2 h\right)e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

Ezt behelyettesítve az egyenletbe:

$$\frac{d^2h}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dh}{d\xi} + (\xi^2 - 1)h = (\xi^2 - k)h \Rightarrow \frac{d^2h}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dh}{d\xi} + (k-1)h = 0$$

Keressük h-t sor alakban: $h(\xi) = \sum\limits_{j=0}^{\infty} a_j\xi^j$. Képezve a megfelelő deriváltakat:

$$2\xi\frac{dh}{d\xi} = \sum_{j=0}^{\infty} 2a_j j\xi^j$$

$$\frac{d^2h}{d\xi^2} = \sum_{j=0}^{\infty} a_j(j(j+1))\xi^{j-2} = \sum_{l=0}^{\infty} a_{l+2}(l+2)(l+1)\xi^l$$

ezeket visszahelyettesítve az egyenletbe, ξ^j-t kiemelve, rendezve, a következő rekurziós relációt kapjuk:

$$a_{j+2} = a_j\frac{2j+1-k}{(j+1)(j+2)}$$

Ha a hatványsor nem véges, akkor ez a rekurziós reláció visszahozza az előzőleg kizárt divergáló tagot, ezért a hatványsort végesnek választjuk. Azaz $2j+1-k=0$ valamilyen j-re. Így $j=n$ esetén $k=2n+1$. Viszont k-ról tudjuk, hogy

$$k = 2n+1 = \frac{2E}{\hbar\omega} \Rightarrow E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

$$\psi_n = h(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}} = H_n(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

Itt $H_n(\xi)$-k az úgynevezett Hermite-polinomok. Ezek a

$$\frac{d^2H_n}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dH_n}{d\xi} + 2nH_\xi = 0$$

differenciálegyenletet elégítik ki és az általános alakjuk:

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}\left(e^{-x^2}\right)$$

3.4.2. Oszcillátoralgebra

Írjuk fel a problémát:

$$\frac{1}{2m}\left[\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)^2 + (m\omega x)^2\right]\psi = E\psi$$

Vezessük be a következő két operátort:

$$\hat{a}_\pm = \frac{1}{\sqrt{2m}}\left(\hat{p} \pm im\omega\hat{x}\right) = \frac{1}{\sqrt{2m}}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} \pm im\omega x\right)$$

Számoljuk ki az $\hat{a}_-\hat{a}_+$ mennyiséget:

$$\hat{a}_-\hat{a}_+ = \frac{1}{2m}\left(\hat{p} - im\omega\hat{x}\right)\left(\hat{p} + im\omega\hat{x}\right) = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}^2 + im\omega\hat{p}\hat{x} - im\omega\hat{x}\hat{p} + m^2\omega^2x^2\right) = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}^2 + (m\omega x)^2 + m\hbar\omega\right)$$

hasonlóan

$$\hat{a}_+\hat{a}_- = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}^2 + (m\omega x)^2 - m\hbar\omega\right)$$

Így a két operátor kommutátora:

$$[\hat{a}_-, \hat{a}_+] = \hbar\omega$$

A Schrödinger-egyenletet tehát felírhatjuk a következő módon:

$$\left[\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2}\hbar\omega\right]\psi = \left[\hat{a}_-\hat{a}_+ - \frac{1}{2}\hbar\omega\right]\psi = E\psi$$

Tegyük fel, hogy létezik normálható ψ megoldás. Lássuk be, hogy ekkor $\hat{a}_+\psi$ is megoldás.

$$\left[\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2}\hbar\omega\right]a_+\psi = \hat{a}_+\hat{a}_-\hat{a}_+ + \frac{\hbar}{2}\omega\hat{a}_+\psi = \hat{a}_+\left[\hat{a}_-\hat{a}_+ + \frac{1}{2}\hbar\omega\right]\psi$$

Használjuk fel a kommutátort:

$$\hat{a}_+\left[\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2}\hbar\omega + \hbar\omega\right]\psi = \hat{a}_+\left\{\left[\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2}\hbar\omega\right]\psi + \hbar\omega\psi\right\} = \hat{a}_+\left(E + \hbar\omega\right)\psi = \left(E + \hbar\omega\right)\hat{a}_+\psi\square$$

Ugyan ilyen módon belátható, hogy $\hat{a}_-\psi$ is megoldás $E - \hbar\omega$ sajátértékkel. Az $\hat{a}_+$ tehát $\hbar\omega$ egységgel feljebb lépteti az energiát, így ezt keltő operátornak nevezik, míg az $\hat{a}_-$ pedig $\hbar\omega$ egységgel lejjebb lépteti az energiát, így ezt eltűntető operátornak nevezik. Az operátorok definíciója alapján pedig ki lehet számolni, hogy mi lesz az adott energiához tartozó hullámfüggvény. Ugyanakkor az energia nem lehet negatív, tehát létezik egy E_0 és ψ_0 alapállapot, ami még megoldás, de $\hat{a}_-\psi_0 = 0$ ami már nem, mivel nem normálható.

$$\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} - im\omega x\right)\psi_0 = 0 \Rightarrow \frac{d\psi_0}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar}x\psi_0 \Rightarrow \psi_0 = Ce^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

ami megegyezik az előző módszerrel kapottal. Az alapállapoti energia pedig a következő képpen adódik:

$$\left[\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2}\hbar\omega\right]\psi_0 = E_0\psi_0$$

A bal oldalt felbontva az első tagban már nem tudjuk lefele léptetni az alapállapotot, így az nulla. Ami marad az tehát:

$$\frac{1}{2}\hbar\omega = E_0$$

Ebből pedig a léptető operátoroknak a sajátértékre való hatását ismerve:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

Ami szintén megegyezik az előző pontban kapottal.

3.5. Rotátor

A probléma vizsgálatához először határozzuk meg a gömbi koordinátákban vett Laplace-operátor sajátfüggvényeit és sajátértékeit. Először a tisztánlátás kedvéért írjuk fel az egyes koordinátákat:

$$\hat{L}_x = -i\hbar\left(-\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \cos\varphi\cot\vartheta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar\left(\cos\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \sin\varphi\cot\vartheta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2} + \cot\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)$$

Mivel $\hat{L}^2$ a forgáscsoport Casimir-operátora, ezért minden más elemmel kommutál, tehát létezik az egyes impulzusmomentum komponenseknek, így az $\hat{L}_z$-nek és az $\hat{L}^2$-nek közös sajátfüggvény rendszere. Oldjuk meg az $\hat{L}_z$ sajátértékproblémáját.

$$-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} = l_z\psi \Rightarrow \psi = \Theta(\vartheta)e^{i\frac{l_z}{\hbar}}\varphi = \Theta(\vartheta)e^{im\varphi}$$

Itt bevezettük az $l_z = m\hbar$ jelölést. Itt m egy egész szám, ami a φ-re vonatkozó periodikus határfeltételből következik. Helyettesítsük be ezt a ψ-t az $\hat{L}^2$ sajátértékegyenletébe.

$$-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2} + \cot\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \frac{m^2}{\sin^2\vartheta}\right)\Theta(\vartheta)e^{im\varphi} = L^2\Theta(\vartheta)e^{im\varphi}$$

Osszunk le az exponenciális tagokkal, rendezzünk nullára és az első két tagot írjuk át más alakba:

$$\left(\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{d}{d\vartheta}\sin\vartheta\frac{d}{d\vartheta}-\frac{m^2}{\sin^2\vartheta}+\frac{L^2}{\hbar^2}\right)\Theta(\vartheta)=0$$

Vezessük be a $\xi=\cos\vartheta \Rightarrow d\xi=-\sin\vartheta d\vartheta$ helyettesítést. Így

$$\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{d}{d\vartheta}=-\frac{d}{d\xi}$$

$$\sin\vartheta\frac{d}{d\vartheta}=-\sin^2\vartheta\frac{d}{d\xi}=-(1-\xi^2)\frac{d}{d\xi}$$

Ezekkel az egyenlet a következő módon írható:

$$\frac{d}{d\xi}\left((1-\xi^2)\frac{d\Theta}{d\xi}\right)+\left(\frac{L^2}{\hbar^2}-\frac{m^2}{1-\xi^2}\right)\Theta=0$$

Az egyenleten látszik, hogy $\xi=\pm1$-ben szinguláris, így a megoldásnak ezt kompenzálnia kell. Emiatt keressük a megoldást $\Theta=(1-\xi^2)^\alpha$ alakban. Számoljuk ki a megfelelő deriváltat:

$$\frac{d}{d\xi}\left((1-\xi^2)\frac{d\Theta}{d\xi}\right)=\frac{d}{d\xi}\left((1-\xi^2)(-2a\xi)(1-\xi^2)^{\alpha-1}\right)=\frac{d}{d\xi}\left(-2\alpha\xi(1-\xi^2)^\alpha\right)=-2\alpha(1-\xi^2)^\alpha+4\alpha^2\xi^2(1-\xi^2)^{\alpha-1}=$$

$$=-(2\alpha+4\alpha^2)(1-\xi^2)^\alpha+4\alpha^2(1-\xi^2)^{a-1}$$

A kifejezés $|\xi|\approx1$ esetén a második tag dominál, így annak kell a $-\frac{m^2}{1-\xi^2}\Theta=-m^2(1-\xi^2)^{\alpha-1}$ tagot kompenzálni. Ebből látszik, hogy $4\alpha^2=m^2$. Az aszimptotikus megoldás tehát

$$\Theta_a=(1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}}$$

A teljes megoldást keressük az aszimptotikus megoldás és egy véges sor szorzataként:

$$\Theta=\Theta_a\sum_{j=0}^{k}c_j\xi^j$$

Képezve a megfelelő deriváltat:

$$(1-\xi^2)\frac{d\Theta}{d\xi}=-|m|\,\xi\left(1-\xi^2\right)^{\frac{|m|}{2}}\sum_{j=0}^{k}c_j\xi^j+\left(1-\xi^2\right)^{\frac{|m|}{2}+1}\sum_{j=0}^{k}jc_j\xi^{j-1}$$

$$\frac{d}{d\xi}\left((1-\xi^2)\frac{d\Theta}{d\xi}\right)=-|m|\,(1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}}\sum_{j=0}^{k}c_j\xi^j+m^2\xi^2(1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}-1}\sum_{j=0}^{k}c_j\xi^j-|m|\,\xi(1-\xi^2)^{\frac{m}{2}}\sum_{j=0}^{k}jc_j\xi^{j-1}-$$

$$-(|m|+2)\xi(1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}}\sum_{j=0}^{k}jc_j\xi^{j-1}+(1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}+1}\sum_{j=0}^{k}j(j-1)c_j\xi^{j-2}$$

Visszaírva ezeket az eredeti differenciálegyenletbe és valami csodálatos átalakítást elvégezve:

$$\frac{d}{d\xi}\left((1-\xi^2)\frac{d\Theta}{d\xi}\right)+\left(\frac{L^2}{\hbar^2}-\frac{m^2}{1-\xi^2}\right)\Theta=$$

$$=(1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}}\left[\sum_{j=0}^{k}\left(\frac{L^2}{\hbar^2}-(|m|+j)(|m|+j+1)\right)c_j\xi^j+\sum_{j=0}^{k-2}(j+2)(j+1)c_{j+2}\xi^j\right]$$

Ebben az egyenletben az egyik összegzés két taggal korábban véget ér mint a másik, ezek kiejthetik egymást az első összegzés megfelelő tagjaival. Még mindig marad két tag, viszont a kezdeti feltételek alapján szabadon választhatjuk meg vagy a páros, vagy a páratlan c_j-ket. ha ezek közül bármelyiket nullának választjuk, akkor az összes páros vagy páratlan tag nulla lesz. Összességében tehát az első összegzésből marad meg egyetlen egy tag. Így az egyenlet minden $c_j\xi^j$-re akkor teljesül, ha az együttható nulla valamilyen $j=k$ esetén, azaz:

$$\frac{L^2}{\hbar^2}=(|m|+k)(|m|+k+1)$$

Vezessük be az $l = |m| + k \Rightarrow l \geq |m|$ jelölést, így

$$L^2 = l(l+1)\hbar^2$$

A differenciálegyenlet megoldásai egyébként az $l - |m|$ fokú asszociált Legendre-polinomok. Ezekkel a hullámfüggvény:

$$\psi_{lm} = (1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}} P_l^m(\xi) e^{-im\varphi}$$

Ez $l = |m|$ esetén $k = 0$, azaz

$$\Theta_{l,-l} = (1-\xi^2)^{\frac{l}{2}} = \sin^l \vartheta$$
$$\psi_{l,-l}(\vartheta, \varphi) = \sin^l \vartheta e^{-il\varphi}$$

A többi sajátfüggvény megkapható a kommutációs relációk használatával:

$$\left[\hat{L}_z, \hat{L}_x\right] = i\hbar \hat{L}_y$$
$$\left[\hat{L}_z, i\hat{L}_y\right] = \hbar \hat{L}_x$$

így

$$\left[\hat{L}_z, (\hat{L}_x + i\hat{L}_y)\right] = \hbar(\hat{L}_x + i\hat{L}_y)$$

Valamint

$$\hat{L}_z(\hat{L}_x + i\hat{L}_y) - (\hat{L}_x + i\hat{L}_y)\hat{L}_z = \hbar(\hat{L}_x + i\hat{L}_y)$$

Átrendezve és alkalmazva $\psi_{l,m}$-re:

$$\hat{L}_z\left((\hat{L}_x + i\hat{L}_y)\psi_{l,m}\right) = (m+1)\hbar\left((\hat{L}_x + i\hat{L}_y)\psi_{l,m}\right)$$

Illetve

$$\hat{L}^2\left((\hat{L}_x + i\hat{L}_y)\psi_{l,m}\right) = l(l+1)\hbar\left((\hat{L}_x + i\hat{L}_y)\psi_{l,m}\right)$$

Tehát

$$\psi_{l,m+1} \propto (\hat{L}_x + i\hat{L}_y)\psi_{l,m}$$

Bevezethető az

$$\hat{L}_+ = \hbar e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\vartheta} + i\cot\vartheta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

léptető operátort. Ezzel tetszőleges hullámfüggvény felírható:

$$\psi_{l,m} = \left[e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\vartheta} + i\cot\vartheta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\right]^{m+l} \sin^l\vartheta e^{-il\varphi}$$

Az $\hat{L}_z$ és az $\hat{L}^2$ normált sajátfüggvényei az úgynevezett gömbfüggvények:

$$Y_{lm} = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} i^l \left[\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}\right]^{\frac{1}{2}} \sin^{|m|}\vartheta P_l^{|m|}(\cos\vartheta)e^{im\varphi}$$
$$\hat{L}_z Y_{lm} = m\hbar Y_{lm}$$
$$\hat{L}^2 Y_{lm} = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}$$
$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\vartheta Y_{lm}^*(\vartheta,\varphi) Y_{l'm'}(\vartheta,\varphi) d\vartheta = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

Most, hogy ezt kiszámoltuk, rátérhetünk a forgó molekulák színképére *(rotációs színkép)*. Klasszikusan

$$\mathbf{L}^2 = (\mathbf{r}\times\mathbf{p})^2 = \mathbf{r}^2\mathbf{p}^2 - \mathbf{r}^2 p_r^2$$

felhasználva ezt

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} = \frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{\mathbf{L}^2}{2\mu r^2}$$
$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\triangle = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2} + \cot\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)\right]$$

Mivel $r = const$, ezért a a hullámfüggvény csak a szögektől függ.

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\left(\left(\frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2} + \cot\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{1}{\sin^2\vartheta} + \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)\right)\psi = E\psi$$

Vegyük észre, hogy ez éppen az $\hat{L}^2$ operátor:

$$\frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2}\psi = E\psi \Rightarrow E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}$$

a normált sajátfüggvények pedig a gömbfüggvények.

3.6. Hidrogénatom

Vegyünk egy centrális $V(r)$ potenciált és írjuk fel a Schrödinger-egyenletet gömbi koordinátákban:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2}+\cot\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}+\frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)\right]\psi(r,\vartheta,\varphi)+V(r)\psi(r,\vartheta,\varphi)=E\psi(r,\vartheta,\varphi)$$

Keressük a megoldást $\psi(r,\vartheta,\varphi)=R(r)Y(\vartheta,\varphi)$ alakban. Ezt visszahelyettesítve, elvégezve a deriválásokat és a sugár illetve szögfüggő tagokat külön oldalra rendezve a következőt kapjuk:

$$\frac{r^2}{R}\left(\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}\right)+\frac{2\mu r^2}{\hbar^2}\left(E-V(r)\right)=-\frac{1}{Y}\left(\frac{\partial^2Y}{\partial\vartheta^2}+\cot\vartheta\frac{\partial Y}{\partial\vartheta}+\frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2Y}{\partial\varphi^2}\right)$$

A két oldal csak akkor egyezik meg, ha ugyanazzal a konstanssal egyenlőek, azaz:

$$\begin{cases}\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}-\frac{\lambda}{r^2}R+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E-V(r)\right)R=0\\ \frac{\partial^2Y}{\partial\vartheta^2}+\cot\vartheta\frac{\partial Y}{\partial\vartheta}+\frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2Y}{\partial\varphi^2}=-\lambda Y\end{cases}$$

A második egyenlet megoldását ismerjük, ezek a gömbfüggvények, $\lambda=l(l+1)$ sajátértékkel. Valamint azt is látjuk, hogy az energiát tisztán a radiális rész határozza meg. Tehát $\psi=R(r)Y_l^m(\vartheta,\varphi)$. Felírva a radiális részt:

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E+\frac{e^2}{r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)R=0$$

Dimenziótlanítsuk az egyenletet az

$$r_0=-\frac{\hbar^2}{2\mu E}$$

és

$$\xi=2\frac{r}{r_0}$$

Így az egyenlet a következő alakot veszi fel:

$$\frac{d^2R}{d\xi^2}+\frac{2}{\xi}\frac{dR}{d\xi}+\left[-\frac{1}{4}+\frac{\varepsilon}{\xi}-\frac{l(l+1)}{\xi^2}\right]R=0$$

ahol

$$\varepsilon=\frac{\mu e^2r_0}{\hbar^2}$$

Keressük az aszimptotikus megoldást, azaz $\xi\to\infty$. Erre a differenciálegyenlet átmegy a következő alakba:

$$\frac{d^2R_a}{d\xi^2}-\frac{1}{4}R_a=0\Rightarrow R_a(\xi)=e^{-\frac{\xi}{2}}$$

A teljes megoldást keressük az $R(\xi)=R_a(\xi)v(\xi)$ alakban. Ezt behelyettesítve a nem aszimptotikus egyenletbe:

$$\frac{d^2v}{d\xi^2}+\left(\frac{2}{\xi}-1\right)\frac{dv}{d\xi}+\left(\frac{\varepsilon-1}{\xi}-\frac{l(l+1)}{\xi^2}\right)v=0$$

Keressük $v(\xi)$-t hatványsor alakban. Vegyük észre, hogy ez nem kezdődhet állandó taggal, mivel ekkor az egyenletben fellépne egy $c_0\xi^{-2}$ tag, amit semmi nem kompenzál, és ez a $\xi=0$ helyen divergálna. Tehát

$$v(\xi)=\sum_{r=0}c_r\xi^{r+s}$$

Ezt behelyettesítve az egyenletbe*(Ezt egyszer végigszámoltam, igazából nem nehéz csak nagyon figyelni kell a rendezgetésnél és összevonásoknál, de egyszerűen kijön.)* és kiírva a legalacsonyabb ξ^{s-2} illetve a ξ^{s+r+1} hatvány együtthatóját és tegyük egyenlővé nullával:

$$s(s+1)-l(l+1)=0$$

$$\left[(r+s+1)(r+s+2)-l(l+1)\right]c_{r+1}-(r+s+1-\varepsilon)c_r=0$$

Rendezve a másodikat, egy rekurziós relációt kapunk:

$$c_{r+1}=\frac{r+s+1-\varepsilon}{(r+s+1)(r+s+2)-l(l+1)}c_r$$

Az első egyenletből meghatározható a legalacsonyabb fokú hatvány s kitevője. Ennek két megoldása van: $s = l$ és $s = -l - 1$, de a második nem lehet, mivel $l > 0$, így $s < 0$ lenne, ekkor pedig nem szűnne meg a divergálás, tehát $s = l$

$$c_{r+1} = \frac{r + l + 1 - \varepsilon}{(r + l + 1)(r + l + 2) - l(l + 1)} c_r \Rightarrow p + l + 1 - \varepsilon = 0$$

Azaz

$$\varepsilon = p + l + 1 = n$$

visszahelyettesítve az ε-ra bevezetett kifejezést, majd rendezve az energiára:

$$E_n = -\frac{\mu e^2}{2\hbar^2 n^2}$$

Boncoljuk tovább a sajátfüggvényeket, legyen:

$$v(\xi) = \xi^l w(\xi)$$

Behelyettesítve a v differenciálegyenletébe, a következőt kapjuk:

$$\xi \frac{d^2 w}{d\xi^2} + [2(l + 1) - \xi] \frac{dw}{d\xi} + (n + l + 1)w = 0$$

Ennek a megoldása az $n + 1$-edik Laugerre-polinom $(2l + 1)$-edik deriváltja. A k-adik Laugerre-polinom alakja a következő:

$$L_k(\xi) = \frac{e^\xi}{k!} \frac{d^k}{d\xi^k} \left(\xi^k e^{-\xi}\right)$$

Ezzel a radiális rész megoldása:

$$R(\xi) = R_{nl}(\xi) = e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^l L_{n+1}^{(2l+1)}(\xi)$$

Ezt visszahelyettesítve a teljes hullámfüggvény:

$$\psi_{nlm} = N e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^l L_{n+1}^{(2l+1)}(\xi) Y_l^m(\vartheta, \varphi)$$

Az energiákat n főkvantumszám határozza meg, $n = l + p + 1$. Adott n esetén l lehetséges értékei $l = 0, 1, ..., n - 1$. Az l-et mellékkvantumszámnak nevezzük, m-et mágneses kvantumszámnak, ami minden l-hez $-l, -l + 1, ..., -1, 0, 1, ...l - 1, l$, ami összesen $2l + 1$ érték. Emiatt egy E_n energia-sajátértékhez*(adott n-hez)*

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2$$

lineárisan független sajátfüggvény van, azaz az energiaszintek n^2-szeresen degeneráltak.
Ha az atommag mozgását is figyelmbe vesszük, akkor hasonlóan a klasszikus kéttest-problémához hasonlóan relatív és tömegközépponti koordinátákkal kell dolgozni. Ez egy konstanssal való eltolásként jelenik meg az energiaszintekben. A Nagy Károly könyvben bentvan, ide nem érdemes leírni, meg nem is biztos, hogy ide kell.

4. Folytonos közegek mechanikája(Novák Martin)

4.1. Rugalmas és képlékeny alakváltozások, speciális deformációk

4.1.1. Egyszerű rugalmas alakváltozások

Kísérlettel meghatározható, hogy ha adott keresztmetszetű és hosszúságú fémhuzalt nyújtunk egy adott erővel, akkor a Δl megnyúlás fordítottan arányos a huzal keresztmetszetével és egyenesen arányos a feszítő erővel, illetve huzalhosszal. Azaz:

$$\Delta l \propto \frac{Fl}{A}$$

Az arányossági együttható a huzal anyagi minőségére jellemző, a huzal erővel szembeni ellenállását jellemzi. Ezt jelöljük E-vel és nevezzük el Young-modulusnak. Így:

$$\Delta l = \frac{1}{E}\frac{Fl}{A}$$

Dimenzióanalízisből látszik, hogy ennek a dimenziója Pa. A huzal egyenlő szakaszainak megnyúlása egyenlő mértékben járul hozzá a teljes megnyúláshoz. Így a megnyúlás helyett vezessük be a $\varepsilon = \frac{\Delta l}{l}$ relatív hosszváltozást és a $\sigma = \frac{F}{A}$ feszültségnek nevezett menyiséget. Ekkor felírhatjuk a következőt:

$$\sigma = E\varepsilon$$

Ez a Hooke-törvény.
Nyújtsunk meg egy l hosszú, A keresztmetszetű rudat Δl-el. Az x hosszal megnyújtott rúdban

$$F(x) = \frac{EA}{l}x$$

erő ébred. A nyújtás közben végzett munka:

$$W = \int_0^{\Delta l} F(x)dx = \frac{EA}{l}\int_0^{\Delta l} xdx = \frac{1}{2}\left(\frac{EA}{l}\right)(\Delta l)^2$$

A rugókhoz hasonló módon hozzárendeljük a huzalhoz a $D = \frac{EA}{l}$ direkciós állandót. Az energiasűrűség pedig:

$$u = \frac{\frac{1}{2}\left(\frac{EA}{l}\right)(\Delta l)^2}{Al} = \frac{1}{2}E\left(\frac{\Delta l}{l}\right)^2 = \frac{1}{2}E\varepsilon^2 = \frac{1}{2}\sigma\varepsilon$$

Azt is láthatjuk kísérletből, hogy a nyújtást illetve összenyomást keresztmetszet változás is kíséri. Kísérletek alapján a keresztmetszet relatív változása egyenesen arányos a hossz relatív változásával, azaz:

$$\frac{\Delta d}{d} = -\mu\frac{\Delta l}{l}$$

Itt $\mu \geq 0$ arányossági tényezőt Poisson-számnak nevezik. A negatív előjel azt mutatja, hogy nyújtáskor a keresztmetszet csökken, összenyomáskor pedig növekszik. Számoljuk ki a térfogatváltozást egy kör keresztmetszetű rúdban:

$$\Delta V = \frac{\pi}{4}(d+\Delta d)^2(l+\Delta l) - \frac{\pi}{4}d^2 l \approx \left[\frac{\Delta l}{l} + \frac{2\Delta d}{d}\right]$$

A szögletes zárójelből kiemelve $\frac{\Delta l}{l}$-et:

$$\Delta V = V\left(\frac{\Delta l}{l}\right)(1-2\mu) = V\varepsilon(1-2\mu)$$

Mivel nyújtáskor általában nem csökken a térfogat, ezért ebből látható, hogy $0 \leq \mu \leq \frac{1}{2}$
Térfogati összenyomást valósíthatunk meg, ha a testre minden irányból nyomást fejtünk ki. Tapasztalat szerint a térfogatcsökkenés egyenesen arányos a test térfogatával, a testre gyakorolt nyomással, illetve a nyomásváltozással:

$$\Delta V = -\kappa V p$$

, ahol

$$\kappa = -\frac{1}{V}\frac{\partial V}{\partial p}$$

a kompresszibilitási együttható.
Nyírásnak nevezzük azt, ha a rugalmas hasáb felső, A keresztmetszetű lapjára a lappal párhuzamosan fejtünk ki F erőt. Az erő nagyságától függően a hasáb különböző γ szöggel nyíródik. Ez egyenesen arányos az erővel, és fordítottan arányos a keresztmetszettel.

$$\gamma = \frac{1}{G}\frac{F}{A}$$

G az anyagi minőségtől függő nyírási modulus. A nyírást lehet jellemezni úgy is, hogy külső erő hatására a testnek az erővel párhuzamos rétegei elcsúsznak egymáson miközben τ nyírófeszültség próbálja őket visszahúzni:

$$F = \tau A \Rightarrow \tau = G\gamma$$

A legyen h a hasáb magassága, ekkor $\gamma = \frac{x}{h}$ ahol x a legfelső réteg elmozdulása. Így

$$F = GA\frac{x}{h}$$

A végzett munkát a nyújtáshoz hasonlóan számolhatjuk ki, ennek eredménye:

$$W = \frac{1}{2}\left(\frac{GA}{h}\right)(\Delta s)^2 \Rightarrow u = \frac{W}{V} = \frac{1}{2}\tau\gamma$$

Az összefüggések a rugalmas együtthatók között a Bérces 2-ben. Sok a kép, egyszerű számolás, ide nem érdemes leírni.

4.1.2. Speciális alakváltozások

Saját súlyával megterhelt rúd esetén tekintsünk egy m tömegű, l hosszúságú, A keresztmetszetű függőlegesen felfüggesztett homogén rudat.

$$F(x) = \frac{mg}{l}(l-x) = A\rho g(l-x) \Rightarrow \sigma(x) = \frac{F(x)}{A} = \rho g(l-x)$$

Egy Δx rúddarabon bekövetkező megnyúlás:

$$\Delta\xi = \varepsilon(x)\Delta x = \frac{\sigma(x)}{E}\Delta x = \frac{\rho g}{E}(l-x)\Delta x$$

A teljes megnyúlás:

$$\Delta l = \int_0^l d\xi = \frac{\rho g}{E}\int_0^l (l-x)dx = \frac{\rho g l^2}{2E}$$

Csavarás: Vegyünk egy l magas r sugarú hengert. Az alsó részét rögzítsük, a tetejét pedig forgassuk el φ szöggel. Ekkor egy pont elfordulásának mértéke

$$r\varphi = l\gamma \Rightarrow \gamma(r) = \frac{r}{l}\varphi \Rightarrow \tau = \mu\gamma = \frac{\mu r}{l}\varphi$$

Felírva a forgatónyomatékot egy ΔA felületelemre:

$$\Delta F = \tau\Delta A \Rightarrow \Delta M = \tau r\Delta A = \tau \cdot r2\pi r\Delta r = \frac{\mu}{l}\varphi 2\pi r^3\Delta r$$

Kiintegrálva:

$$M = \int_0^R \frac{\mu}{l}\varphi 2\pi r^3 dr = \frac{\pi}{2}\frac{\mu}{l}R^4\varphi$$

Ebből könnyen megkaphatjuk az adott mértékű forgatónyomaték hatására bekövetkező elfordulást.

Hajlítás: vegyünk egy véges vastagságú, téglalap keresztmetszetű rudat, egyik végét rögzítsük, a másikat pedig nyomjuk lefelé valamekkora erővel. Ekkor kialakul egy határréteg aminek a hossza nem változik, efelett a rétegek megnyúlnak ez alatt pedig összenyomódnak. Ezt neutrális zónának nevezik. Jellemezzük az elhajlás miatt bekövetkező görbülést egy R sugarú körrel, ahol R a kör középpontjának és a neutrális zónának a távolsága. A nézzük egy $\Delta\varphi$ szögű körív hosszát, ξ távolsággal a neutrális zóna felett. Jelölje s a neutrális vonalon a befogási ponttól mért ívhosszat. Ekkor a relatív megnyúlás:

$$\varepsilon(\xi) = \frac{(R+\xi)\Delta\varphi - R\Delta\varphi}{R\Delta\varphi} = \frac{\xi}{R(s)}$$

A feszültség pedig $\sigma = E\frac{\xi}{R(s)}$. Ettől a feszültségtől ΔA felületben $\Delta F = \sigma \Delta A$ erő ébred. Így tetszőleges keresztmetszetben a felületre merőleges belső erők összege:

$$F_b(s) = \int_A dF = \frac{E}{R}\int_A \xi \cdot dA$$

A forgatónyomaték pedig

$$M_b(s) = \int_A \xi \cdot dF = \frac{E}{R}\int_A \xi^2 \cdot dA$$

Vezessük be

$$I = \int_A \xi^2 \cdot dA$$

pedig az úgynevezett másodrendű felületi nyomaték mennyiséget, itt az integrált a neutrális rétegre, mint tengelyre kell képezni. Gyenge hajlítás esetén$(x \approx s,\ \varphi'(x) << 1)$ a kezdetben vízszintes rúd csak kicsit deformálódik. Az egyensúlyi egyenletek a következőre vezetnek:

$$F_b(x) = F_k(x) = 0$$

$$M_b(x) = \frac{EI}{R(x)} = M_k = F(L-x)$$

Használjuk fel a forgatónyomaték egyenletét, valamint azt, hogy gyenge hajlításnál $y'(x) << 1$ ezért a lehajló szálat jellemző $y(x)$ függvényből az $R(x)$ görbületi sugár:

$$\frac{1}{R(x)} = \frac{y''(x)}{(1+y'^2(x))^{3/2}} \approx y''(x)$$

Így tehát

$$y''(x) = \frac{F}{EI}(L-x)$$

Ezt kétszer integrálva:

$$y(x) = \frac{F}{EI}\left(L\frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{6} + c_1 x + c_2\right)$$

A rúd vége fixen van rögzítve, így $y(0) = 0$ valamint hajlítás közben ez nem változik meg, tehát $y'(0) = 0$, így $c_1 = c_2 = 0$. A rúd végének lehajlása így

$$s = y(L) = \frac{FL}{3EI}$$

Kihajlás: Terheljünk meg felülről egy állított, két végpontjában rögzített, de "fel-le" mozogni tudó felső rögzítési ponttal rendelkező l hosszú lemezt. A maximális oldalirányú kihajlást jelöljük y-al. Így a forgatónyomaték:

$$F \cdot y = -EI\frac{d^2y}{dx^2}$$

Keressük a megoldást $y = A \cdot sin(kx)$ alakban. Ezt behelyettesítve:

$$F = EIk^2 \Rightarrow k^2 = \frac{F}{EI}$$

Viszont a rögzítési pontokban a kihajlás nulla. Ha a felső pontba rögzítjük a koordinátarendszert, akkor ez automatikusan teljesül a felső pontban, az alsóra viszont nem feltétlenül. Kikötést kell tennünk k-ra, mivel

$$A \cdot sin(kl) = 0 \Rightarrow kl = n\pi$$

Ebből az erő:

$$F = EI\frac{\pi^2}{l^2}n^2$$

Itt látszik, hogy ha $F < \frac{EI\pi^2}{l^2} = F_k$, akkor nem történik kihajlás, mivel ez csak $n = 0$-ra teljesül. Ugyanakkor $n^2 \cdot F_k$ erők esetében egy új "félperiódus" jelenik meg a kihajlásban.

4.2. Feszültség és deformációs tenzor, általános Hooke-törvény

4.2.1. Feszültségtenzor

A valódi testek részei között akkor is hatnak erők, ha egyébként nincs külső erő. Az egyensúlyi viszonyokat viszont már a külső erők határozzák meg. A deformált állapotban levő testben az egyensúlyi helyzethez képest megváltoznak a belső erők, ezen változás eredményeképp pedig feszültség ébred a testben.
Jelöljük $\mathbf{f}(\mathbf{r})$-el a térfogati erősűrűséget és vegyünk egy kis ΔV térfogatot. Ekkor a kis térfogatdarabra ható külső erő:

$$\Delta \mathbf{F}_k = \mathbf{f}(\mathbf{r})\Delta V$$

Ebből következően a teljes külső erő:

$$\mathbf{F}_k = \int \mathbf{f}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}$$

Mivel a belső erők itt rövidtávúak, ezért a pontrendszereknél megismert erőpárokat helyettesíthetjük felület darabokkal. Tekintsünk egy kicsi felületet. Magától értetődő, hogy adott erősűrűség esetén minél nagyobbra választjuk ezt a felületet, annál nagyobb lesz a felületen ható erő*(meg elvileg kísérlet is volt rá, de nem emlékszem)*, azaz:

$$|\Delta \mathbf{F}_b| \propto |\Delta \mathbf{S}|$$

Mivel itt mindkét oldalon vektoriális mennyiség van, viszont semmiből nem következik az, hogy a felületre ható erő iránya megegyezik a felület normálisának irányával, ezért az arányszám nem feltétlenül egy sima skalár, hanem általánosabb esetben egy tenzor is lehet. Ezzel mindkét oldalon teljesül az, hogy vektor van, viszont az erő irányára nem tettünk semmi megkötést. Vezessük be tehát a $\hat{\sigma}$-val jelölt, feszültségtenzornak nevezett mennyiséget:

$$\Delta \mathbf{F}_b = \hat{\sigma} \Delta \mathbf{S}$$

Egy teljes belső kis térfogatot viszont körbevehetünk egy felülettel, tehát egy adott térfogatra ható belső erő így írható:

$$\mathbf{F}_b = \oint \hat{\sigma} d\mathbf{S} = \int \boldsymbol{\nabla} \cdot \hat{\sigma} d^3\mathbf{r}$$

Azt is tudjuk, hogy a teljes erő

$$\mathbf{F} = m\dot{\mathbf{v}} = \frac{d}{dt} \int \rho \mathbf{v} d^3\mathbf{r}$$

Mivel szilárd anyagokat vizsgálunk, ezért a térfogat állandónak tekinthető, így a deriválás bevihető az integrálás mögé:

$$\mathbf{F} = \int \rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} d^3\mathbf{r}$$

Ezekkel felírhatjuk a folytonos közegek általános mozgásegyenletét:

$$\int \left[\rho \ddot{u} - \mathbf{f} - \boldsymbol{\nabla} \cdot \hat{\sigma}\right] d^3\mathbf{r} = 0$$

Nézegessük tovább a feszültségtenzor tulajdonságait. A tenzor definíciója alapján látszik, hogy a főátlóban nyújtási illetve összenyomási feszültségek vannak, hiszen tisztán diagonális tenzor esetén az erőben a komponensek nem keverednek*(itt ezt most úgy értem, hogy az x irányú erőbe nem jön be y-t tartalmazó tag)*, tehát az erő egyirányú a deformált felület normálisával. Ez már nem teljesül a főátlón kívüli elemekre*(mert a pl. az x irányú erőbe behozhat y-os tagot is)*, így azok adott síkban történő nyíráshoz tartozó feszültségek.
Viszont a merev estek egyensúlya azonban megköveteli a nyomatéki

$$\sum_i \mathbf{M}_i = 0$$

egyenlet teljesülését is. Ezért a tenzor kilenc komponensére vonatkozóan három egyenletnek is teljesülnie kell, azaz a független komponensek száma maximum hat. Vegyünk egy $2a$ élhosszúságú kockát, aminek a középpontját tegyük a koordináta-rendszer origójába, melynek tengelyeinek irányai megegyeznek a kocka oldalainak az irányaival. Írjuk fel a forgatónyomatékok egyensúlyát kifejező egyenlet z komponensét. Az erőket felírhatjuk x és y irányú erők összegeként, melyek a kocka lapjainak középpontján hatnak. Világos, hogy a tengely irányú, egyben tengelyen levő erők nem tudnak forgatni, így ebben csak az adott tengelyre merőleges erőpárok vesznek részt, így az x tengelyről kiinduló, de arra merőleges erőpár, amit a σ_{xy} jellemez, valamint az y tengelyről kiinduló, de arra merőleges erőpár, amit pedig a σ_{yx} jellemez. A két erőpár által kifejtett $(\sigma_{xy}a^2)a$ és $(\sigma_{yx}a^2)a$ forgatónyomatékok megegyeznek. Egyensúlyban, tehát

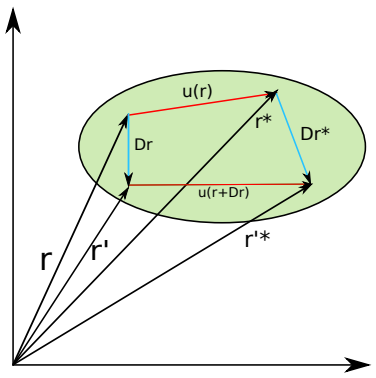
$$\sigma_{xy} = \sigma_{yx}$$

A forgatónyomaték többi komponensét hasonlóan lehet vizsgálni. Általánosan kimondható, hogy a feszültségtenzor szimmetrikus:

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$$

Ebből következően a reprezentációja a szimmetrikus mátrixok minden jó tulajdonságával rendelkezik, így a valós sajátértékekkel, és főtengely-transzformálhatósággal.

4.2.2. A deformációs tenzor



4.1 ábra: Deformációk

Határozzuk meg általánosan egy rugalmas test két pontjának távolsága közötti megváltozást egy deformáció során. Ehhez nézzük a következő ábrát*("D=Δ")*. Leolvasható, hogy $\mathbf{r}'^* = \mathbf{r}' + \mathbf{u}(\mathbf{r}+\Delta\mathbf{r}) = \mathbf{r} + \Delta\mathbf{r} + \mathbf{u}(\mathbf{r}+\Delta\mathbf{r})$ valamint $\mathbf{r}^* = \mathbf{r} + \mathbf{u}(\mathbf{r})$. Ezekből a relatív hosszváltozás a következőképpen írható:

$$\varepsilon = \frac{|\Delta\mathbf{r}'^*| - |\Delta\mathbf{r}|}{|\Delta\mathbf{r}|} = \frac{|\mathbf{r}'^* - \mathbf{r}^*| - |\Delta\mathbf{r}|}{|\Delta\mathbf{r}|} = \frac{|\mathbf{u}(\mathbf{r}+\Delta\mathbf{r}) - \mathbf{u}(\mathbf{r})|}{|\Delta\mathbf{r}|}$$

Tudjuk, hogy

$$\phi(\mathbf{r}+\Delta\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{r}) \approx \boldsymbol{\nabla}\phi\Delta\mathbf{r} = \frac{\partial\phi}{\partial r_j}\Delta r_j$$

Ezt alkalmazva az előzőleg kapott egy komponensére:

$$u_i(\mathbf{r}+\Delta\mathbf{r}) - u_i(\mathbf{r}) = \frac{\partial u_i}{\partial r_j}\Delta r_j = \beta_{ij}\Delta r_j$$

Azaz

$$\beta_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial r_j}$$

Ezt a mennyiséget disztorziónak nevezik és jellemzi azt, hogy mennyit változik a belső pontok távolsága, azaz:

$$\Delta r_i^* = \Delta r_i + \Delta u_i = \Delta r_i + \frac{\partial u_i}{\partial r_j}\Delta r_j = \left(\delta_{i,j} + \frac{\partial u_i}{\partial r_j}\right)\Delta r_j$$

Vegyünk például egy téglalapot. A téglalap oldalai legyenek párhuzamosak kezdetben a koordinátatengelyekkel. Deformáljuk a téglalapot olyan módon, hogy két átellenes sarkánál elkezdjük nyújtani. Jelöljük γ_1-el az új téglalap alsó oldalának x tengellyel bezárt szögét, γ_2-vel pedig az y tengellyel bezárt szögét. Képezzük a γ_1 szög tangensét a megfelelő megnyúlások hányadosaként:

$$\tan\gamma_1 = \frac{\frac{\partial u_y}{\partial x}\Delta x}{\left(1 + \frac{\partial u_x}{\partial x}\right)\Delta x} \approx \frac{\partial u_y}{\partial x} \approx \gamma_1 = \beta_{yx}$$

Itt feltettük, hogy a deformációk kicsik, tehát $\frac{\partial u_i}{\partial x_j} << 1$ Hasonlóan kapható a γ_2 szögre:

$$\gamma_2 \approx \frac{\partial u_x}{\partial y} = \beta_{xy}$$

Ebből látszik tehát, hogy a deformáció a téglalapot paralelogrammává alakítja. Ez megfeleltethető egy nyírásnak $\gamma = \gamma_1 + \gamma_2$ szöggel. Emiatt tehát érdemes bevezetni a következő tenzort, amely komponensei már fizikai jelentéssel is bírnak:

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2}\left[\frac{\partial u_i}{\partial r_j} + \frac{\partial u_j}{\partial r_i}\right]$$

Ezt deformációtenzornak nevezik és a diagonális komponensei nyújtásnak illetve összenyomásnak, az offdiagonális komponensei pedig nyírásoknak felelnek meg.
Számoljuk ki a relatív megnyúlást egy adott irányban:

$$|\Delta\mathbf{r} + \mathbf{u}(\mathbf{r}+\Delta\mathbf{r}) - \mathbf{u}(\mathbf{r})| = \sqrt{(\Delta r_i + \beta_{ij}\Delta r_j)(\Delta r_i + \beta_{ik}\Delta r_k)} = \sqrt{\Delta r_i\Delta r_i + \Delta r_i\beta_{ik}\Delta r_k + \Delta r_j\beta_{ij}\Delta r_i + \beta_{ij}\beta_{ik}\Delta r_j\Delta r_k} =$$

Hagyjuk el az utolsó tagot és vegyük észre, hogy a β-ban elsőrendű tagok épp a deformációtenzor kétszeresét adják, valamivel szorozva.

$$= \sqrt{\Delta r_i\Delta r_i + 2\Delta r_i\varepsilon_{ik}\Delta r_k}$$

Így tehát a relatív megnyúlás:

$$\varepsilon = \frac{|\Delta \mathbf{r}'^*| - |\Delta \mathbf{r}|}{|\Delta \mathbf{r}|} = \frac{\sqrt{\Delta r_i \Delta r_i + 2\Delta r_i \varepsilon_{ik} \Delta r_k} - \sqrt{\Delta r_i \Delta r_i}}{\sqrt{\Delta r_l \Delta r_l}} = \sqrt{1 + 2\frac{\Delta r_i \varepsilon_{ij} \Delta r_j}{|\Delta \mathbf{r}|^2}} - 1 \approx \frac{\Delta r_i \varepsilon_{ij} \Delta r_j}{|\Delta \mathbf{r}|^2}$$

azaz

$$\varepsilon = \mathbf{n}\hat{\varepsilon}\mathbf{n}$$

Vegyük észre, hogy kis téglatest deformációja esetén a relatív térfogatváltozás éppen a deformációtenzor spurja, azaz:

$$\frac{\Delta V}{V} = Sp\hat{\varepsilon}$$

4.2.3. Általánosított Hooke-törvény

Korábban kiszámoltuk, hogy egy rúd nyújtása során végzett munka:

$$W = \frac{1}{2}\left(\frac{EA}{l}\right)(\Delta l)^2$$

Ezt szorozzuk meg és osszuk le l-el és írjuk át a $\frac{\Delta l}{l}$-es tagot relatív megnyúlássá, így:

$$W = \frac{EAl}{2}\varepsilon^2 = \frac{1}{2}E\varepsilon^2 V$$

Osszunk le V-vel, ami a térfogat, így megkapjuk az energiasűrűséget:

$$w = \frac{W}{V} = \frac{1}{2}E\varepsilon^2 = \frac{1}{2}\sigma\varepsilon$$

Átírva az általánosabb, tenzoriális alakra:

$$w = \frac{1}{2}\sigma_{ij}\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}Sp(\hat{\sigma}\hat{\varepsilon})$$

Az előzőekben azt is felírtuk, hogy a feszültség és a deformáció között lineáris kapcsolat áll fenn. Ezt tenzoriális alakban felírva:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl}$$

Itt a $\hat{C}$ tenzor egy rugalmas állandókat tartalmazó tenzor. Ezt nevezik általánosított Hooke-törvénynek. Ezt írjuk be az energiasűrűségbe:

$$w = \frac{1}{2}\varepsilon_{ij}C_{ijkl}\varepsilon_{kl}$$

Képezzük a következő deriváltat:

$$\frac{dw}{d\varepsilon_{mn}} = \frac{d}{d\varepsilon_{mn}}\sum_i\sum_j\sum_k\sum_l \frac{1}{2}\varepsilon_{ij}C_{ijkl}\varepsilon_{kl} = C_{mnij}\varepsilon_{ij} = \sigma_{mn}$$

Azaz a feszültségtenzor komponensei megkaphatók az energiasűrűség deformációtenzor-komponensek szerinti deriváltjaként is.
Írjuk fel az energiasűrűséget tisztán a deformációtenzor komponenseivel. Ennek egy koordinátarendszertől független, izotróp mennyiségnek kell lennie, így csak a deformáció spurját *(ez adja a koordinátarendszertől való függetlenséget)* tartalmazhatja különböző négyzetes*(ez pedig az izotrópiát)* kombinációkban, azaz:

$$w = \mu\varepsilon_{ij}\varepsilon_{ij} + \frac{\lambda}{2}\varepsilon_{ll}^2 = \mu Sp(\hat{\varepsilon}^2) + \frac{\lambda}{2}Sp(\hat{\varepsilon})^2$$

Itt μ és λ valamilyen anyagi állandók. Fejezzük ki ebből a feszültségtenzor komponensét:

$$\sigma_{mn} = \frac{dw}{d\varepsilon_{mn}} = 2\mu\varepsilon_{mn} + \lambda\delta_{mn}\varepsilon_{ll}$$

Térjünk át az $\varepsilon_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\varepsilon_{ll}$ spurtalan mennyiségre. Ezekkel az előző kifejezés a következő módon írható:

$$\sigma_{mn} = 2\mu\left(\varepsilon_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\varepsilon_{ll}\right) + \left(\frac{2\mu}{3} + \lambda\right)\delta_{ij}\varepsilon_{ll}$$

Ebből a kifejezésből látható, hogy ha a relatív térfogatváltozás nulla, akkor a második tag nulla, így csak az első marad, ami egy tiszta nyírásnak felel meg, azaz μ a nyírási modulusz kell, hogy legyen. Ha az első tag nulla, akkor az azt jelenti, hogy σ-nak csak diagonális elemei vannak, így $\frac{2\mu}{3} + \lambda = \kappa$ a kompressziómodulusz.
Fejezzük ki az ε-t a σ-val:

$$\sigma_{kk} = 2\mu\varepsilon_{kk} + 3\lambda\varepsilon_{kk} \Rightarrow \varepsilon_{kk} = \frac{1}{2\mu + 3\lambda}\sigma_{kk}$$

$$\sigma_{kl} = 2\mu\varepsilon_{kl} + \lambda\delta_{kl}\varepsilon_{jj} = 2\mu\varepsilon_{kl} + \frac{\lambda}{2\mu + 3\lambda}\delta_{kl}\sigma_{jj} \Rightarrow \varepsilon_{kl} = \frac{1}{2\mu}\left(\sigma_{kl} - \frac{\lambda}{2\mu + 3\lambda}\delta_{kl}\sigma_{jj}\right)$$

Csak mert jó kedvünk van, fejezzük ki σ-t az elmozdulással. A következőket tudjuk:

$$\rho\ddot{\mathbf{u}} = \mathbf{f} + \boldsymbol{\nabla} \cdot \hat{\sigma}$$

$$\sigma_{ij} = 2\mu\varepsilon_{ij} + \lambda\delta_{ij}\varepsilon_{kk}$$

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}\left[\frac{\partial u_i}{\partial r_j} + \frac{\partial u_j}{\partial r_i}\right]$$

$$(\boldsymbol{\nabla} \cdot \hat{\sigma})_i = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial r_j}$$

A feszültségtenzor divergenciája tehát:

$$\frac{\partial}{\partial r_j}\left[2\mu\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial r_j} + \frac{\partial u_j}{\partial r_i}\right) + \lambda\delta_{ij}\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_k}{\partial r_k} + \frac{\partial u_k}{\partial r_k}\right)\right] = \mu\frac{\partial^2 u_i}{\partial r_j^2} + \mu\frac{\partial^2 u_j}{\partial r_j \partial r_i} + \lambda\delta_{ij}\frac{\partial^2 u_k}{\partial r_j \partial r_k} =$$

$$= [\mu\triangle\mathbf{u} + (\mu + \lambda)grad(\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{u})]_i$$

így a folytonos közegek általános mozgásegyenlete a következő alakú:

$$\rho\ddot{\mathbf{u}} = \mathbf{f} + \mu\triangle\mathbf{u} + (\mu + \lambda)grad(\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{u})$$

4.3. Hullámterjedés deformálható testekben, Doppler-effektus

4.3.1. Hullámterjedés és hangterjedés gázokban

Vegyünk egy $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ sebesség és egy $p(\mathbf{r}, t)$ nyomásmezőt, valamint egy hely és időfüggő $\rho(\mathbf{r}, t)$ sűrűséget. Írjuk fel a kontinuitási és a Navier-Stokes egyenletet*(ez részletesebben a súrlódó folyadékoknál).*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot \rho\mathbf{v} = 0$$

$$\rho\left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v}\nabla)\mathbf{v}\right) = -\boldsymbol{\nabla}p + \eta\triangle\mathbf{v} + (\eta + \eta')\,grad(\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{v}) + \mathbf{f}$$

Tegyük fel, hogy a csőben a következők érvényesek: $\rho = \rho_0 = const$, $p(\rho_0) = const$, $\mathbf{v} = 0$. Hagyjuk el továbbá az inerciális tagot, mert a sebesség, így a Reynolds-szám is kicsit, valamint tekintsünk el a súrlódástól is, hiszen ez gázokban alacsony sebesség mellett elhanyagolható. Zavarjuk meg egy kicsit a rendszert:

$$\rho = \rho_0 + \delta\rho \Rightarrow p(\rho_0 + \delta\rho) = p(\rho_0) + \left.\frac{\partial p}{\partial \rho}\right|_{\rho_0}\delta\rho$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{0} + \mathbf{v}$$

A N-S-ból a következő marad:

$$\rho_0\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -\frac{dp}{d\rho}\boldsymbol{\nabla}\delta\rho = -c^2\boldsymbol{\nabla}\delta\rho$$

Itt felhasználtuk, hogy $\frac{dp}{d\rho} = c^2$*(ez is lesz később).* A kontinuitásiból pedig:

$$\frac{\partial \delta\rho}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot ((\rho_0 + \delta\rho)\mathbf{v}) = \frac{\partial \delta\rho}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot (\rho_0\mathbf{v}) = 0$$

Itt a divergenciában elhagyjuk a $\delta\rho\mathbf{v}$ tagot, mivel az nagyon kicsi. Vegyük a kontinuitási egyenlet maradékának idő szerinti deriváltját, és a N-S maradékának a divergenciáját:

$$\frac{\partial^2 \delta\rho}{\partial t^2} + \rho_0\boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t}\right) = 0$$

$$\rho_0 \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} \right) = -c^2 \boldsymbol{\nabla} \cdot (\boldsymbol{\nabla} \delta\rho)$$

Helyettesítsük be az elsőt a másodikba és a következőt kapjuk:

$$\frac{\partial^2 \delta\rho}{\partial t^2} - c^2 \triangle \delta\rho = 0$$

Ezt az egyenletet hullámegyenletnek nevezik. Ennek a megoldásainak

$$\delta\rho = f(x \pm ct)$$

alakúnak kell lenni. Ilyen például a

$$\delta\rho = \delta\rho_0 \sin(\omega t + \mathbf{kr})$$

függvény. Ezt visszahelyettesítve az egyenletbe a következő kifejezést kapjuk:

$$c^2 = \frac{\omega^2}{|\mathbf{k}|}$$

Ezt diszperziós relációnak nevezik. A megoldás milyensége függ a határfeltételektől is. Ha kikötjük, hogy egy l hosszú csőben

$$\delta\rho(t, 0) = 0$$
$$\delta\rho(t, l) = 0$$

teljesül, akkor ezeket visszahelyettesítve azt kapjuk, hogy

$$kl = n\pi \Rightarrow k = \frac{n\pi}{l}$$

Tehát nem tud minden fajta hullám gerjesztődni a csőben, csak aminek a hullámszáma a cső hosszának egész számú többszöröse. A csőben tehát periodikus sűrűségfluktuációk kezdenek el terjedni, amik végső soron a nyomás megváltozásához vezetnek. Ez tulajdonképpen a hang.
A hangterjedés leírásához vegyük az adiabatikus esetet:

$$pV^\kappa = const \Rightarrow p\rho^{-\kappa} = const$$

Legyen

$$p = A\rho^\kappa \Rightarrow \frac{dp}{d\rho} = \kappa A \rho^{\kappa - 1} = \kappa \frac{p}{\rho} = \kappa \frac{R}{M} T = c^2$$

Megkaptuk tehát a terjedő hullám sebességét. Izoterm esetben nem jelenik meg a κ, tehát $c^2 = \frac{R}{M}T$. Egyatomos gázra ez egy $\frac{5}{3}$-os szorzófaktorbeli különbséget jelent.
A sebességmező meghatározásához vegyük a N-S egyenlet maradékát és képezzük a rotációját, valamint a kontinuitási egyenlet maradékának a gradiensét:

$$\rho_0 \boldsymbol{\nabla} \times \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} \right) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t} grad(\delta\rho) + \rho_0 grad(div\mathbf{v}) = 0$$

Vegyük még a N-S maradékának az idő szerinti deriváltját is:

$$\rho_0 \frac{\partial^2 \mathbf{v}}{\partial t^2} = -c^2 \frac{\partial}{\partial t} grad(\delta\rho)$$

Ezt behelyettesítve az előzőbe azt kapjuk, hogy

$$c^2 grad(div\mathbf{v}) = \frac{\partial^2 \mathbf{v}}{\partial t^2}$$

A rotációs egyenlet teljesüléséből következik, hogy a $\mathbf{v}$-nek létezik divergenciája, így semmi nem gátol minket meg abban, hogy képezzük az előző egyenlet divergenciáját:

$$c^2 div\,(grad(div\mathbf{v})) = \frac{\partial^2}{\partial t^2} div\mathbf{v}$$

A bal oldalt átzárójelezve:

$$c^2 \triangle\,(div\mathbf{v}) = \frac{\partial^2}{\partial t^2} div\mathbf{v}$$

Ez szintén egy hullámegyenlet, de most $div\mathbf{v}$-re. Belátható, hogy ennek a megoldása

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_0 \sin(\omega t + \mathbf{kr})$$

Ugyanakkor képezzük ennek a rotációját:

$$\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{v} = (\mathbf{v_0} \times \mathbf{k}) \cos(\omega t + \mathbf{kr}) = 0$$

Ez csak akkor teljesül, ha $\mathbf{v}_0$ párhuzamos $\mathbf{k}$-val. Azaz a sebesség mindig párhuzamos a terjedés irányával. Ezt nevezik longitudinális hullámnak.

4.3.2. Hullámterjedés szilárd testekben

Ez a rész nem sokban tér el az előzőektől. Az alap gondolat ugyan az, a kiindulási egyenletek mások. Írjuk fel az előzőleg levezetett általános mozgásegyenletet a külső erők nélkül:

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = \mu \triangle \mathbf{u} + (\mu + \lambda) grad(\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{u})$$

Vegyük ennek a rotációját, mert miért ne:

$$\rho \frac{\partial^2}{\partial t^2} \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{u} = \mu \triangle (\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{u})$$

Ahogy az előzőekben láttuk ez egy hullámegyenlet $\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{u}$-ra, itt a terjedési sebesség

$$c^2 = \frac{\mu}{\rho}$$

Ha az eredeti egyenlet divergenciáját vesszük, akkor a következőt kapjuk:

$$\rho \frac{\partial^2}{\partial t^2} \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{u} = \mu \triangle (\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{u}) + (\lambda + \mu) \boldsymbol{\nabla} (\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{u})$$

Az utolsó tagban az operátorok átrendezhetők, így

$$\rho \frac{\partial^2}{\partial t^2} \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{u} = \mu \triangle (\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{u}) + (\lambda + \mu) \boldsymbol{\nabla} \cdot (\boldsymbol{\nabla} (\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{u})) = \mu \triangle (\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{u}) + (\lambda + \mu) \triangle (\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{u})$$

azaz

$$\rho \frac{\partial^2}{\partial t^2} \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{u} = (\lambda + 2\mu) \triangle (\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{u})$$

Ez pedig egy hullámegyenlet $\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{u}$-ra, a terjedési sebesség pedig

$$c^2 = \frac{\lambda + 2\mu}{\rho}$$

Keressük a megoldást a következő alakban:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_{div} + \mathbf{u}_{rot}$$

Itt az egyes tagok sajátossága, hogy

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{u}_{rot} = 0 \Rightarrow \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{u} = \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{u}_{div} = \mathbf{u}'_{div}$$

$$\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{u}_{div} = 0 \Rightarrow \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{u} = \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{u}_{rot} = \mathbf{u}'_{rot}$$

A longitudinális egyenletben hasonlóan az előzőhöz csak divergenciás tagok maradnak és azért longitudinális mert a megoldás rotációmentes.

$$\frac{\partial^2 \mathbf{u}'_{div}}{\partial t^2} - \frac{2\mu + \lambda}{\rho} \triangle \mathbf{u}'_{div} = 0$$

A megoldást keressük $\mathbf{u}'_{div} = \mathbf{u}'_{0,div} e^{i(\mathbf{kr} - \omega t)}$ alakban. Behelyettesítve a diszperziós reláció és a terjedési sebesség adódik:

$$\omega^2 = \frac{2\mu + \lambda}{\rho} k^2 = c^2 k^2$$

A transzverzális egyenletben a divergenciás tag nulla, tehát ebben az esetben a sebességmező mindig merőleges a terjedési irányra.

$$\frac{\partial^2 \mathbf{u}'_{rot}}{\partial t^2} - \frac{\mu}{\rho} \triangle \mathbf{u}'_{rot} = 0$$

A megoldást keressük $\mathbf{u}'_{rot} = \mathbf{u}'_{0,rot} e^{i(\mathbf{kr} - \omega t)}$ alakban. Behelyettesítve a diszperziós reláció és a terjedési sebesség adódik: A diszperziós reláció és a terjedési sebesség:

$$\omega^2 = \frac{\mu}{\rho} k^2 = c^2 k^2$$

4.4. Folyadékok tulajdonságai, hidrosztatika

Mindennapos tapasztalat az, hogy a folyadékok könnyen önthetők, és mindig felveszik az edény alakját, valamint térfogattartók is. Ezen tulajdonságok értelmezhetők, ha a folyadékrészeket egymáson gördülő golyókként fogjuk fel, amik között nem hat nyíróerő, csak egymásra merőleges irányú erő. Ha a folyadékrészek egymáshoz viszonyított elmozdulásakor nem hat súrlódási erő, akkor azt ideális folyadéknak nevezzük.
Kísérlet: Képzeljünk el egy vékony csövet, aminek a tetejét lefedi egy A_1 felületű mozgatható dugattyú, valamint egy vastag csövet, amit egy A_2 felületű dugattyú fed le. A két cső össze van kapcsolva és közöttük folyadék van*(hidraulikus emelő)*. Hasson a vékony dugattyúra F_1 erő. Ezt a másik dugattyún egy F_2 erővel egyensúlyozhatjuk ki. Ennek azonban $\frac{A_2}{A_1}$-szer nagyobbnak kell lennie F_1-nél, a dugattyúk felületének eltérése miatt. Így egyensúlyban a következő igaz:

$$\frac{F_1}{A_1} = \frac{F_2}{A_2}$$

Kísérlet: Erősítsük egy sztetoszkóp hártyás végét egy nyomásmérőre. A sztetoszkópvéget a folyadékban forgatva azt tapasztaljuk, hogy minden irányból ugyan akkora nyomást mérünk. Azaz az álló folyadékban a nyomásmező konstans, valamint:

$$\hat{\sigma} = -p\hat{I}$$

Ezt Pascal-törvénynek nevezik. Képezzük a kifejezés divergenciáját, így megkapunk egy erő jellegű mennyiséget:

$$\mathbf{f} = \boldsymbol{\nabla} \cdot \hat{\sigma} = -\boldsymbol{\nabla} p$$

Átrendezve:

$$\boldsymbol{\nabla} p + \mathbf{f} = 0$$

Tegyük a rendszert gravitációs erőtérbe, azaz legyen $\mathbf{f} = \rho \mathbf{g} = -\boldsymbol{\nabla}\varphi$ ahol ρ egy állandó. Így:

$$\boldsymbol{\nabla}\left(p + \rho\varphi\right) = 0 \Rightarrow p + \rho\varphi = const$$

Homogén gravitációs erőtérben ez

$$p + \rho g h = p_0$$

Ezt átrendezve $p = p_0 - \rho g h$ lenne, de mivel a nyomás lefelé nő, ezért

$$p = p_0 + \rho g h$$

lesz a kifejezés. Ez azt fejezi ki, hogy adott, ρ sűrűségű folyadékban, homogén gravitációs erőtérben p_0 külső nyomás hatására h mélységben mekkora a nyomás.
Már az ókori görögök is*(:D:D:D)* felfedezték, hogy ha folyadékba merítenek egy testet, akkor azt sok esetben lefele kell nyomni ahhoz, hogy ne emelkedjen fel, illetve ha a test lesüllyedne, akkor azt folyadékban kisebb erővel kell tartanunk, mint amúgy.
Írjuk fel, egy h mélységben levő, l magasságú, A alsó-felső felületű téglatestre ható úgynevezett felhajtóerőt. Ez abból jön, hogy a test alja lejjebb van mint a teteje, ahol kisebb nyomás, az azonos méretű felület miatt pedig kisebb erő hat rá. Emiatt elég csak a függőleges irányú erőt felírni:

$$F_f = \rho_v g(h + l)A - \rho_v g h A = \rho_v g l A = \rho_v g V$$

Itt V a test térfogata. Számoljuk ki a nyomás függését a magasságtól. Tudjuk, hogy

$$\boldsymbol{\nabla}\left(p + \rho\varphi\right) = 0$$

valamint

$$pV = \frac{m}{M}RT \Rightarrow \frac{p}{\rho} = \frac{R}{M}T \Rightarrow p(\rho) = \frac{R}{M}T\rho$$

Ezt visszahelyettesítve az előzőbe egy differenciálegyenletet kapunk a sűrűségre:

$$\boldsymbol{\nabla}\left(\frac{R}{M}T\rho(\mathbf{r})\right) - \rho\mathbf{g} = 0$$

Ez a következő alakú, ha a gravitációs erőtér homogén:

$$\frac{R}{M}T\frac{d\rho}{dz} = -g\rho(z)$$

Ennek a megoldását ismerjük:

$$\rho(z) = \rho_0 e^{-\frac{gM}{RT}z}$$

Hasonlóan adódik a nyomás is:

$$\rho = \frac{p}{\frac{R}{M}T}$$

$$-dpz + \rho g = 0 \Rightarrow \frac{dp}{dz} = -\frac{g}{\frac{R}{M}T}p$$

$$p = p_0 e^{-\frac{gz}{\frac{R}{M}T}}$$

Számoljuk ki, hogy milyen lesz a hengeres pohárban szimmetriatengely körül forgó folyadék felszíne. Jelen esetben a homogén gravitációs erő mellé még bejön a centrifugális erő is, azaz:

$$\mathbf{f} = \rho\mathbf{g} + \rho\omega^2\mathbf{s}$$

Itt a szimmetria miatt elegendő csak egy síkot vizsgálni, $\mathbf{s}$ pedig az $(x, y, 0)$ vektor, ez előáll az $\mathbf{s} = \boldsymbol{\nabla}\left(\frac{x^2}{2} + \frac{y^2}{2}\right)$ gradiensként. Így a külső erőket potenciálokkal felírva:

$$\mathbf{f} = -\boldsymbol{\nabla}\rho gz + \boldsymbol{\nabla}\rho\frac{\omega^2}{2}(x^2 + y^2)$$

$$\boldsymbol{\nabla}p + \boldsymbol{\nabla}\rho gz - \boldsymbol{\nabla}\rho\frac{\omega^2}{2}(x^2 + y^2) = 0$$

Ebből azt kapjuk, hogy:

$$p + \rho gz - \rho\frac{\omega^2}{2}(x^2 + y^2) = p_0$$

Mivel a felszín érdekel minket, ezért felhasználhatjuk azt, hogy ott $p = p_0$, így

$$gz = \frac{\omega^2}{2}(x^2 + y^2) \Rightarrow z = \frac{\omega^2}{2g}(x^2 + y^2) = \frac{\omega^2}{2g}r^2$$

Tehát a folyadék felszíne egy parabola lesz.

4.4.1. Felületi feszültség, kapilláris emelkedés

A tapasztalat szerint a borotvapenge úszik a víz felszínén ha jól tesszük rá. Az úszó fémtestek alatt és környékén a vízfelszín rugalmas hártyaként behorpad. Ez azzal magyarázható, hogy a folyadék belsejében a folyadékszemcsék gömbszimmetrikusan hatnak egymásra, míg a felszínen ez már nem teljesül, a szomszédos oldalon a molekulák eloszlása nem egyenletes, emiatt a részecskék között ható erő is más.
Kísérlet: Mozgatható oldalú drótkeretet szappanos vízbe mártunk, így a keret mindkét oldalán kialakul egy hártya. Azt tapaszaljuk, hogy ha a keret egy oldalát elkezdjük mozgatni, nő vele a hártya is, és az egyensúlyban tartáshoz szükséges erő arányos az l hosszúsággal. A drótkeret l hosszú darabjára ható erő tehát:

$$F = \alpha 2l$$

A kettes szorzó a két hártya miatt jelenik meg. Az α felületi feszültségnek nevezett együttható dimenziója $\frac{N}{m}$. Meglepő, hogy a jobban kihúzott hártya ugyan akkora erővel húzza a drótot mint a kisebb területű. Az erőnek a hártya területétől való függetlenségéből arra következtetünk, hogy nyújtáskor illetve összehúzódáskor a hártya szerkezete nem változik meg. Ez egy két réteg által határolt folyadékhasáb. Ha növeljük a két hártyát, akkor a köztes rétegből részecskék lépnek a felszínibe, visszaengedéskor pedig fordítva. Ha a hártyát annyira megnyújtjuk, hogy már nincs részecske ami a határfelületbe lépjen, a hártya elszakad. Energetikailag a következő történik:

$$\Delta W = F\Delta x = \alpha 2l\Delta x = \alpha\Delta A \Rightarrow \frac{\Delta W}{\Delta A} = \frac{\Delta E_{pot}}{\Delta A}$$

Tehát a felületi feszültség számértéke egyenlő a határfelület egységnyi területtel történő megnöveléséhez szükséges munkával. Pontosan ennyivel növekszik a felület potenciális energiája.
Szappanhártyás-drótkeretes cuccok a Bérces II.-ben. Sok kép és szöveg, ide nem érdemes leírni.
Az üvegcsővel fújt szappanbuborék összehúzódik. Kell tehát lennie valamilyen görbületi nyomásnak, ami összepréseli ezt a gömb alakú felületet.

$$\Delta W = p_g A\Delta R$$

munka szükséges ahhoz, hogy a gömb sugarát ΔR-el megnöveljük. Ez a munka a potenciális energiát növeli, aminek növekedése egyenesen arányos a felületnövekedéssel. Tehát:

$$p_g 4R^2\pi\Delta R = 2\alpha 4\left[(R + \Delta R)^2 - R^2\right]\pi$$

A második tagban elvégezve a négyzetre emelést és elhagyva a másodrendű tagokat, a görbületi nyomásra azt kapjuk, hogy

$$p_g = \frac{4\alpha}{R}$$

Egy felszínű hártya esetén

$$p_g = \frac{2\alpha}{R}$$

Tetszőleges felület görbületi nyomásának leírásához képzeljük el a felület két, R_1 és R_2 görbületi sugarakkal és Δa és Δb vonaldarabokkal határolt elemi folyadékhártyát. Az R_1 és R_2 által meghatározott síkmetszeek merőlegesek egymásra és a felületre is. Hassunk az R_1 "irányú" oldalakon F_1 az R_2 "irányúakon" pedig F_2 erővel. Legyen az R_1 görbületi sugár által meghatározott "cikk" középponti szöge β a másiké pedig γ. Ekkor

$$F_1 = 2\sin\frac{\beta}{2} \approx \frac{\beta}{2}2 = \beta$$

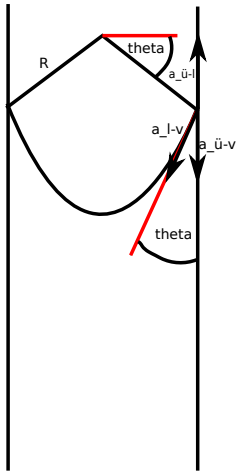
$$F_2 = 2\sin\frac{\gamma}{2} \approx \frac{\gamma}{2}2 = \gamma$$

Valamint a szögek kifejezhetők az ívhosszakkal: $\beta = \frac{\Delta b}{R_1}$ $\gamma = \frac{\Delta A}{R_2}$ Ezekből az eredő erő:

$$F_e = \alpha\Delta a\frac{\Delta B}{R_1} + \alpha\frac{\Delta b}{R_2} = \alpha\Delta a\Delta b\left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}\right)$$

Így a görbületi nyomás:

$$p_g = \alpha\left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}\right)$$



4.2. ábra: Kapilláris jelenség

A kapilláris emelkedést magyarázhatjuk a potenciális energia minimum elv alapján is. Az emelkedéskor a folyadék felemelkedése miatt a felületi energia és a helyzeti energia váltoizk, a felületi energia csökken, hiszen a levegő-üveg határfelület egy része helyett folyadék-üveg határfelület keletkezik. Az ábra alapján belátható, hogy:

$$\alpha_{l-v}\cos\vartheta + \alpha_{u-v} = \alpha_{u-l}$$

Így a felületi energia a következő módon írható:

$$\Delta E_f = 2r\pi h(\alpha_{u-l} - \alpha_{u-v}) = 2r\pi h\alpha_{l-v}\cos\vartheta$$

A helyzeti energia növekedése:

$$\Delta E_h = r^2\pi h\rho g\frac{h}{2}$$

Az egyensúlyi helyzetet a kifejezés minimuma szabja meg. Deriválva a két kifejezés összegét a magasság szerint a következőt kapjuk:

$$2r\pi\alpha_{l-v}\cos\vartheta + r^2\pi\rho gh = 0 \Rightarrow h = \frac{2\cos\vartheta\alpha_{l-v}}{\rho gr}$$

Az

$$\alpha_{l-v}\cos\vartheta + \alpha_{u-v} = \alpha_{u-l}$$

kifejezés alapján kategorizálhatunk úgynevezett nedvesítő és nem nedvesítő folyadékokat. Ugyanis ennek az egyenletnek nem mindig van ϑ-re megoldása. Az ilyen folyadékokat nem nedvesítő folyadékoknak nevezzük, mivel ezek nem terülnek szét a felületen, hanem egy egy "kemény" cseppet alkotnak.

4.5. Áramlások jellemzése

A folyadékok és gázok áramlásának leírásakor az anyagot a szilárd testekhez hasonlóan folytonosnak tekintjük. A mozgás során azonban az egyes részecskék nem maradnak közel egymáshoz ahogy azt a merev testeknél tették, hanem eltávolodhatnak egymástól. Így a leírást nagy mértékben befolyásolhatja az is, hogy a vizsgált folyadék vagy gáztömeget eredetileg hogyan osztottuk részekre.

Az áramlás leírására Euler nem az egyes pontok mozgását vizsgálta, hanem az áramlási teret jellemezte úgy, hogy a geometriai tér egyes pontjaiban megadta a sebességet, sűrűséget, nyomást mint az idő függvényét attól

függetlenül, hogy a tér adott pontjában éppen melyik részecske áramlik át.
Az áramlásokat csoportosíthatjuk aszerint, hogy súrlódó, vagy súrlódásmentesek-e attól függően, hogy elhanyagolható-e bennük a folyadékrészek relatív mozgása során ébredő nyíróerő. A súrlódásmentes áramláson belül megkülönböztetünk még örvényest és örvénymentest. Örvényes áramlás esetében a folyadékrészek forgómozgást is végeznek, míg örvénymentesnél nem. Súrlódó folyadékok esetén az áramlás lehet lamináris, vagy turbulens. Ezektől függetlenül pedig az áramlások lehetnek stacionáriusak vagy időfüggőek.
Tekintsünk egy zárt felület által határolt térfogatot, ami áramlik valamilyen sebességgel. Ekkor a térfogatban levő tömeg megváltozása adott idő alatt:

$$\Delta m = \oint \rho \mathbf{v} d\mathbf{F} \Delta t$$

Tudjuk azt is, hogy

$$m = \int \rho dV \Rightarrow \frac{d}{dt} \int \rho dV = -\oint \mathbf{v} \rho d\mathbf{F}$$

Ez nem más mint a kontinuitási egyenlet

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot \rho \mathbf{v} = 0$$

Összenyomhatatlan folyadék esetén a sűrűség időben állandó, tehát

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{v} = 0$$

Definiáljuk az áramvonal fogalmát. Ez egy olyan görbe, melynek minden pontjában érintő irányú a sebesség. Az előbbiek alapján teljesül az, hogy

$$\int \boldsymbol{\nabla} \cdot \rho \mathbf{v} dV = \oint \rho \mathbf{v} d\mathbf{F} = 0$$

Vegyük egy áramlási cső A_1 és A_2 keresztmetszetét. Mivel a fenti mindenhol teljesül, ezért

$$v_1 A_1 = v_2 A_2$$

4.6. Bernoulli-egyenlet, tökéletes folyadék áramlása

4.6.1. Összenyomhatatlan közeg

Mi lehet a kapcsolat az adott helyen mérhető nyomás és sebesség között? Nézzünk egy áramlási csövet. Vegyük egy áramlási cső két keresztmetszetét, amik nem feltétlenül vannak azonos magasságban. Az áramlás során a nehézségi erő által végzett munka:

$$W_1 = A_1 v_1 \Delta t \rho g (h_1 - h_2)$$

a nyomóerőé pedig

$$W_2 = p_1 A_1 v_1 \Delta t - p_2 A_2 v_2 \Delta t$$

Figyelembe véve a kontinuitási egyenletből következőt azaz, hogy $V = A_1 v_1 \Delta t = A_2 v_2 \Delta t$, valamint felírva a munkatételt:

$$\frac{1}{2} V \rho v_2^2 - \frac{1}{2} V \rho v_1^2 = V \rho g (h_1 - h_2) + V (p_1 - p_2)$$

Ezt átrendezve:

$$p_1 + \rho g h_1 + \frac{1}{2} \rho v_1^2 = p_2 + \rho g h_2 + \frac{1}{2} \rho v_2^2$$

azaz bármely áramvonal mentén:

$$p + \rho g h + \frac{1}{2} \rho v^2 = const$$

Ezt Bernoulli-törvénynek nevezik.

4.6.2. Összenyomható közeg

Adott keresztmetszeteken*(nem feltétlenül vannak egy magasságban)* adott idő alatt átáramló folyadék tömegére teljesül, hogy

$$\Delta m = A_1 v_1 \Delta t \rho_1 = A_2 v_2 \Delta t \rho_2 \Rightarrow A v \rho = const$$

Itt a sűrűségek nem azonosak, ebben mutatkozik meg az összenyomhatóság. Kis Δt idő alatt az első keresztmetszeten mozgási energia áramlik be, a másikon pedig ki. Felírva a munkatételt, valamint hozzávéve a hőközlést és a belső energiát:

$$\frac{1}{2} \Delta m v_2^2 - \frac{1}{2} \Delta m v_1^2 = p_1 A_1 v_1 \Delta t - p_2 A_2 v_2 \Delta t - \Delta m \phi_2 + \Delta m \phi_1 + \Delta(\delta Q - \delta U_b)$$

Ezt elosztva Δm-el:

$$\frac{1}{2}v_2^2 - \frac{1}{2}v_1^2 = \frac{p_1 A_1 v_1 \Delta t}{\Delta m} - \frac{p_2 A_2 v_2 \Delta t}{\Delta m} - \phi_2 + \phi_1 + \frac{\Delta(\delta Q - \delta U_b)}{\Delta m} = \frac{p_1}{\rho_1} - \frac{p_2}{\rho_2} - \phi_2 + \phi_1 + \frac{\Delta(\delta Q - \delta U_b)}{\Delta m}$$

Tekintsünk adiabatikus változást, tehát $\delta Q = 0$. Termodinamikából ismert, hogy $pV^\gamma = const$, ahol $\gamma = \frac{c_p}{c_v}$, valamint $\frac{p}{\rho^\gamma} = const$ és $U_b = mc_v t$, valamint $pV = \frac{m}{M}RT$. Ezekből a következőket tudjuk:

$$\frac{p}{\rho} = \frac{R}{M}T \Rightarrow T = \frac{Mp}{R\rho}$$

Viszont

$$\frac{R}{M} = c_p - c_v$$

, így

$$\frac{U_b}{m} = c_v T = c_v \frac{Mp}{R\rho} = \frac{c_v}{c_p - c_v}\frac{p}{\rho} = \frac{\gamma}{\gamma - 1}\frac{p}{\rho}$$

Ebből végső soron a következőt kapjuk:

$$\frac{1}{2}v_2^2 - \frac{1}{2}v_1^2 = \frac{p_1}{\rho_1} - \frac{p_2}{\rho_2} - \phi_2 + \phi_1 - \frac{\gamma}{\gamma - 1}\frac{p_2}{\rho_2} + \frac{\gamma}{\gamma - 1}\frac{p_1}{\rho_1}$$

Vagyis

$$\frac{1}{2}v^2 + \frac{\gamma}{\gamma - 1}\frac{p}{\rho} + \phi = const$$

Nézzük meg, hogy mi történik hangsebesség feletti áramlás esetén. Ehhez képezzük a következő mennyiséget:

$$d(v\rho A) = (dv)\rho A + v(d\rho)A + v\rho(dA)$$

osszuk le $\rho v A$-val:

$$\frac{dv}{v} + \frac{d\rho}{\rho} + \frac{dA}{A} = 0$$

Mérésekből tudjuk, hogy

$$\frac{dp}{d\rho} = c^2 = \gamma\frac{p}{\rho}$$

Képezzük az itt kapott Bernoulli törvény differenciálját a potenciál nélkül:

$$d\left(\frac{1}{2}v^2 + \frac{\gamma}{\gamma - 1}\frac{p}{\rho}\right) = 0$$

$$(dv)v + \frac{\gamma}{\gamma - 1}\frac{dp}{\rho} - \frac{\gamma}{\gamma - 1}\frac{d\rho}{\rho^2}p = 0$$

használjuk fel, hogy $c^2 d\rho = dp$, valamint, hogy $\frac{p}{\rho} = \frac{c^2}{\gamma}$

$$(dv)v + \frac{\gamma}{\gamma - 1}c^2\frac{d\rho}{\rho} - \frac{1}{\gamma - 1}\frac{d\rho}{\rho} = 0$$

$$(dv)v + c^2\frac{d\rho}{\rho} = 0$$

Ide behelyettesítve azt, hogy $\frac{d\rho}{\rho} = -\left(\frac{dv}{v} + \frac{dA}{A}\right)$ a következőt kapjuk:

$$(dv)v - c^2\left(\frac{dv}{v} + \frac{dA}{A}\right) = 0$$

Átrendezve:

$$dv\left(v - \frac{c^2}{v}\right) = c^2\frac{dA}{A}$$

$$\frac{dv}{v}\left(\frac{v^2 - c^2}{c^2}\right) = -\frac{dv}{v}\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right) = \frac{dA}{A}$$

Látható tehát, hogy ha $v < c$, akkor a bal oldal negatív, így a sebesség növeléséhez a keresztmetszetet csökkenteni kell, viszont ha $v > c$ akkor növelni.

4.7. Navier-Stokes és Euler egyenletek, örvények, turbulencia

Newton kísérleteiből látszik, hogy a mozgáshoz, illetve annak fenntartásához erő kell. Hogy ezt leírhassuk, tovább kell alakítani az ideális folyadékok mozgásegyenletét egy nyírófeszültség szerű tag behozásával, ami a folyadékban való súrlódásnak feleltethető meg. Kísérletekből az is megállapítható, hogy,

$$F \propto v \Rightarrow F = \eta \frac{Av}{l}$$

itt l a test edény aljától mért távolsága, η pedig egy anyagi paraméter, amit viszkozitásnak neveznek. Az eddig használt jelöléseket bevezetve, végtelenül kis távolságokra "áttérvre":

$$\frac{F}{A} = \tau = \frac{dv}{dz}\eta$$

Láthatjuk tehát, hogy itt a feszültségtenzor már nem csak a deformációtenzor függvénye, hanem függ annak a deriváltjától is. Vegyük ezért fel a feszültségtenzort a következő alakban:

$$\hat{\sigma}(\hat{\varepsilon}, \dot{\hat{\varepsilon}}) = -p\hat{I} + \hat{\sigma}'(\dot{\hat{\varepsilon}})$$

Itt tehát az első tag, így a diagonális elemek tisztán az adott irányú nyomást tartalmazza, a második tag pedig a tisztán deformációtenzor deriváltjától függő, fent említett nyírófeszültségeket tartalmazó tag. Ezt írjuk fel a rugalmasságtannál látottal analóg módon:

$$\sigma'_{ij} = A_{ijkl}\dot{\varepsilon}_{kl}$$

Itt az $\hat{A}$ tenzor hasonló az általános Hooke-törvénynél látott $\hat{C}$-hez. Szintén a rugalmasságtannál látott analógiára írjuk fel a következő két összefüggést:

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial v_i}{\partial r_j} + \frac{\partial v_j}{\partial r_i}\right)$$

$$\sigma'_{ij} = 2\eta\dot{\varepsilon}_{ij} + \eta'\dot{\varepsilon}_{kk}\delta_{ij}$$

Vegyük észre, hogy a második tag az tulajdonképpen a sebességmező divergenciáját tartalmazza:

$$\dot{\varepsilon}_{kk} = \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{v}$$

A kontinuitási egyenlet alapján azonban belátható, hogy ha a folyadék összenyomhatatlan, akkor ez a tag nulla, vagyis ebben az esetben, a fenti négy indexes tenzor helyett csak a viszkozitás jelenik meg:

$$\sigma'_{ij} = 2\eta\dot{\varepsilon}_{ij}$$

Írjuk fel a rugalmas kontinuumok mozgásegyenletét:

$$\rho\ddot{\mathbf{u}} = \mathbf{f} + \boldsymbol{\nabla} \cdot \hat{\sigma}$$

Végezzük el a teljes idő szerinti differenciálást a bal oldalon:

$$\rho\frac{d}{dt}\mathbf{v}(\mathbf{r}(t), t) = \rho\left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x}\dot{x} + \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial y}\dot{y} + \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial z}\dot{z}\right) = \rho\left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x}v_x + \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial y}v_y + \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial z}v_z\right)$$

Vegyük észre, hogy az utolsó három tag valójában a sebesség vektor szorozva a sebesség gradienssel. Ezt írjuk a következő módon:

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla)\,\mathbf{v}$$

A mozgásegyenlet tehát a következő alakú:

$$\rho\left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla)\,\mathbf{v}\right) = \mathbf{f} + \boldsymbol{\nabla} \cdot \hat{\sigma}$$

Számítsuk ki a feszültségtenzor divergenciáját:

$$(\boldsymbol{\nabla} \cdot \hat{\sigma})_i = -\partial_j p\delta_{ij} + \partial_j\sigma'_{ij} = -(grad\,(p))_i + (div\,(\hat{\sigma}'))_i$$

Az első tag egyszerűen a nyomásgradiens, a második pedig a tisztán nyírási tagokat tartalmazó feszültségtenzor divergenciája, aminek a komponenseit az előző lépésekben meghatároztuk:

$$\sigma'_{ij} = 2\eta\dot{\varepsilon}_{ij} + \eta'\dot{\varepsilon}_{kk}\delta_{ij} = \eta\left(\frac{\partial v_i}{\partial r_j} + \frac{\partial v_j}{\partial r_i}\right) + \eta'\frac{\partial v_k}{\partial r_k}\delta_{ij}$$

Ezekből tehát

$$(div\hat{\sigma}')_i = \partial_j \sigma'_{ij} = \eta \left(\frac{\partial^2 v_i}{\partial r_j \partial r_j} + \frac{\partial^2 v_j}{\partial r_j \partial r_i} \right) + \eta' \frac{\partial^2 v_k}{\partial r_j \partial r_k} \delta_{ij} = \eta \frac{\partial^2 v_i}{\partial r_j^2} + (\eta + \eta') \frac{\partial}{\partial r_i} \left(\frac{\partial v_k}{r_k} \right)$$

Látható, hogy az első tagban a Laplace-operátor jelenik meg, a másodikban pedig a *"graddiv"*. Így tehát vektoriális alakba írva:

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \hat{\sigma}' = \eta \triangle \mathbf{v} + (\eta + \eta') \boldsymbol{\nabla} (\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{v})$$

Egybeírva az összes eddigi eredményt, megkapjuk a híres Navier-Stokes-egyenletet:

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right] = \mathbf{f} - \boldsymbol{\nabla} p + \eta \triangle \mathbf{v} + (\eta + \eta') \boldsymbol{\nabla} (\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{v})$$

Ehhez még társul a kontinuitási egyenlet is:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0$$

Látható tehát, hogy ha a folyadék összenyomhatatlan, akkor $\rho = const \Rightarrow \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{v} = 0$, azaz a Navier-Stokes egyenlet utolsó két tagja nulla. Ez a két tag akkor is kieshet, ha a folyadék súrlódásmentes. A megmaradó egyenletet Euler-egyenletnek nevezik:

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right] = \mathbf{f} + \boldsymbol{\nabla} p$$

Természetesen itt is teljesülnie kell a kontinuitási egyenletnek, mert az utolsó két tag ugye úgy is lehet nulla, ha a súrlódás nincs, de a folyadék összenyomható, és ekkor $\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{v} \neq 0$. Általánosabb esetben pedig a nyomás helyét átveheti az egységnyi térfogatra vonatkoztatott termodinamikai munkavégzés.
Alkalmazásként tekintsük az l hosszú csődarabban történő stacionárius áramlást. Ebben az esetben a N-S egyenlet bal oldala nulla, valamint ha a külső erőket nullának tekintjük, akkor azt kapjuk, hogy

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \hat{\sigma} = 0$$

Ezt integrálva a egy R sugarú henger térfogatára, és felhasználva a Stokes-tételt azt kapjuk, hogy:

$$\oint \hat{\sigma} d\mathbf{A} = 0$$

Az integrált el tudjuk végezni, ha külön a palástra és a fedlapokra vonatkozó integrálokra szedjük szét, valamint a tenzort a korábban alkalmazott két tag, a nyomásból eredő és nyírófeszültségből eredő tagok összegeként írjuk. Rögzítsük a nyomást a cső egyik végén p_1 a másik végén pedig p_2 értékre. Tudjuk, hogy a feszültség

$$\tau = \eta \frac{d\mathbf{v}}{dr}$$

ahol a deriváltat a sugár irányában képezzük. Így a következőt kapjuk:

$$\oint \hat{\sigma} d\mathbf{A} = 2r\pi l\eta \frac{d\mathbf{v}}{dr} - (p_2 - p_1) r^2 \pi = 0$$

Itt látható, hogy a feszültséget a palást területe szorozza, a nyomásos tagot pedig a körlapok területe. Rendezve:

$$\frac{d\mathbf{v}}{dr} = -\frac{p_1 - p_2}{2l\eta} r$$

aminek az általános megoldása:

$$v = -\frac{p_1 - p_2}{4l\eta} r^2 + C$$

A C-t a határfeltételekből kapjuk, ez legyen az, hogy a cső falánál 0 a sebesség, így:

$$v = \frac{p_1 - p_2}{4l\eta} (R^2 - r^2)$$

Számoljuk ki az időegység alatt átfolyó folyadék mennyiségét:

$$\Phi = \int_0^R \rho \frac{p_1 - p_2}{4l\eta} (R^2 - r^2) 2\pi r dr = \frac{\rho\pi}{8l\eta} R^4 (p_1 - p_2)$$

Ezt Hagen-Poiseuille törvénynek nevezik.

4.7.1. Örvények, turbulencia

Egy áramlást örvényesnek nevezünk, ha a folyadék részecskéi esetleges mozgásukon kívül forgómozgást is végeznek. Pl. ha egy vízzel telt hengert gyorsan forgatunk, akkor abban mély, tölcsér szerű örvénytér alakul ki. A folyadék úgy mozog az üvegben mintha merev testként töltené azt ki. Így a merev testekhez hasonlóan, a folyadékrészek mozgását úgy is leírhatjuk, hogy a folyadékrész tömegközéppontját használjuk vezetési pontként és annak a sebességére szuperponálódik rá egy a középpont körüli, ω szögsebességű forgás. Az ilyen örvényteret homogén örvénytérnek nevezzük. Egy egyszeresen összefüggő térben történő áramlást örvénymentesnek nevezünk, ha tetszőleges zárt görbére a következő teljesül:

$$\Gamma = \oint \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \cdot d\mathbf{r} = 0$$

Kísérletek során azt tapasztaljuk, hogy egy meghatározott sebességnél a réteges áramlás kavargó, turbulens áramlásba csap át. Adott sebesség mellett akkor is létrejön turbulens áramlás, ha az áramlási cső méretét adott sebesség mellett növeljük. Osborn Reynolds vizsgálatai alapján a lamináris-turbulens átmenet akkor következik be, ha az úgynevezett

$$R = \frac{\rho v r}{\eta}$$

Reynolds-szám elér egy kritikus értéket. Ez hengeres cső esetén pl. 1160. A csőbe helyezett különböző akadályok ezt az értéket módosíthatják. Dinamikailag azonos áramlási viszonyok geometriailag hasonló testek körül akkor alakulnak ki, ha a két hasonló testre a Reynolds-számok megegyeznek.
Különböző sebességű áramlások határfelülete mentén az áramlás útjába tett akadály mögött örvények keletkeznek, ez figyelhető meg pl. 2 folyóág találkozásánál, hídpillérek közelében, vagy hajók mögött. A határfelületen az eltérő sebesség miatt az eltérő nyíróerők a folyadékot vékony sávban forgásba hozzák, és ezen mint görgőkön siklik tovább a két különböző sebességű folyadék.

5. Fenomenologikus termodinamika(Novák Martin)

A termodinamika a fizika energiaátalakulásokkal foglalkozó tudományterülete. Egy magára hagyott termodinamikai rendszerben az intenzív állapotjelzők eloszlása homogénné válik, vagyis a rendszer egyensúlyi állapotba kerül. Az egyensúlyi állapottal a termosztatika foglalkozik. Minden pontjában ugyanakkora nyomás, hőmérséklet stb. lesz. Termodinamikai elveken (is) alapszik pl.: időjárás-előrejelzés, robbanómotorok, repülőgéphajtóművek, hűtőszekrény, kuktafazék, kémény. A termodinamika a testek tulajdonságait makroszkopikus skálán vizsgálja, tehát nem veszi figyelembe, hogy az anyag atomokból áll, hanem ezeknek egyfajta "átlagával" dolgozik.

5.1. Termodinamikai állapotjelzők, hőtágulás

Állapotjelzőnek nevezünk minden olyan mennyiséget, ami valamilyen szempontból jellemzi a rendszer milyenségét és teljesíti a

$$\oint dz = 0$$

kifejezést. Az állapotjelzők lehetnek extenzív *(térfogat, entrópia, belső energia, stb...)* vagy intenzív *(hőmérséklet, nyomás, stb...)*. Az extenzív állapotjelzők két különböző rendszer összekapcsolásával összeadódnak, az intenzívek pedig kiegyenlítődnek.
Központi fogalom a hőmérséklet. A hőmérséklet mérésére több skála is létezik. Ilyen skálákat úgy tudunk gyártani, hogy választunk két fix pontot és azok között egyenletesen felosztjuk a tartományt. Ezzel több skálát is lehet definiálni. A közéletben használt skála pedig a Celsius-skála. Celsius a víz fagyáspontját választotta 0 pontnak, a víz forráspontját pedig 100 $°C$-nak. Tudományos életben a Kelvin-skála használatos, ennek az alappontja 0 K, amit abszolút nulla foknak neveznek. Ezen a hőmérsékleten minden mozgás, még az atomi mozgások is megállnak. Maga a skálabeosztás azonos a Celsius-skáláéval.
A hőnek hatása van a testek méreteire is, ez egy tapasztalati tény. A jelenséget hőtágulásnak nevezik. Vezessük be az egységnyi hőmérséklet változáshoz tartozó hosszváltozást:

$$\Delta l = l - l_0 = \alpha(T - T_0)l_0 = \alpha l_0 \Delta T$$

Mint kiderül, ez anyagonként más, éppen ezt jelenti az α lineáris hőtágulási együtthatónak nevezett mennyiség. Tovább masszírozva a fenti kifejezést, kifejezhetjük α-t:

$$\alpha = \frac{1}{l_0} \cdot \frac{\Delta l}{\Delta T} = \frac{1}{l_0} \left.\frac{\partial l}{\partial T}\right|_p$$

Az utolsó lépésben kihasználtuk, hogy a hőmérséklet változást végtelen kicsire választjuk úgy, hogy közben a nyomást állandó értéken tartjuk. Megjegyzendő, hogy a fenti képlet csak bizonyos tartományban érvényes, valamint csak vékony szálakra.
Kiterjedtebb test hőtágulására a következőt lehet mondani:

$$V = a_0 b_0 c_0 (1 + \alpha\Delta T)^3 \approx V_0(1 + \alpha\Delta T)^3 \approx V_0(1 + 3\alpha\Delta T)$$

A különböző állapotváltozásokat csoportosítani lehet aszerint, hogy melyik mennyiség állandó a folyamat során. Ha a nyomás állandó, azt izobárnak, ha a térfogat azt izochornak, ha a hőmérséklet azt izotermnek nevezik. A hőcsere nélküli folyamat becsületes neve pedig adiabatikus folyamat. Kísérleteik során Robert Boyle és Edme Mariotte megfigyelték, hogy a pV mennyiség állandó. Ezt Boyle-Mariotte törvénynek nevezik. Joseph Louis Gay-Lussac pedig arra jött rá, hogy $\frac{p}{T}$ mennyiség állandó, Jacques Charles pedig azt, hogy a $\frac{V}{T}$ mennyiség állandó *(**Fun fact:** Sokszor a Charles-törvényt is Gay-Lussac munkájának tartják, mivel ő publikálta, viszont ő ebben a munkájában Charles egy kiadatlan művére hivatkozott, tehát eredetileg Jacques Charles találta ki.)*.
A Boyle-Mariotte, Gay-Lussac és Charles törvényből levezethető az ideális gáz állapotegyenlete:

$$pV = nkT$$

ahol p V T rendre a nyomás, térfogat és hőmérséklet, az n a mólszám, a k pedig egy állandó. A következő fejezetben a gáztörvény egy másik levezetését is megadjuk.

5.2. Nulladik főtétel

A tapasztalat szerint két különböző hőmérséklet érintkezésekor bizonyos idő elteltével a köztük levő hőmérséklet-különbség eltűnik, mindkét testnek azonos lesz a hőmérséklet. Ezt úgy mondjuk, hogy a két test egymással termikus egyensúlyba került. Ennek a tapasztalatnak az általánosítása a termodinamika nulladik főtétele:
Ha két A és B termodinamikai rendszer egyensúlyban van egy harmadik, C rendszerrel, akkor az A és B rendszer egymással is egyensúlyban van.
A nulladik főtételt történetileg megelőzi a másik három, de logikailag ez az "előbbi", innen ered a szokatlan sorszámozás.

5.3. Első főtétel

A termodinamika első főtételét a kísérleti tapasztalatok általánosításával állapították meg, más törvényekből nem vezethető le, úgynevezett természeti alaptörvény. Ez nem más, mint a német fizikus Hermann Helmholtz által 1847-ben felismert termodinamikai energiamegmaradás elve, ami megadja a belső energia, a hőmennyiség és a munka közötti összefüggést.
A tapasztalatok szerint egy termodinamikai rendszer energiáját kétféleképpen lehet megváltoztatni: munkavégzéssel és hőközléssel. Ennek megfelelően a rendszer belső energiájának ΔU megváltozása a vele közölt Q hőmennyiség és a rajta végzett W munka összege:

$$\Delta U = Q + W$$

Az első főtétel kifejezésében $Q > 0$ ha a rendszer hőt vesz fel a környezetéből, $Q < 0$ ha hőt ad le a környezetének, $W > 0$ ha a külső környezet végez munkát a rendszeren, $W < 0$ ha a rendszer végez munkát a környezet ellenében. Differenciális változás esetében az első főtétel így írandó:

$$dU = \delta Q + \delta W$$

Az első főtételben az U belső energia extenzív mennyiség, két független állapothatározó függvénye: $U = U(V, T)$ vagy $U = U(p, T)$ vagy $U = U(p, V)$; ideális gázok esetében azonban csak a hőmérséklettől függ. A belső energia értékét a kezdő és végállapot egyértelműen meghatározza, azaz a belső energia egy állapotfüggvény, matematikailag egy teljes differenciál.

$$dU = \left.\frac{\partial U}{\partial V}\right|_T dV + \left.\frac{\partial U}{\partial T}\right|_V dT$$

Ezzel szemben a Q és a W nem állapot, hanem útfüggvények, mivel értéküket a kezdő és végállapot nem határozza meg, értékük függ attól, hogy milyen úton mennek végbe.
Az első főtételben a δW nem csak térfogati munka lehet*(kvázisztatikus esetben $-p \cdot dV$)*, hanem δW_{egyeb} munka is, mint pl. az elektromos áram munkája. Ekkor az első főtétel kvázisztatikus folyamat esetén:

$$dU = \delta Q - p \cdot dV + \delta W_{egyeb}$$

Ha a rendszer csak térfogati munkát végez, akkor

$$dU = \delta Q - p \cdot dV$$

Állandó térfogaton pedig

$$dU = \delta Q$$

Ebből következik, hogy ha egy periodikusan működő termodinamikai rendszer*($\Delta U = 0$)* a környezetéből nem vesz fel hőt, akkor a gép által végzett munka $W = 0$.
Nincs tehát olyan periodikusan működő gép, úgynevezett elsőfajú perpeetum mobile(örökmozgó), amely hőfelvétel nélkül képes lenne munkát végezni

5.4. Gázmodellek

5.4.1. Ideális gáz kinetikus modellje

A kinetikus modell felállításához a következőket tegyük fel:

- A részecskék kiterjedés nélküli, μ tömegű tömegpontok
- A részecskék között nincs kölcsönhatás
- Minden részecske azonos sebességgel mozog és a fallal tökéletesen rugalmasan, merőlegesen ütközik
- A térfogat és a részecskeszám állandó

Ekkor felírhatjuk a mechanikai ismeretek alapján, hogy

$$p = \frac{F}{A}$$

, valamint

$$F = \frac{dI}{dt} \Rightarrow p = \frac{1}{A}\frac{dI}{dt}$$

Itt p a nyomás és a jelölés egyértelműsége kedvéért az impulzust itt I-vel jelöljük. Tökéletesen rugalmas és merőleges ütközés esetén egy részecske ütközésenként $2\mu v$ impulzust ad át az edény falának, valamint tudjuk, hogy dt idő alatt annyi részecske ütközik a falnak, amennyi $v \cdot dt$ távolságban van, azaz a $dV = Av \cdot dt$ térfogat része. Ezek alapján az egy falnak átadott impulzusra a következő adódik:

$$dI = \frac{dV}{V} N 2\mu v \frac{1}{6}$$

Ebből következően p:

$$p = \frac{\frac{Av \cdot dt}{V} \frac{N}{6} 2\mu v}{A \cdot dt} = \frac{v^2 N \mu}{3V} \Rightarrow pV = \frac{N\mu v^2}{3}$$

Legyen egy részecske mozgási energiája $\varepsilon_{kin} = \frac{1}{2}\mu v^2$. Ekkor

$$pV = \frac{2}{3}\varepsilon_{kin} N$$

Az ekvipartíció-tételből tudjuk, hogy $\varepsilon_{kin} = \frac{f}{2} k_B T$. Ezt felhasználva egy $f = 3$ szabadsági fokú rendszerre:

$$pV = N k_B T = nRT$$

Itt bevezettük az R egyetemes gázállandót az $R = k_B \cdot N_A$ definícióval. A k_B pedig természetesen a Boltzmann-állandó.
Vezessük be még a belső energiának nevezett mennyiséget: $U = \frac{3}{2} N_A k_B T$, valamint

$$dU(T,V) = \delta Q + \delta W = \left.\frac{\partial U}{\partial T}\right|_V dT + \left.\frac{\partial U}{\partial V}\right|_T dV$$

Itt δQ és δW rendre a rendszerrel közölt infinitezimálisan kicsi hő, illetve a rendszeren végzett infinitezimálisan kicsi munka. Ha a folyamat kvázisztatikus, akkor $\delta W = -pdV$, így

$$\delta Q = dU + pdV = \left.\frac{\partial U}{\partial T}\right|_V dT + \left.\frac{\partial U}{\partial V}\right|_T dV + pdV$$

Definiáljuk a rendszer hőkapacitását a következő módon:

$$C = \frac{\delta Q}{dT}$$

Tekintsünk egy izochor állapotváltozást, azaz $dV = 0$, így:

$$C_v = \frac{\delta Q_v}{dT} = \left.\frac{\partial U}{\partial T}\right|_V dT \cdot \frac{1}{dT} = \left.\frac{\partial}{\partial T}\right|_V \left(\frac{f}{2} nRT\right) = \frac{f}{2} nR$$

Előlegezzük meg az entalpia definícióját*(bővebb tárgyalás a potenciálok között)*:

$$H(T,p) = U + pV$$

Ebből:

$$dH = dU + dp \cdot V + p \cdot dV \Rightarrow \delta Q = dH - dp \cdot V = \left.\frac{\partial H}{\partial p}\right|_T dp + \left.\frac{\partial H}{\partial T}\right|_p dT - V \cdot dp$$

Izobár állapotváltozás*($dp = 0$)* esetén a hőkapacitás:

$$C_p = \frac{\delta Q_p}{dT} = \left(\left.\frac{\partial H}{\partial p}\right|_T dp + \left.\frac{\partial H}{\partial T}\right|_p dT - V \cdot dp\right) \frac{1}{dT} = \left.\frac{\partial H}{\partial T}\right|_p = \left.\frac{\partial}{\partial T}\right|_p \left(\frac{f}{2} nRT + pV\right) = \left(\frac{f}{2} + 1\right) nR$$

Bevezethetjük a moláris hőkapacitást*(mólhő)* ha a hőkapacitást elosztjuk a mólok számával és a fajlagos hőkapacitást*(fajhő)* ha a hőkapacitást a tömeggel osztjuk el.
Megemlítendő még az állandó nyomáson és az állandó térfogaton mért hőkapacitás között összefüggést teremtő Robert-Mayer-egyenlet. Ennek több formája is van, a második moláris mennyiségekre vonatkozik.

$$C_p - C_v = \left(\frac{f}{2} + 1\right) nR - \frac{f}{2} nR = nR$$

$$C_{m,p} - C_{m,v} = R$$

5.4.2. Van der Waals gázok

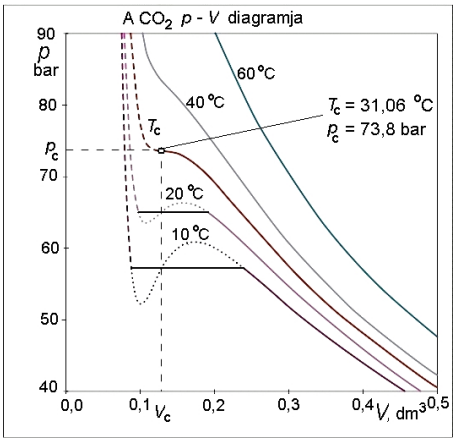
Az ideális gázmodellnél pontosabb leírását adja a gázoknak a Johannes Diderik van der Waals által kifejlesztett gázmodell. Ez az ideális gázmodellt két lépésben korrigálja. Egyrészt figyelembe veszi, hogy a **részecskék nem kiterjedés nélküli tömegpontok**, hanem $V_s = \frac{4\pi}{3}r^3$ saját térfogattal rendelkeznek. Ebből következően a térfogatból részecskénként $V_k = \frac{4\pi}{3}(2r)^3\frac{1}{2}$ térfogat használható csak fel. Így az első korrekció után a gáztörvény a következő:

$$p(V - b \cdot n) = nRT$$

itt b 1 mól gáz térfogati korrekciója*(1 mólnyi részecske sajáttérfogata)*, n pedig szokás szerint a mólszám.
A második korrekció az, hogy ebben a modellben **a részecskék kölcsönhatnak**. Ez olyan módon történik, hogy az atomok elektronfelhőjének rezgése miatt a töltéssúlypont eltolódik, ami egy dipólust indukál az atomban, ami egy dipólteret kelt a környezetében. Ez a többi, közelben levő atomot polarizálja, így azokban is dipólusok indukálódnak. Ezt indukált dipól-dipól kölcsönhatásnak nevezik.
Ez a hatás belül nagyjából kiátlagolódik, de mivel az edény falánál az egyik oldalról kevesebb a részecske, azokat a benti dipóltér "visszahúzza", ezért a nyomás is korrekcióra szorul. Elektrodinamikából tudjuk, hogy a dipólkölcsönhatás $\frac{1}{d^6}$ szerint cseng le, továbbá $\frac{1}{d^6} = \frac{1}{V^2} \propto \left(\frac{nN_A}{V}\right)^2$. Így tehát a nyomást $p_i = a\frac{n^2}{V^2}$ mennyiséggel kell korrigálni, ahol a egy mól gáz korrekciós együtthatója*(kohéziós erőkből adódó nyomáskorrekció mértéke)*.
Az állapotegyenlet a következő alakú:

$$\left(p + \frac{n^2 a}{V^2}\right)(V - nb) = nRT$$

Ezt át lehet alakítani egy harmadfokú polinommá, amit most nem csinálunk meg, de az 5.1-es ábrán látható,



5.1 ábra: A CO_2 p-V diagramja

hogy kis hőmérsékletek esetén 3 gyök van, azaz kis T-hez tartozó izotermák esetén a görbének maximuma és minimuma is van, ami azt jelenti, hogy adott viszonyok mellett a V csökkentése p csökkenésével jár. Ez gyakorlatban nem fordul elő, viszont reális gáz esetén megfigyelhető, hogy V csökkenése addig nem eredményez nyomásváltozást amíg a a gáz teljes mennyisége nem cseppfolyósodik. A p-V görbe ezen a szakaszon egyenes, nem pedig hullámos. Ez a jelenség a p_c és V_c kritikus nyomás és térfogatértékeknél következik be.
Írjuk fel a kritikus hőmérsékletet egy mól reális gázra:

$$p_c = \frac{RT_c}{V_c - b} - \frac{a}{V_c^2}$$

Képezzük a következő deriváltakat és tegyük őket 0-val egyenlővé:

$$\left.\frac{\partial p}{\partial V}\right|_{T_c} = \frac{RT_c}{(V_c - b)^2} + \frac{2a}{V_c^3} = 0$$

$$\left.\frac{\partial^2 p}{\partial V^2}\right|_{T_c} = \frac{2RT_c}{(V_c - b)^3} - \frac{6a}{V_c^4} = 0$$

Ezekből kifejezve a következőket kapjuk:

$$V_c = 3b$$

$$p_c = \frac{a}{27b^3}$$

$$T_c = \frac{8a}{27bR}$$

Ez a görbe inflexiós pontja. Ha a hőmérséklet nagyobb T_c-nél, akkor a viselkedés egyre jobban megközelíti az ideális gázét. Az előzőekből kifejezve a gáz jellemzőit:

$$a = 3p_cV_c^2$$

$$b = \frac{V_c}{3}$$

$$R = \frac{8}{3} \cdot \frac{p_cV_c}{T_c}$$

adódnak.
A redukált mennyiséges ökörködést nem érdemes ide leírni, de egyszer érdemes átolvasni

5.5. Nyílt folyamatok

Nyílt folyamatnak nevezzük azokat a folyamatokat, melyek során a rendszer egy kezdőállapotból egy másik, ún. végállapotba kerül át. Ennek több fajtáját különböztetjük meg.

5.5.1. Izoterm

Az izoterm folyamatok során állandó a hőmérséklet. Ez kísérletben nagy hőkapacitású és jó hővezető falú edénnyel lehet megtenni. Ilyenkor $dT = 0 \Rightarrow dU = 0$, valamint $T = const \Rightarrow p_1V_1 = p_2V_2$. A munka a nyomás térfogat szerinti integráljával adódik:

$$W = -\int_{V_1}^{V_2} p \cdot dV = -nRT \cdot ln\frac{V_2}{V_1}$$

5.5.2. Izobár

Izobár folyamat esetén a nyomás állandó, $dp = 0$. Az ideális gáztövényből levezethető, hogy $\frac{V_1}{T_1} = \frac{V_2}{T_2}$. Ez Gay-Lussac I. törvénye. Látható még, hogy $W = -p \cdot dV = nR(T_1 - T_2)$, valamint $Q = \Delta H = H_2 - H_1 = n \cdot C_{m,v}(T_2 - T_1)$

5.5.3. Izochor

Izochor folyamatok során a nyomás állandó, azaz $dV = 0 \Rightarrow W = -p \cdot dV = 0$. Az ideális gáztörvényből megmutatható, hogy $\frac{p_1}{T_1} = \frac{p_2}{T_2}$, ez pedig éppen Gay-Lussac második törvénye. Továbbá $Q = \Delta U = U_2 - U_1 = C_{m,p} \cdot \Delta T$

5.5.4. Adiabatikus

Adiabatikus folyamat során nincs hőcsere. Ezt hőszigetelő edénnyel lehet megvalósítani, vagy pedig olyan gyors folyamattal, amely során nincs idő a hőcserére. Adiabatikus folyamat során a p,V,T mind változnak. Tudjuk, hogy $\delta Q = 0 \Rightarrow dU = n \cdot C_{m,v}dT$, valamint $\delta W = -p \cdot dV = nRT\frac{dV}{V} = dU$ azaz:

$$nC_{m,v}dT = nRT\frac{dV}{V}$$

A jobb oldalára alkalmazzuk a Rober-Mayer egyenletet:

$$nC_{m,v}dT = n(C_{m,p} - C_{m,v})T\frac{dV}{V}$$

Osszuk le a bal oldatl T-vel, a jobb oldalt pedig $C_{m,v}$-vel és vezessük be a $\gamma = \frac{C_{m,p}}{C_{m,v}}$, adiabatikus kitevőt. Így a következőre jutunk:

$$\frac{dT}{T} = -(\gamma - 1)\frac{dV}{V}$$

Megoldva a differenciálegyenletet és az eredményt exponenciálisra emelve:

$$T_1V_1^{\gamma-1} = T_2V_2^{\gamma-1}$$

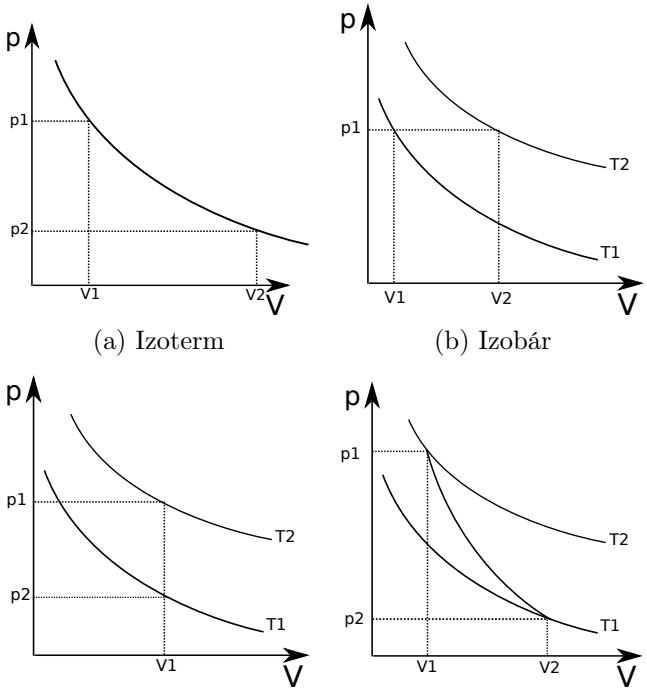
Leosztva mindkét oldalt nR-el rendezés után a Poisson-féle gázegyenlet adódik:

$$\frac{T_1^\gamma}{p_1^{\gamma-1}} = \frac{T_2^\gamma}{p_2^{\gamma-1}}$$

A végzett munka:

$$W = U_2 - U_1 = nC_{m,v}(T_2 - T_1) = nC_{m,v}\left(\frac{p_2V_2}{nR} - \frac{p_1V_1}{nR}\right) = \frac{C_{m,v}}{C_{m,p} - C_{m,v}} \cdot (p_2V_2 - p_1V_1) = \frac{p_2V_2 - p_1V_1}{\gamma - 1}$$

5.5.5. Ábrák



(a) Izoterm (b) Izobár

(c) Izochor (d) Adiabatikus

5.2 ábra: nyílt folyamatok

A 9. termo tételt érdemes 1-2x átolvasni

5.6. Körfolyamatok, Carnot-folyamat

Termodinamikai körfolyamatoknak nevezzük azokat a folyamatokat, ahol:

- A rendszer a kezdeti állapotba tér vissza
- Az állapotjelzők felveszik a kezdeti értékeket
- $Q \neq 0$ és $W \neq 0$

A körfolyamatok fontossága abban rejlik, hogy ciklikus természetük lehetővé teszi azt, hogy folyamatosan működhessenek. Modellezésükre kvázisztatikus folyamatokat használunk. Fontos továbbá még, hogy

$$\oint dU = \oint \delta Q + \oint \delta W$$

$$Q = -W$$

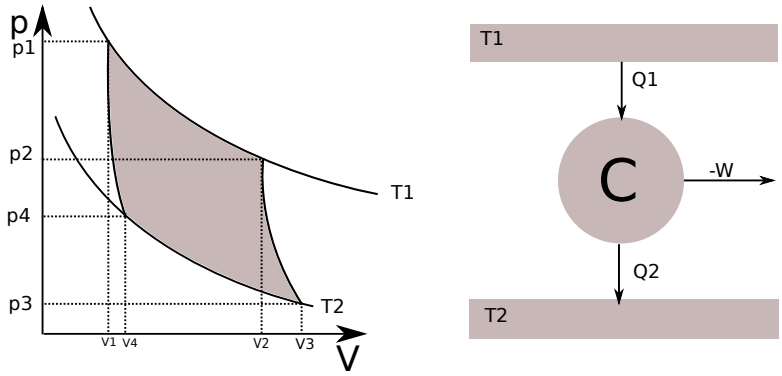
$$Q = \sum_i Q_{i,fel} - \sum_j Q_{j,le}$$

A körfolyamatokat megkülönböztethetjük úgy is, hogy aszerint csoportosítjuk őket, hogy mit csinálnak. Így például léteznek hőerőgép ciklusok, amik hőenergiát alakítanak át mechanikai munkává, vagy például hőszivattyúk, amik kis mértékű hőt emelnek fel magasabb hőmérsékletűre mechanikai munka bevezetése árán. Vezessük be még a hatásfokot is, a következő definícióval:

$$\eta = \frac{-W}{Q_{fel}} = 1 - \frac{Q_{le}}{Q_{fel}}$$

5.6.1. Carnot-körfolyamat ideális gázzal

A Carnot-körfolyamatot az alábbi p-V diagrammal lehet leírni:



5.3 ábra: Carnot-gép

Az $1 \to 2$ folyamat itt egy izoterm tágulás:

$$dT = 0 \Rightarrow dU = 0 \Rightarrow -W_{1,2} = Q_1 = nRT_1 \cdot ln\frac{V_2}{V_1}$$

A $2 \to 3$ folyamat egy adiabatikus tágulás. Itt T_1 hőmérsékletről T_2 hőmérsékletre mozgunk. A gáz tágul a belső energia rovására, emiatt munkát végez:

$$-W_{2,3} = -\Delta U_{2,3} = -nC_{m,v}(T_2 - T_1) = nC_{m,v}(T_1 - T_2)$$

A $3 \to 4$ folyamat egy izoterm összenyomás. T_2 hőmérsékleten megyünk p_4 nyomásra és V_4 térfogatra. A gázon végzett munkára és a fejlődött hőre a következők teljesülnek:

$$W_{3,4} > 0$$

$$Q_2 < 0$$

$$-W_{3,4} = Q_2 = n_2 T_2 ln\frac{V_4}{V_3}$$

A $4 \to 1$ folyamat egy adiabatikus összenyomás:

$$-W_{4,1} = -\Delta U_{4,1} = -nC_{m,v}(T_1 - T_2)$$

Összességében tehát azt látjuk, hogy az adiabatikus szakaszokon végzett munkák csak az előjelükben térnek el, így az összes munka csak az izoterm folyamatokkal kapcsolatos.

$$-W = -W_{1,2} - W_{3,4} = nRT_1 \cdot ln\frac{V_2}{V_1} + nRT_2 \cdot ln\frac{V_4}{V_3} = Q_1 + Q_2$$

Tudjuk továbbá, hogy

$$T_1 V_2^{\gamma-1} = T_2 V_3^{\gamma-1}$$
$$T_1 V_1^{\gamma-1} = T_2 V_4^{\gamma-1}$$

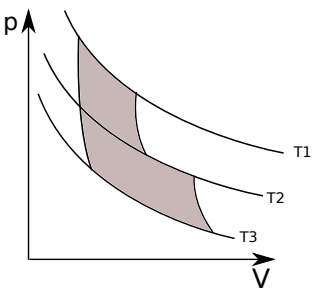
Ezekből:

$$\frac{V_3}{V_4} = \frac{V_2}{V_1} \Rightarrow -W = nR(T_1 - T_2) \cdot ln\frac{V_2}{V_1}$$

A folyamat hatásfoka:

$$\eta = \frac{-W}{Q_1} = \frac{Q_1 + Q_2}{Q_1} = \frac{Q_1 - |Q_2|}{Q_1} = \frac{T_1 - T_2}{T_1}$$

Megmutatható továbbá, hogy a kéttartályos Carnot-gép hatásfoka a legnagyobb.



5.4 ábra: Három tartályos Carnot-gép

Az állítás az 5.4 ábra egy 3 tartályos gép p-V diagramján intuitíven is látszik, de számoljuk is ki. Ezt kezelhetjük úgy, mintha 2 darab 2 tartályos Carnot-gépet raknánk össze, amelynek az egyik tartálya közös. Ilyenkor:

$$\eta_1 = \frac{T_1 - T_2}{T_1}$$

$$\eta_2 = \frac{T_3 - T_2}{T_1}$$

$$\eta = \frac{-W_1 - W_2}{Q_1 + Q_2} = \frac{\eta_1 Q_1 + \eta_2 Q_2}{Q_1 + Q_2} = \eta_1 - \frac{(\eta_1 - \eta_2)Q_2}{Q_1 + Q_2} < \eta^C$$

Ezt akartuk megmutatni.

Hűtőgépek: A hűtőgépek és hőszivattyúk gyakorlatilag visszafelé járatott Carnot-gépek, amik $Q_2 > 0$ hőt vonnak el a T_2 alacsony hőmérsékletű tartályból*(a hűtőgép belsejéből)* és $W > 0$, külső, legtöbbször elektromos munkával $|Q_1| = Q_2 + W$ hőt juttatnak a $T_1 > T_2$ magasabb hőmérsékletű tartályba. A hőelvonás hatékonyságát a hideg tartályból elvont $Q_2 > 0$ hő és a felhasznált $W = |Q_1| - Q_2$ munka hányadosa, vagyis az

$$\varepsilon_h = \frac{Q_2}{W} = \frac{Q_2}{|Q_1| - Q_2} = \frac{T_2}{T_1 - T_2}$$

termodinamikai jósági tényező jellemzi.

Hőszivattyúk: A hőszivattyúk tulajdonképpen szintén hűtőgépek. Télen úgy fűtik az épületet, hogy Q_2 hőt vonnak el a nagy hőkapacitású levegőből, talajból, vagy vízből. Mivel a a felső T_1 hőmérsékleten leadott $|Q_1|$ hőmennyiséget hasznosítják, ezért jellemzésükre a meleg hőtartályba*(épületbe)* szállított $|Q_1|$ hő és a felhasznált $W = |Q_1| - Q_2$ munka hányadosa, vagyis az

$$\varepsilon_h = \frac{|Q_1|}{W} = \frac{|Q_1|}{|Q_1| - Q_2} = \frac{T_1}{T_1 - T_2}$$

termodinamikai jósági tényező szolgál. Ennek értéke nagyjából 3, vagyis a befektetett munka körülbelül háromszorosát kapjuk vissza hő formájában. A hőszivattyúk egy része képes megfordítani a hőáramlás irányát, így nyáron légkondicionálóként működnek.

5.7. Második főtétel

A termodinamika első főtétele bármilyen irányú energiaátalakulást megenged. Jól tudjuk azonban, hogy ez a valóságban nincs így, a spontán lejátszódó folyamatok megfordíthatatlanok*(irreverzibiliesek)*, így például:

- A súrlódási munka egy része hővé alakul, de a hő sosem alakul vissza súrlódási munkává
- A környezetnél magasabb hőmérsékletű test mindig lehűl, soha nem von el még több hőt a környezetből, hogy tovább melegedjen. A magunkhoz szorított jégcsap pedig soha nem fog minket melegíteni, bár a hőátadás esetén az energia megmaradna.
- A sóoldat önként soha nem alakul vissza oldószerré és szilárd halmazállapotú sóvá.
- Az autók kipufogói nem szívják vissza az égéstermékekkel szennyezett levegőt, és nem alakítják vissza benzinné és tiszta levegővé.

A fenti folyamatok mind irreverzibilisek. Jellemzőik:

- a folyamatok spontán, külső beavatkozás nélkül nem mennek végbe
- a folyamat kezdetén az intenzív paraméterek értékei a rendszer különböző pontjaiban eltérőek
- a folyamatok az egyensúlyi állapot felé, az intenzív paraméterek kiegyenlítődésének irányában mennek végbe
- a folyamatok külső hatás nélkül, önként, fordított irányban nem játszódnak le.

Ezek alapján kimondhatjuk:
A természetben nincs és egyetlen -ún. Clausius- géppel sem hozható létre olyan folyamat amelyben a hő önként, külső munkavégzés nélkül a hidegebb helyről a melegebb helyre menne át
Egy másik, ezzel ekvivalens megfogalmazás:
A természetben nincs és egyetlen -ún. Kelvin- géppel sem hozható létre olyan folyamat amelynek során egy test hőt veszít és ez a hő egyéb változások nélkül teljes egészében, 100% ***hatásfokkal munkává alakulna át.***
Ahogy azt már láttuk, a reverzibilis Carnot-féle körfolyamat hatásfoka csak a két hőtartály hőmérsékletétől függ, ezért Kelvin szerint elvileg lehetséges anyagi minőségtől független termodinamikai hőmérsékleti skála definiálása. Ennek alappontjai $101,325kPa$ nyomáson a jég olvadáspontja T_2 és a víz forráspontja T_1. Ha ezen alappontok között reverzibilis Carnot-féle körfolyamatot létesítünk és megmérjük a Q_1 felvett és Q_2 leadott hőket, akkor ezekből $\eta = (Q_1 - |Q_2|)Q_1 = (T_1 - T_2)(T_1) = 0,26799$ adódik. Kelvin nyomán a két alappont közötti hőmérsékletet 100 egyenlő részre osztjuk és a hőmérsékletegységet kelvin-nek nevezzük. Ebben a formában a jég olvadáspontjára $T_1 = 273,15K$ a víz forráspontjára pedig $373,15K$ adódik.
Tudjuk azonban, hogy a valóságban bizonyos mennyiségű munka mindig "kárbavész", így az irreverzibilis folyamatok hatásfoka mindig kisebb, mintha reverzibilisen menne végbe, azaz $Q_{1,irr} < Q_1$ és $Q_{2,irr} < Q_2$ így:

$$\eta_{irr} = \frac{-W_{irr}}{Q_{1,irr}} = 1 - \frac{|Q_{2,irr}|}{Q_{1,irr}} < 1 - \frac{|Q_2|}{Q_1} = 1 - \frac{T_2}{T_1} = \eta_{rev}$$

Ebből:

$$\frac{Q_{1,irrev}}{T_1} + \frac{Q_{2,irrev}}{T_2} < 0$$

Azaz irreverzibilis Carnot-körfolyamatra a redukált hők összege negatív, reverzibilisre pedig nulla. Ez a törvény általánosítható tetszőleges, nem Carnot-féle reverzibilis körfolyamatra, amelyet n számú elemi Carnot-körfolyamatból rakunk össze. Jelöljük az i-edik folyamatban felvett és leadott hők összegét ΔQ_i-vel, a hőcsere során pedig állandónak tekinthető hőmérsékletet T_i-vel. Ekkor reverzibilis folyamat esetén az elemi redukált hők összege:

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{\Delta Q_i}{T_i} = 0$$

Ha a "Carnot-folyamatokból való összeépítést" minden határon túl finomítjuk, akkor $\Delta Q_i \to 0$, így:

$$\lim_{\Delta Q_i \to 0} \sum_{i=1}^{n} \frac{\Delta Q_i}{T_i} = \oint \frac{\delta Q_{rev}}{T} = 0$$

Ezt Clausius-féle egyenlőségnek nevezik. Azt fejezi ki, hogy bármely reverzibilis körfolyamatban az elemi redukált ők összege zérus.
Ha jobban megnézzük, akkor látjuk, hogy ez egy állapotfüggvény. Jelöljük a $\frac{\delta Q_{rev}}{T}$ mennyiséget dS-el, és S-t nevezzük el entrópiának.
Rögzítsük az A kezdőállapotot és a B végállapot legyen tetszőleges. Ha az A állapotban előírjuk az entrópia értékét, akkor

$$S_B = S_A + \int_A^B \frac{\delta Q_{rev}}{T}$$

ebből

$$\Delta S_{krf} = \oint dS = 0$$

vagyis reverzibilis körfolyamatban az entrópia nem változik.
Ideális gáz entrópiájára a következőt kapjuk:

$$dS = \frac{\delta Q_{rev}}{T} = \frac{dU}{T} + \frac{p}{T} dV$$

Tudjuk, hogy minden ideális gázra $dU = nC_{m,V}dT$ és az ideális gázok állapotegyenlete alapján $\frac{p}{T} = \frac{nR}{V}$. Ezt integrálva a következőt kapjuk:

$$S(V,T) = S_0(V_0,T_0) + \int_{T_0}^{T} \frac{nC_{m,V}}{T} dT + \int_{V_0}^{V} \frac{nR}{V} dV = S_0(V_0,T_0) + nC_{m,V} \cdot ln\frac{T}{T_0} + nR \cdot ln\frac{V}{V_0}$$

5.8. A fundamentális egyenlet és a termodinamikai potenciálok

5.8.1. A fundamentális egyenlet

Az előző fejezetben láttuk, hogy irreverzibilis folyamat esetén a redukált hők összege negatív. Az erre kapott egyenlőtlenség általánosítható tetszőleges irreverzibilis körfolyamatokra is. A logika megegyezik a reverzibilis folyamatoknál alkalmazottéval:

$$\oint \frac{\delta Q_{irrev}}{T} < 0$$

Az előző egyenlet segítségével kiszámítható az irreverzibilis nyílt folyamat entrópiaváltozása. Ehhez tekintsünk egy olyan körfolyamatot, amely az A állapotból az 1-es úton irreverzibilisen eljut a B állapotba, majd onnan egy 2-es, reverzibilis úton vissza az A állapotba. Ekkor a körintegrált így bonthatjuk szét:

$$\oint \frac{\delta Q_{irrev}}{T} = \int_A^B \frac{\delta Q_{irrev}}{T} + \int_B^A \frac{\delta Q_{rev}}{T} < 0$$

A reverzibilis nyílt folyamatra kiszámolt entrópiaváltozást a bal oldal második tahjába helyettesítve azt kapjuk, hogy

$$\Delta S = S_B - S_A > \int_A^B \frac{\delta Q_{irrev}}{T}$$

vagyis az irreverzibilis nyílt folyamat esetén az entrópiaváltozás mindig nagyobb, mint a redukált hők összege. Differenciális változásokra:

$$dS > \frac{\delta Q_{irrev}}{T}$$

Zárt rendszer esetén*($\delta Q_{irrev} = 0$)* azt kapjuk, hogy

$$dS > 0$$

Ez az úgynevezett entrópiatétel, ami azt mondja, hogy zárt rendszer esetén irreverzibilis folyamatban az entrópia mindig növekszik.
Helyettesítsük be az első főtételbe a differenciális változásokra érvényes entrópiát:

$$dU = \delta Q + \delta W \leq TdS - pdV$$

Ez az első és a második főtételt egyaránt tartalmazó egyenlet, a termodinamika fundamentális egyenlete. Ha a rendszert alkotó anyagok kémiai potenciálját is figyelembe vesszük, akkor a következő írható:

$$dU(S,V,n) \leq TdS - pdV + \sum_{i=1}^{n} \mu_i dn_i$$

Állítás: Amikor S-nek maximuma van, akkor U-nak minimuma.

Bizonyítás: Tegyük fel, hogy nincs így. Ekkor $U = U_{min} + \Delta U_0$. Vegyünk el $\delta W = \Delta U_0$ belső energiát olyan folyamatban, melyben $dS = 0$.
Ekkor $\Delta U_0 = \delta W = \delta Q + \delta W$. De tudjuk, hogy $\delta Q = \delta W$, mivel U ekkor már minimális. Így ellentmondásra jutottunk, tehát U minimális.

Vezessük még le az úgynevezett Gibbs-Duhem-relációt. Az Euler-tétel szerint, ha $X = X(x_1, x_2, ..., x_n)$ függvény homogén függvény, akkor:

$$X = \left.\frac{\partial X}{\partial x_1}\right|_{x_i, i\neq 1} x_1 + \left.\frac{\partial X}{\partial x_2}\right|_{x_i, i\neq 2} x_2 + ... + \left.\frac{\partial X}{\partial x_n}\right|_{x_i, i\neq n} x_n$$

Tudjuk, hogy az állapotfüggvények homogén, elsőrendű függvényei a változóknak. Használjuk a belső energiára az Euler-tételt, ekkor:

$$U(S,V,n) = \left.\frac{\partial U}{\partial S}\right|_{V,n_i} S + \left.\frac{\partial U}{\partial V}\right|_{S,n_i} V + \left.\frac{\partial U}{\partial n_i}\right|_{S,V,n_j,j\neq i} \sum_{i=1}^{n} n_i$$

Ha képezzük a fundamentális egyenlet független, extenzív változók *(S,V,n_i)* szerinti parciális deriváltjait, akkor azok megadják az úgynevezett konjugált állapothatározókat:

$$\left.\frac{\partial U}{\partial S}\right|_{V,n_i} \leq T$$

$$\left.\frac{\partial U}{\partial V}\right|_{S,n_i} \leq -p$$

$$\left.\frac{\partial U}{\partial n_i}\right|_{V,n_j,j\ neqi} \leq \mu_i$$

Ha reverzibilis folyamatot tekintünk, akkor ezek nem $\leq$-ek, hanem pontosan megegyeznek egymással. Ezek és az előző kifejezés alapján a belső energiára felírható, hogy

$$U = TS - pV + \sum_{i=1}^{n} \mu_i n_i$$

Képezzük ennek a teljes differenciálját:

$$dU = TdS + SdT - pdV + Vdp + \sum_{i=1}^{n} \mu_i dn_i + \sum_{i=1}^{n} n_i d\mu_i$$

Használjuk fel erre a fundamentális egyenletet és azt, hogy reverzibilis folyamatot tekintünk*(a fundamentális egyenletben így = lesz a $\leq$ helyett)*:

$$SdT - Vdp + \sum_{i=1}^{n} n_i d\mu_i = 0$$

Ezt Gibbs-Duhem relációnak nevezik, és ez kapcsolatot teremt a T, p, μ intenzív állapotjelzők között. Az is látható belőle, hogy a kölcsönhatáshoz tartozó független állapotjelzők száma mindig 1-el kevesebb, mint az összes intenzív állapotjelző összege.

5.8.2. Potenciálok

A fizikai és kémiai folyamatok többnyire nyitott viszonyok között mennek végbe, s ebből kifolyólag leírásukra a csak zárt rendszerekre vonatkozó entrópiatétel nem alkalmazható. Bevezethetők viszont olyan termodinamika függvények*(Gibbs elnevezése alapján termodinamikai potenciálok)*, amelyek alkalmasak a nyitott rendszerek tárgyalására is. Ezeket többféle módon is meg lehet kapni a belső energiából. A fizikai tárgyalásmódnak az a lényege, hogy valamelyik, vagy esetleg az összes intenzív állapotjelzőt stabilizáljuk pl. hő vagy nyomástartállyal és az adott mennyiség állandóságát kihasználva "újra végigszámoljuk a belső energia kifejezését". Itt nem ezt az utat fogjuk követni, mivel ez bár valósabb képet ad a potenciálok mibenlétéről, körülményesebb. Matematikai úton, a már fent bevezetett konjugált változók Legendre-transzformációval való cserélgetésével fogjuk levezetni ezeket. Egyúttal minden potenciál mellett a belőle megkapható úgynevezett Maxwell-relációt is levezetjük. A gyorsabb írás kedvéért a kémiai potenciálos tagot itt most lehagyjuk, ezt mindegyik potenciálnál képzeljük oda.

Belső energia: Ennek a definíciója már ismert, így ezt levezetni nem kell. Egyből a Maxwell-relációt számoljuk:

$$dU = TdS - pdV$$

Képezzük a teljes differenciálját:

$$dU = \left.\frac{\partial U}{\partial S}\right|_V dS + \left.\frac{\partial U}{\partial V}\right|_S dV \Rightarrow T = \left.\frac{\partial U}{\partial S}\right|_V, -p = \left.\frac{\partial U}{\partial V}\right|_S$$

Használjuk fel a vegyes második deriváltakra alkalmazható Young-tételt:

$$\left.\frac{\partial^2 U}{\partial V \partial S}\right|_V\Bigg|_S = \left.\frac{\partial^2 U}{\partial S \partial V}\right|_S\Bigg|_V \Rightarrow \left.\frac{\partial T}{\partial V}\right|_S = -\left.\frac{\partial p}{\partial S}\right|_V$$

Entalpia: Tekintsük a rendszer nyomását stabilizáltnak. Ez azt jelenti, hogy a belső energiában V-t kell kicserélnünk Legendre-transzformációval a konjugált változójára, p-re. Tudjuk továbbá, hogy a belső energiában a nyomás negatív előjellel szerepel, ezért itt pozitív előjellel vesszük figyelembe. Elvégezve a deriválásokat és a behelyettesítéseket:

$$H = U + pV \Rightarrow dH = dU + p \cdot dV + V \cdot dp = TdS + Vdp = H(S, p)$$

Az előzőhöz hasonlóan képezzük a teljes differenciálját és a második deriváltakat, így a definíció és az ide tartozó Maxwell-reláció:

$$dH = \left.\frac{\partial H}{\partial S}\right|_p dS + \left.\frac{\partial H}{\partial p}\right|_S dp \Rightarrow T = \left.\frac{\partial H}{\partial S}\right|_p, V = \left.\frac{\partial H}{\partial p}\right|_S$$

$$\left.\frac{\partial^2 H}{\partial p \partial S}\right|_p\Bigg|_S = \left.\frac{\partial^2 H}{\partial S \partial P}\right|_S\Bigg|_P \Rightarrow \left.\frac{\partial T}{\partial p}\right|_S = \left.\frac{\partial V}{\partial S}\right|_p$$

Szabadenergia: Tekintsük a rendszer hőmérsékletét stabilizáltnak. Ez azt jelenti, hogy a belső energiában S-t kell kicserélnünk Legendre-transzformációval a konjugált változójára, T-re. Elvégezve a deriválásokat és a behelyettesítéseket:

$$F = U - TS \Rightarrow dF = dU - TdS - SdT = -SdT - p \cdot dV = F(T, V)$$

Az előzőhöz hasonlóan képezzük a teljes differenciálját és a második deriváltakat, így a definíció és az ide tartozó Maxwell-reláció:

$$dF = \left.\frac{\partial F}{\partial T}\right|_V dT + \left.\frac{\partial F}{\partial V}\right|_T dV \Rightarrow -S = \left.\frac{\partial F}{\partial T}\right|_V, -p = \left.\frac{\partial F}{\partial V}\right|_T$$

$$\left.\frac{\partial^2 F}{\partial V \partial T}\right|_V\Bigg|_T = \left.\frac{\partial^2 F}{\partial T \partial V}\right|_T\Bigg|_V \Rightarrow \left.\frac{\partial S}{\partial V}\right|_T = \left.\frac{\partial p}{\partial T}\right|_V$$

Szabadentalpia*(Gibbs-féle szabadenergia)*: Tekintsük a rendszer nyomását és hőmérsékletét stabilizáltnak. Ez azt jelenti, hogy a belső energiában a V-t p-re, az S-et pedig T-re kell transzformálni. Ugyanakkor egyszerűbben eredményre juthatunk, ha az entalpiában transzformáljuk csak az S-et T-re. így:

$$G = H - TS \Rightarrow dG = dH - TdS - SdT = -SdT + V \cdot dp = G(T, p)$$

Az előzőhöz hasonlóan képezzük a teljes differenciálját és a második deriváltakat, így a definíció és az ide tartozó Maxwell-reláció:

$$dG = \left.\frac{\partial G}{\partial T}\right|_p dT + \left.\frac{\partial G}{\partial p}\right|_T dp \Rightarrow -S = \left.\frac{\partial G}{\partial T}\right|_p, V = \left.\frac{\partial G}{\partial p}\right|_T$$

$$\left.\frac{\partial^2 G}{\partial T \partial p}\right|_T\Bigg|_p = \left.\frac{\partial^2 G}{\partial p \partial T}\right|_p\Bigg|_T \Rightarrow -\left.\frac{\partial S}{\partial p}\right|_T = \left.\frac{\partial V}{\partial T}\right|_p$$

Kémiai potenciál: A kémiai potenciál ismert még moláris szabadenergiaként is. Ez egy formája a potenciális energiának, ami elnyelődhet, vagy felszabadulhat kémiai reakciók, vagy fázisátalakulások során. Egy elegy egy alkotórészének a kémiai potenciálját lehet úgy is definiálni, hogy a rendszer szabadenergiájának a változásának mértéke az alkotórészből jelenlevő mólok számának változásának függvényében. Ha a nyomás állandó, akkor megegyezik a moláris Gibbs-potenciállsal.

5.8.3. C_p-C_V egyenlőség

Írjuk fel az első főtételt és tekintsük a nyomást állandónak. Ekkor:

$$\delta Q_p = C_p \cdot dT = dU + p \cdot dV$$

$$dU = \left.\frac{\partial U}{\partial V}\right|_T dV + \left.\frac{\partial U}{\partial T}\right|_V dT$$

Tudjuk, hogy $\left.\frac{\partial U}{\partial T}\right|_V = C_V$, így a fenti egyenletekből:

$$C_p \cdot dT = \left(\left.\frac{\partial U}{\partial V}\right|_T + p\right) dV + C_v \cdot dT$$

$$C_p - C_V = \left(\left.\frac{\partial U}{\partial V}\right|_T + p\right) \left.\frac{\partial V}{\partial T}\right|_p = T \left.\frac{\partial S}{\partial V}\right|_T \left.\frac{\partial V}{\partial T}\right|_p = T \left.\frac{\partial p}{\partial T}\right|_V \left.\frac{\partial V}{\partial T}\right|_p$$

Ha eddig nem vezettük volna be, akkor vezessük be a $\left.\frac{\partial p}{\partial T}\right|_V = \gamma = \frac{\beta}{\kappa_T}$ feszültségi együtthatót. Itt β a térfogati hőtágulási együttható, κ_T pedig az állandó hőmérsékleten mért kompresszibilitási együttható. Azt is tudjuk, hogy $\beta = \frac{1}{V} \left.\frac{\partial V}{\partial T}\right|_p$, így a második tag is könnyen átalakítható. Az átalakítások után az eredmény:

$$C_p - C_V = \frac{TV\beta^2}{\kappa_T}$$

5.9. Harmadik főtétel

A német Walther Nernst kísérletileg megállapította, hogy a hőmérséklet csökkenésével ΔG és ΔH egyre közelebb kerülnek egymáshoz. Nernst kísérleti eredményeire támaszkodva Planck elméletileg megállapította, hogy $T \to 0$ esetén nem csak a ΔG és a ΔH tart egymáshoz, hanem valamennyi folyékony és szilárd homogén anyag szabadentalpiája és entalpiája is, mégpedig úgy, hogy a G és a H görbék $0K$ hőmérsékleten érintik egymást, vagyis:

$$\lim_{T\to 0} G(T) = \lim_{T\to 0} H(T)$$

$$\lim_{T\to 0} \left.\frac{\partial G}{\partial T}\right|_p = \lim_{T\to 0} \left.\frac{\partial H}{\partial T}\right|_p$$

Ismert továbbá, hogy $S = -\left.\frac{\partial G}{\partial T}\right|_p = \frac{H-G}{T}$ Ha feltételezzük, hogy az entrópia határértéke létezik, és a jobb oldalra alkalmazva a L'Hospital-szabály és a Planck-féle összefüggést a következő adódik:

$$\lim_{T\to 0} S = \lim_{T\to 0} \left.\frac{\partial H}{\partial T}\right|_p - \lim_{T\to 0} \left.\frac{\partial G}{\partial T}\right|_p = 0$$

Azaz folyékony és szilárd homogén anyagok entrópiája nulla kelvin hőmérsékleten zérus. Ez a Nernst-tételnek is nevezett harmadik főtétel.

5.9.1. Következmények

Az entrópia kiszámítására alkalmas kifejezésben a hő helyére helyettesítsük be a hőkapacitással kifejezett formáját:

$$S(T) = S(T_0 = 0K) + \int_{T_0}^{T} \frac{\delta Q_v}{T} = \int_{T_0}^{T} \frac{C_V dT}{T}$$

Ahhoz, hogy $T \to 0$ esetén az S entrópia ne váljon végtelenné, C_V hőkapacitásnak nullához kell tartania.
Nulla kelvinhez igen közeli hőmérsékleten az előzőek alapján a hőkapacitás már nagyon kicsi, és a nem tökéletes hőszigetelés*(tökéletes nem létezik)* miatt bármilyen kis δQ hő is jelentős felmelegedést okoz, ezért a $0K$ hőmérséklet nem érhető el, csak megközelíthető. Más megfogalmazásban:
Nem létezik és nem is készíthető olyan periodikusan dolgozó gép, úgynevezett harmadfajú perpeetum mobile, amellyel 0 K hőmérsékletet lehet előállítani.

5.10. Fázisátalakulások jellemzői, Gibbs-féle fázisszabály, fázisdiagramok

5.10.1. Egykomponensű rendszerek egyensúlyi feltételei

Az egyensúly feltétele az, hogy az intenzív állapotjelzők kiegyenlítettek legyenek a teljes rendszerre nézve. Azaz zárt rendszerre:

$$dU = 0$$

$$d^2U = \frac{\partial^2 U}{\partial S^2} dS^2 + 2\frac{\partial^2 U}{\partial S \partial V} dS dV + \frac{\partial^2 U}{\partial V^2} dV^2 > 0$$

A fenti kifejezést mátrix alakba rendezve a stabilitási feltétel*(minimum létezése)* az lesz, hogy a kapott deriváltmátrix*(Hesse-mátrix)* pozitív definit legyen:

$$\underline{\underline{A}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 U}{\partial S^2} & \frac{\partial^2 U}{\partial S \partial V} \\ \frac{\partial^2 U}{\partial S \partial V} & \frac{\partial^2 U}{\partial V^2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{T}{C_p} & \frac{-T}{C_v \kappa_T} \\ \frac{-T}{C_v \kappa_T} & \frac{1}{V \kappa_S} \end{pmatrix}$$

Az összes sajátérték pozitív volta jelentené a pozitív definitséget, de a következők is "jók" ennek a belátására:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial S^2} > 0 \Rightarrow C_V > 0$$

$$det\underline{\underline{A}} > 0 \Rightarrow \frac{T}{V C_V \kappa_S} - \left(\frac{T\beta}{C_V \kappa_T}\right)^2 > 0$$

A továbbmenetelhez vezessünk le egy azonosságot: Tudjuk, hogy $\kappa_T = -\frac{1}{V} \left.\frac{\partial V}{\partial p}\right|_T$ és $\kappa_S = -\frac{1}{V} \left.\frac{\partial V}{\partial p}\right|_S$ így:

$$\kappa_S = -\frac{1}{V} \left.\frac{\partial V}{\partial p}\right|_S = -\frac{1}{V} \left(-\frac{\left.\frac{\partial S}{\partial p}\right|_V}{\left.\frac{\partial S}{\partial V}\right|_p} \right) = -\frac{1}{V} \left(-\frac{\left.\frac{\partial S}{\partial T}\right|_V \left.\frac{\partial T}{\partial p}\right|_V}{\left.\frac{\partial S}{\partial T}\right|_p \left.\frac{\partial T}{\partial V}\right|_p} \right) = -\frac{1}{V} \frac{C_V}{C_p} \left(-\frac{\left.\frac{\partial T}{\partial p}\right|_V}{\left.\frac{\partial T}{\partial V}\right|_p} \right) = -\frac{1}{V} \left.\frac{\partial V}{\partial p}\right|_T \frac{C_V}{C_p} = \frac{C_V}{C_p} \kappa_T$$

azaz

$$\frac{C_v}{C_p} = \frac{\kappa_S}{\kappa_T}$$

Itt kihasználtuk a következő két, parciális deriváltakra vonatkozó azonosságot:

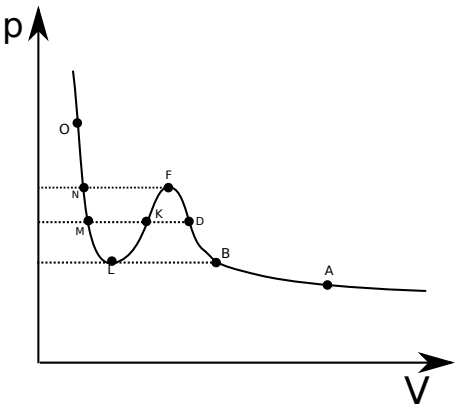
$$\left.\frac{\partial f}{\partial x}\right|_z = \left.\frac{\partial f}{\partial y}\right|_z \left.\frac{\partial y}{\partial x}\right|_z$$

$$\left.\frac{\partial x}{\partial y}\right|_z = -\frac{\left.\frac{\partial z}{\partial y}\right|_x}{\left.\frac{\partial z}{\partial x}\right|_y}$$

A kapott eredményt behelyettesítve a determinánst tartalmazó kifejezésbe és felhasználva a $C_p - C_v$ egyenlőség eredményét, azt kapjuk, hogy a második egyensúlyi kritérium az, hogy $\kappa_T > 0$.
Az első kritérium megértéséhez képzeljünk el egy rendszert, aminek mindenhol T a hőmérséklete*(ha nem így lenne, akkor nem lenne egyensúlyban)*. Ha egy pontban egy kis ΔT-vel megnöveljük a hőmérsékletet. Ekkor a melegebb helyről a hideg felé hő áramlik és mivel a hőkapacitás pozitív, ezért ez lehűti a melegebb helyet. Tehát ez a kis hőmozgás visszaviszi a rendszert az egyensúlyi állapotba.
A második kritériumhoz képzeljünk el egy rendszert, ami két dugattyút tartalmaz, így három részre osztja a rendszert, két "belső" részre és egy "külsőre"*(itt hat a külvilág nyomása)*. Legyen a külső nyomás p_k, ez hat a külső dugattyúra. Az egyensúly miatt azonban a két belső térrészben is p_k a nyomás. Ha kicsit lecsökken a külső nyomás, akkor a külső dugattyú elmozdul a külvilág felé. A belső dugattyú nem érzi közvetlenül a külső nyomás változását, de mivel a külső dugattyú kifele mozdul el, ezért ahhoz, hogy az egyensúly fennmaradjon, a belső dugattyúnak is kifelé kell mozdulnia, különben a szélső, külső dugattyú mögött levő térrészben lecsökkenne a nyomás, így ez nem lenne egyensúlyi állapot. Ez csak pozitív kompressziós együtthatóval lehetséges. Tehát a nyomás is úgy korrigálódik, hogy a rendszert az egyensúly felé vigye.
Azt mondhatjuk, hogy a rendszer közvetlen válasza*(külső dugattyú elmozdul kifelé)* a külső környezet változására olyan, hogy a rendszert az egyensúly felé vigye. Ezt Le-Chatelier elvnek nevezik.
Azt is mondhatjuk, hogy a rendszer közvetett válasza*(a belső dugattyú is kifele mozdul)*is olyan, hogy a rendszert az egyensúly felé vigye. Ezt pedig Le-Chatelier-Braun elvnek nevezik.

5.10.2. Fázisátalakulások

Tudjuk, hogy az ideális gáz állapotegyenlete mindenhol olyan, hogy teljesíti a stabilitási kritériumokat. Ezzel szemben a Van der Waals állapotegyenlet által adott leírás nem, ugyanis van egy olyan szakasz ahol a térfogat csökkentésével a nyomás is csökken, ezen a tartományon pedig biztosan sérül a kompresszibilitási együtthatóra kirótt kritérium.



5.5 ábra: Van der Waals gáz p-V diagramja

Az is látszik, hogy itt vannak olyan nyomás értékek, amikhez három térfogatérték tartozik. Ki szeretnénk válogatni azt, hogy melyik az amelyik tényleg megvalósul. Stabilizáljuk a gáz hőmérsékletét és csökkentsük a térfogatot*(az A pontból indulunk)*. Emiatt a nyomás is lassan változik. Minden p-T pontban arra vagyunk kíváncsiak, hogy melyik pontokban stabil a rendszer. Ezért egy olyan függvényt kell keresni, ami a p és a T változókkal ad felvilágosítást a rendszer állapotáról. Ez a Gibbs-potenciál. Az egyensúlyi állapotot tehát a Gibbs-potenciál minimuma jelenti. Tudjuk továbbá a Gibbs-Duhem relációt*(moláris mennyiségeket használunk)*:

$$-s \cdot dT + v \cdot dp + nd\mu = 0$$

Tudjuk, hogy a hőmérséklet állandó, így $dT = 0$. Vizsgáljunk egy mól gázt, ekkor

$$d\mu = v \cdot dp \Rightarrow \mu(p) = \int_{p_0}^{p} v dp' + \mu(p_0)$$

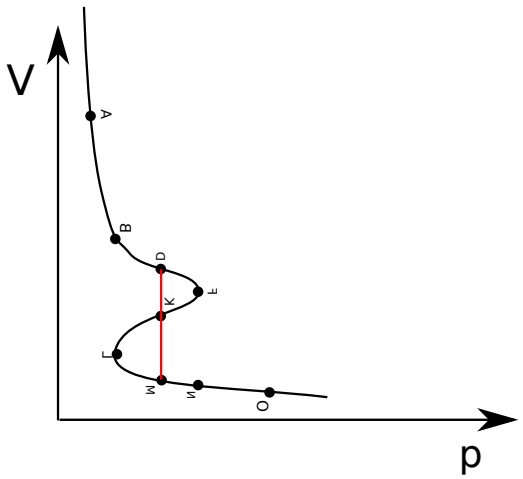
Tudjuk, hogy:

$$G = U - TS + pV = \mu n$$

valamint

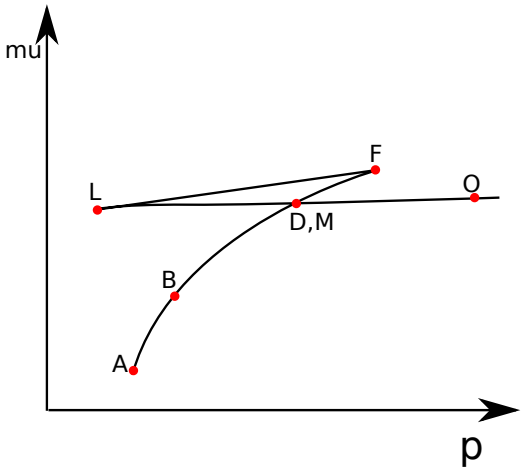
$$\mu = \frac{G}{n} = g$$

Azért fontos nekünk a kémiai potenciál, mert ez a mólszámmal megszorozva megadja a Gibbs-potenciált, pont ami nekünk kell.

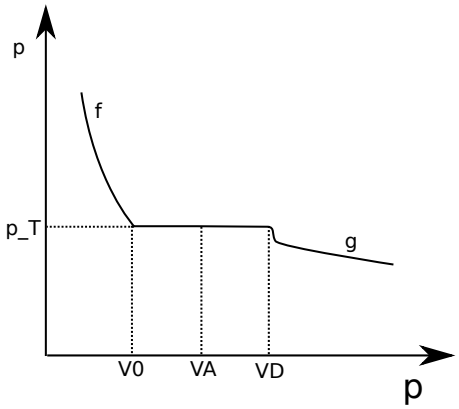


5.6 ábra: Van der Waals gáz V-p diagramja

Nézzük meg tehát, hogy hogyan változik a kémiai potenciál. Az integrálból látszik, hogy nekünk nem a p-V alatti terület kell, hanem a V-p alatti. Ez az 5.6-os ábrán látható. A következő ábra pedig a kémiai potenciál függése a p-től.



5.7 ábra: A kémiai potenciál változása



5.8 ábra: A tényleges p-V diagram

Az 5.7-es ábra jelzett pontjai megfelelnek az 5.6-os ábra jelzett pontjainak. Egyébként az 5.7-es ábra intuitíven felrajzolható az 5.6 alapján, itt is ez történt. Az A-tól az F pontig növekszik a görbe alatti terület *(kémiai potenciál)*. Ez után a görbe visszafordul, tehát a terület csökken egészen az L pont eléréséig, így a kémiai potenciál is. Ez után újra növekszik a terület, de sokkal "laposabban", mint az előző növekvő szakaszban. Az 5.7-es ábráról leolvashatók az egyensúlyi pontok: ezek azok a pontok, ahol a kémiai potenciál a lehető legalacsonyabb, hiszen ilyenkor a Gibbs-potenciál is az. Így tehát látszik, hogy a folyamat az A-B-D-M-O pontok között megy végbe, az L és az F pontok nem következnek be, mivel a D-F, F-L és az F-M szakaszokon magasabb lenne a kémiai potenciál mint lehetne, azaz itt a rendszer nincs egyensúlyban. A rendszernek valahogy hirtelen át kell kerülnie a görbe egyik "ágról" a másikra. Így tehát a pontos p-V diagram az 5.8-as ábrán látható. Természetesen az inverzet ugyan úgy megkaphatjuk mint az előbb. Ha elképzeljük az 5.8-as ábra inverzét, azt látjuk, hogy ugyan azon a nyomásértéken hirtelen lecsökken a térfogat. Mivel anyag nem tűnt el a rendszerből, ez azt jelenti, hogy jóval sűrűbb lesz az anyag, ahol már nagyon nagy nyomásváltozás kell nagyon kis térfogatváltozás eléréshez is. Ez egyezik a mindennapi tapasztalatokkal. Hiszen ha egy gázt nagyon összenyomunk, akkor az cseppfolyósodik, a folyadékokat pedig köztudottan jóval nehezebb összenyomni,

mint a gázokat. Az egyik ágon tehát gázfázisú az anyag, míg a másikon folyadék. Azt a nyomásértéket ahol a cseppfolyósodás bekövetkezik transzformációs nyomásnak nevezzük. Mikor gáz fázisból elérjük a transzformációs nyomás értékét, akkor megjelenik az első folyadékcsepp. Ez sűrűbb mint a gáz, tehát kisebb a térfogata. A kisebb térfogat miatt még több víz csepp lesz és így tovább. Ezt az állapotot átmeneti állapotnak nevezzük és amíg ebben a tartományban vagyunk, a két fázis egyensúlyban van.

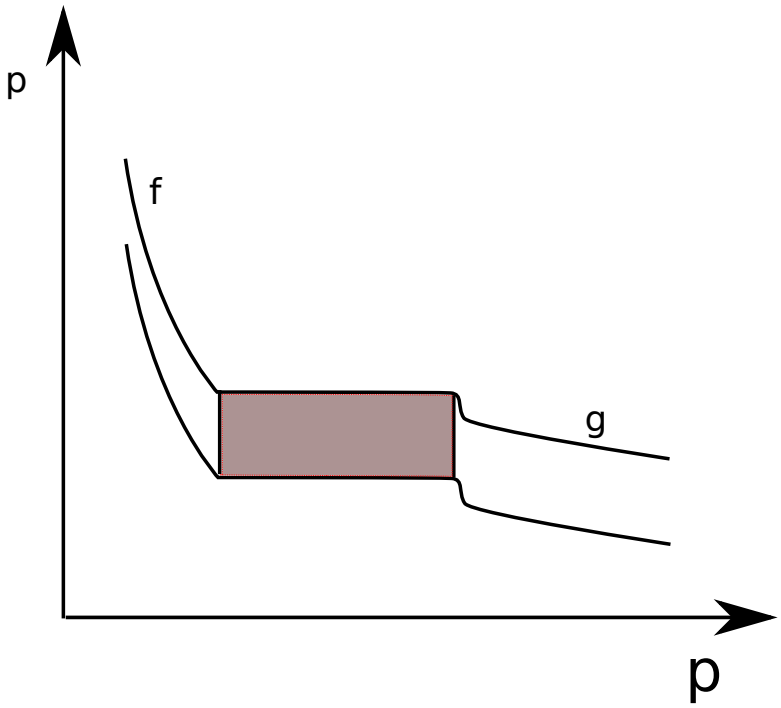
5.10.3. Clausius-Clapeyron egyenlet

Az entrópia is a térfogathoz hasonló, nem folytonos módon viselkedik.

$$ds = \left.\frac{\partial s}{\partial v}\right|_T dv$$

$$s_D - s_O = \int_O^D \left.\frac{\partial s}{\partial v}\right|_T dv$$

Az integrálban szereplő parciális derivált elég kellemetlen, jobban szeretnénk valami mást, szerencsére létezik ehhez Maxwell-reláció: $\left.\frac{\partial s}{\partial v}\right|_T = \left.\frac{\partial p}{\partial T}\right|_v$



5.9 ábra: Látens hő

Vegyünk két, egymáshoz közeli izotermát*(5.9 ábra)*. Felhasználva a Maxwell-relációt:

$$s_D - s_O = \int_O^D \left.\frac{\partial p}{\partial T}\right|_v dv$$

Amit integrálunk kell, az egy konstans érték, így látszik, hogy volt értelme kicserélni a deriváltat. Tehát

$$s_D - s_O = \left.\frac{\partial p_T}{\partial T}\right|_v \Delta v = \left.\frac{\partial p_T}{\partial T}\right|_v (v_D - v_O)$$

így osztva a térfogat megváltozásával*(p_T a transzformációs nyomás)*:

$$\frac{\Delta s}{\Delta v} = \left.\frac{\partial p_T}{\partial T}\right|_v$$

Azt látjuk, hogy egy adott térfogaton hogyan változik a hőmérséklet függvényében a transzformációs nyomás.

$$\left.\frac{\partial p_T}{\partial T}\right|_v = \frac{T\Delta s}{T\Delta v} = \frac{l_{DO}}{T\Delta v}$$

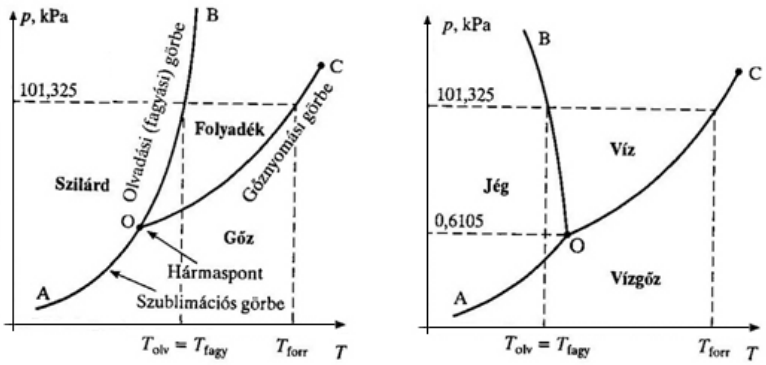
Ezt Clausius-Clapeyron egyenletnek nevezik. A $T\Delta s$ pedig az a hő, amit felvesz a rendszer, amíg az O állapotból a D-be. Ezt látens hőnek nevezik. Ez az a hőmennyiség amire egy mólnyi anyag elforralásához van szükség folyadék-gáz átmenet esetén.

5.10.4. Gibbs-féle fázisszabály, fázisdiagramok

Az anyagi rendszerek megítélése szempontjából fontos annak ismerete hogy kémiailag hány egységes anyagból, ún. komponensből épülnek fel. Pl. a cseppfolyós víz és a vele érintkező gőz 2 fázisú, de egykomponensű, heterogén rendszer: mindkét fázist ugyan az az anyag építi fel. Megállapítható, hogy

$$Sz + F = K + 2$$

Itt Sz a szabadsági fokok száma, amin azoknak az állapotjelzőknek a számát értjük, amik a rendszer egyensúlyi állapotát egyértelműen megszabják. Az F a jelen levő fázisok számát jelöli, míg K a komponensek számát.
Valami kell még a fázisdiagramokról



5.10 ábra: Fázisdiagram *(Forrás: Kovács Endre, Paripás Béla-Fizika I.)*

6. Elektro- és magnetosztatika, áramkörök(Demeter Márton)

Már az ókori görögök ismerték a dörzselektromosság jelenségkörét , így ők voltak az elektrosztatika egyik legrégebbi művelői is. Tőlük származik az "elektron" (elektromosság) elnevezés is (jelentése: borostyánkő) ezt az anyagot megdörzsölve látták, hogy könnyű tárgyakat, mint a tollpihe vagy szalmaszál magához vonz. A jelenségkör értelmezéséhez új objektumokat kell bevezetni, az anyag új tulajdonságait leíró *elektromos töltéseket* és közöttük fellépő kölcsönhatásokat, jelen esetben az *elektrosztatikus kölcsönhatást.* A matematikai leírásra a mechanikától és gravitációelmélettől eltérő megközelítésre volt szükség, a tisztességes matematikai formalizmus megszületése egészen James Clerk Maxwell leírásáig váratott magára. Akár házilag is elvégezhetünk dörzselektromos kísérleteket, csupán valamilyen műanyagok, ebonit, üvegrudak, tollpihe stb... anyagokra van szükségünk.

6.1. Kísérletek

6.1.1. Elektrosztatikus jelenségek

Az egyszerű szemléltetéshez vegyünk egy üvegrudat, és dörzsöljük meg egy bőrdarabbal, vagy egy ebonitrudat szőrmével. Azt tapasztaljuk, hogy apró tárgyakat a rudak magukhoz vonzzák majd eltaszítják.

6.1.2. Taszító és vonzó erők

Megismételjük a fent említett dörzsöléseket és megvizsgáljuk, hogy milyen kölcsönhatás van a dörzsölő és dörzsölt anyagok között. Ehhez cérnaszálra felfüggesztjük az adott anyagból készült rudakat, majd a végeihez másik megdörzsölt anyagokat közelítünk. A kölcsönhatás következtében erőhatásra lehetünk figyelmesek ami a rúd elfordulásában mutatkozik meg. Az alábbi anyagok között megfigyelt kölcsönhatások:

- üveg-üveg kölcsönhatás: taszító
- üveg-üveget dörzsölő bőr kölcsönhatás: vonzó
- ebonit-ebonit kölcsönhatás: taszító
- ebonit-ebonitot dörzsölő szőrme kölcsönhatás: vonzó
- üveg-ebonit kölcsönhatás: vonzás
- üveg-üveg kölcsönhatás: taszító
- üveg-ebonitot dörzsölő szőrme kölcsönhatás: taszítás
- ebonit-üveget dörzsölő bőr kölcsönhatás: taszító

Értelmezés: A dörzsölések az anyagot valamilyen újfajta (elektrosztatikusan töltött) állapotba hozzák, mely valamilyen fajta (elektrosztatikus) erő kifejtésére képes anyagi objektumok megjelenését eredményezi a test felületén (elektromos töltések).

A kísérleteknek megfelelően, mivel van vonzó és taszító kölcsönhatás is, pozitív illetve negatív töltéseket definiálunk (később kiderül, hogy ezek a proton és elektron)

Megállapodás, hogy a bőrrel dörzsölt üvegrúdon megjelenő töltés a pozitív, a szőrmével dörzsölt ebonit a negatív.

A testek "alapállapotukban" elektromosan semlegesek (általában), mivel feltételezhetően rajtuk a pozitív és negatív töltések eloszlása homogén és egyenletes, így a dörzsölés nélkül nem is hatnak kölcsön elektromosan. Így ha dörzsölünk egy testet "szétválasztjuk" a töltéseket, így egyfajta polarizáció jön létre az anyagban, és a test felszínén több pozitív vagy negatív töltés lesz, mely aztán kölcsön tud hatni más anyagok felszínén létrejött töltésmintázattal.

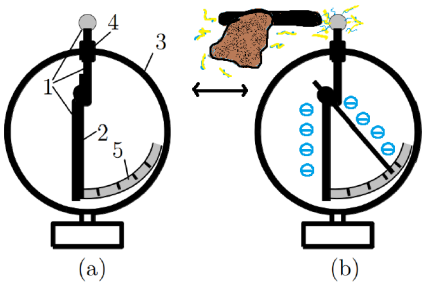
További részletesebb kísérletezés és mérések után felismernénk a töltésmegmaradás jelenségét is, tehát nem tudunk csak úgy a semmiből töltést létrehozni, ez az anyaghoz kötött tulajdonság és később a kontinuitás egyenletben teljesedik ki matematikailag , amely az egyik fő eleme az elektrodinamikának és sztatikának is.

A kísérletek során az is felmerülhet bennünk, hogy mi az oka a dörzselektromos jelenségeknek. Ez az elektromos megosztás jelensége, illetve az adott anyagra jellemző elektronvonzó képesség, melyet legegyszerűbben elektroszkópos kísérletekkel lehet szemléltetni.

6.1.3. Elektroszkópok, vezetés és a töltésmegosztás jelensége

Az elektroszkópok/méterek egyszerű berendezések, melyek az elektromos töltések jelenlétét és többé-kevésbé pontosan a mennyiségét is jelzik. Míg az elektroszkópok egyszerűen fonálra felfüggesztett bodzabél golyócskák, vagy alumínium lemezek, az elektrométerek komolyabb berendezések, a 6.1-es ábrán láthatjuk milyen részekből áll egy ilyen berendezés:

Ezek lényegében egy fémvázból (1) és a hozzá vízszintes tengellyel csatlakozó, mutatóként működő, vékony fémrúdból (2) állnak. Az eszközt a zavaró külső hatások kiküszöbölése érdekében egy fém házban (3) helyezik el, amelyet a fémváztól elszigetelnek (4). Az elektroszkóp töltetlen állapotban a (2) mutató függőlegesen lóg (6.1 (a) ábra). Ha a fémváz tetején lévő félgömbre töltéseket viszünk fel, akkor az (1) fémváz és a (2) mutató ugyanolyan előjelű töltéseket kap, így köztük taszítás lép fel. Ennek következtében a mutató eltávolodik a fémváztól, elfordul a tengelye körül, és jelzi a töltés jelenlétét (6.1 (b) ábra). A mutató kitérését egy mögötte elhelyezett skálán (5) leolvashatjuk, így az eszköz a felvitt a töltés nagyságát is jelzi. http://fizipedia.bme.hu/index.php/F



6.1 ábra Az elektrométer felépítése

6.1.4. Vezetés

Ha elvégezzük azt a kísérletet, hogy feltöltjük az egyik elektrométert, majd a töltött és töltetlen elektrométert összekötjük egy vezető szállal, akkor hirtelen az eredetileg töltetlen elektrométer mutatója kilendül, tehát töltések "vándoroltak" át az egyik műszerről a másikra. Így hasonló kísérletezéssel megkülönböztethetünk vezető illetve szigetelő anyagokat, mivel ha pl.: fémszállal kötjük össze a két elektrométert a töltések valóban áttudnak menni a másik "gömbre", míg ha szigetelő anyagokkal kötjük össze pl.: üvegszál nem tapasztalnánk vagy csak nagyon gyengén a jelenséget. A szigetelőkön könnyen lehet így töltéseket felhalmozni, mivel azok nem vezetődnek el a szétválasztás után (kondenzátorok és dielektrikumok később).

6.1.5. Töltésmegosztás

Két töltetlen elektrométert helyezünk el egymás mellett, összekötjük őket egy vezető szállal és az egyikhez töltött üvegrudat közelítünk. Ekkor mindkét műszer töltést mutat, majd ha eltávolítjuk a rudat akkor eltűnik az elektrométerről a töltés, a mutató visszaesik alapállapotába.

Magyarázat: A vezetőkben a töltések könnyen elmozdulhatnak (valencia elektronok) , a teljes rendszerben (2 elektrométer és a vezetőszál) a pozitív töltéssel rendelkező üvegrúd töltésszétválást eredményez, tehát az üvegrúdhoz közeli részén a rendszernek negatív töltések halmozódnak fel a távolabbin pedig pozitívak. Majd ha eltávolítjuk a rudat, a töltésmintázat visszaáll eredeti semleges állapotában. Így meglehet állapítani a töltések előjelét is, hiszen ha az elektrométert ismert előjelű töltéssel látjuk el és közelítjük a műszerhez az ismeretlen előjelű töltéssel ellátott objektumot, a mutató pozitív vagy negatív kitérése alapján azonosíthatjuk az ismeretlen töltés előjelét.

6.2. Coulomb- és Gauss törvény, szuperpozíció elve, stacionárius áram

6.2.1. Coulomb törvény

Az elektrosztatikus kölcsönhatás első számszerűsítő és matematikailag leírható kísérletét Charles-Augustin Coulomb dolgozta ki a 18.sz-ban. A kísérleti elrendezés kísértetiesen hasonlít Lord Henry Cavendish elrendezéséhez. A mérés lelke egy igen érzékeny torziós mérleg volt, mely egy igen vékony rugalmas szálra volt erősítve. Akár egy súlyzó a madzagról lelógó rúd két végén egy egy azonos méretű fémgömb volt, a súlyzó tömegközéppontjánál volt felfüggesztve. Ha az egyik gömbre valamilyen erőhatás hat, akkor a "súlyzó" elfordul, ez a szögelfordulással arányos visszatérítő nyomatékot ébreszt a szálban , így ebből mérhetővé válik az egyébként igen kis erőhatás is a torziós szál elfordulásából.

A kísérlet elrendezését pontosabban a 6.2-es ábra mutatja. Az ábrán láthatjuk, hogy a kísérlet kicsit modernizált a könnyebb és pontosabb mérés érdekében az elmozdulást lézerrel mérjük. A "zaj" kiszűréséhez csillapítást alkalmazunk a rendszeren, célszerűen nem túl nagyot, hogy ne kelljen annyi töltést felvinni a gömbre. Ha feltöltjük a képen látható, állványon rögzített gömböt + Q töltéssel és a "súlyzó" egyik végén lógó gömböt + q-val és közelítjük egymáshoz r távolságba , akkor azt tapasztaljuk, hogy a torziós szál elfordul és beáll az erőhatásnak megfelelően egy egyensúlyi helyzet. Az új egyensúlyi helyzet jellemezhető a lézer a műszertől L távolságra elhelyezett ernyőn megtett távolságával ami l. Azt is meglehet figyelni, hogy az erőhatás függ a két golyóbis távolságától $(1/r^2 - el)$ és a töltések nagyságától (qQ) így az erő felírható ilyen alakban:

$$F \simeq \frac{qQ}{r^2}$$

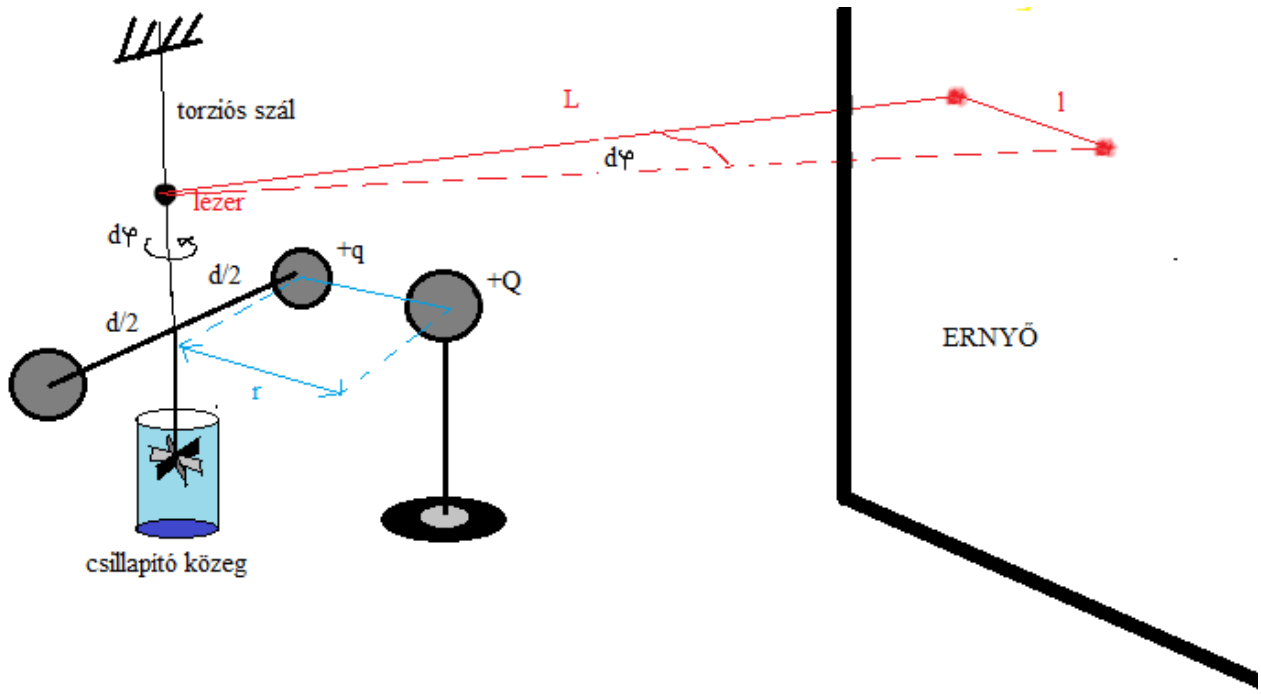
Szigorú értelemben persze ez csak akkor igaz, ha a töltések pontszerűek, kiterjedt golyók esetében a töltésmegosztás miatt módosulhat az erőhatás.

Tehát kell legyen egy arányossági tényező, legyen ez most k, a Cuolomb állandó.

$$F = k\frac{qQ}{r^2}$$

Vektoriális alakban:

$$\mathbf{F_{12}} = k \cdot \frac{qQ}{r^2}\frac{\mathbf{r_2} - \mathbf{r_1}}{|\mathbf{r_2} - \mathbf{r_1}|}$$



6.2 ábra A Coulomb kísérlet

Ha ismerjük a torziós szál mechanikai tulajdonságát (torziós együtthatóját D^*), a d "súlyzóhosszt" és a fenti erőtörvényt, a forgatónyomatékok felírásával kiszámolhatjuk a k együtthatót:

$$M_{sulyzo} = F \cdot d/2 = M_{torziosszal} = D^* \cdot \varphi$$

$$F = 2 \cdot \frac{D^* \cdot \varphi}{d}$$

$$k = F \cdot \frac{r^2}{qQ}$$

$$k = 2 \cdot \frac{D^* \cdot \varphi}{d} \cdot \frac{r^2}{qQ}$$

Ha kiszámoljuk egy viszonylag nagy értéket kapunk k-ra:

$$k = 9 \cdot 10^9 \frac{N * m^2}{C^2}$$

Ahol C a Coulomb mértékegység, melyre az a definíció, hogy két egymástól 1m távolságban elhelyezkedő 1C töltéssel rendelkező test között $F = 9 \cdot 10^9 N$ erő lép fel. Ez az SI mértékegység. CGS-ben k önkényesen 1-nek választott amiből következően az elektromos töltés egysége $1g^{1/2}cm^{3/2}s^{-1}$. A k állandó továbbá felírható egy új jelöléssel, melyet gyakrabban használunk:

$$k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$$

ahol $\epsilon_0 = 8.885 \cdot 10^{-12} C^2/Nm^2$ a vákuum dielektromos állandója.

6.2.2. Elektromos térerősség és a szuperpozíció elve

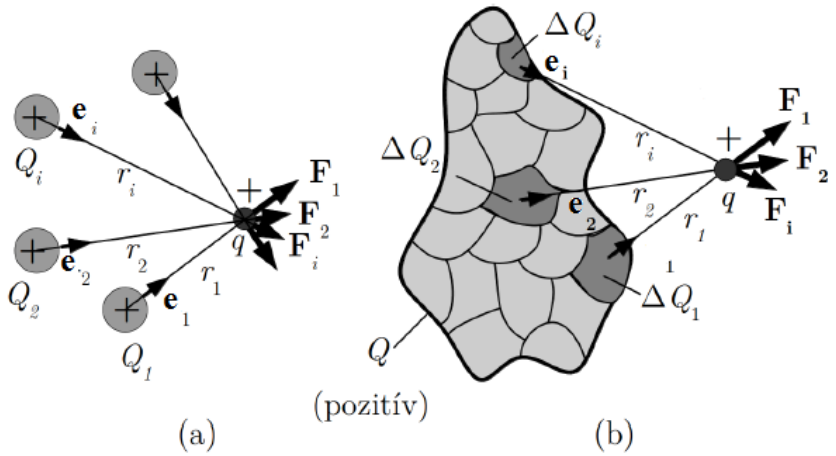
Ha egy q ponttöltés környezetében bárhol elhelyezünk egy másikat, akkor arra a Coulomb-törvénynek megfelelő erő fog hatni. Ezt fel lehet úgy is fogni, hogy a ponttöltés körül kialakul egy elektromos erőtér. Ezt próbatöltéssel könnyen megfigyelhetjük, vagy akár az erővonal mintázatát fémreszelékes kísérletekkel kirajzolhatjuk. A problémakör matematizálásához a legegyszerűbb ha definiálunk egy vektorteret, melyet az erőtér esetében egy $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ vektor-vektor függvény fog nekünk "létrehozni", így a tér minden pontjában értelmezett egy $\mathbf{r}$ helyvektorral jellemzett $\mathbf{F}$ erő fog hatni. A teret jellemezhetjük az ún.: elektromos térerősségel is mely definíció szerint

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) := \frac{\mathbf{F}(\mathbf{r})}{q}$$

Ez azért jobb mennyiség , mivel csak az erőteret létrehozó töltés nagyságától és a vizsgált pont helytől függ. Sajnos ez csak egyetlen ponttöltés terének leírására alkalmas, ha több töltés által létrehozott teret akarjuk vizsgálni, segítségül kell hívni a *szuperpozíció* elvét. Az elv kimondja, hogy a kiválasztott q mérőtöltésre az egyes töltések által kifejtett erőt nem befolyásolja a többi töltés jelenléte, vagyis minden egyes erő úgy számítható, mintha a többi töltés ott sem lenne. Így a q töltésre ható eredő erő az összes erő vektoriális összege lesz (a Maxwell egyenletek linearitásában fontos szerepe van).

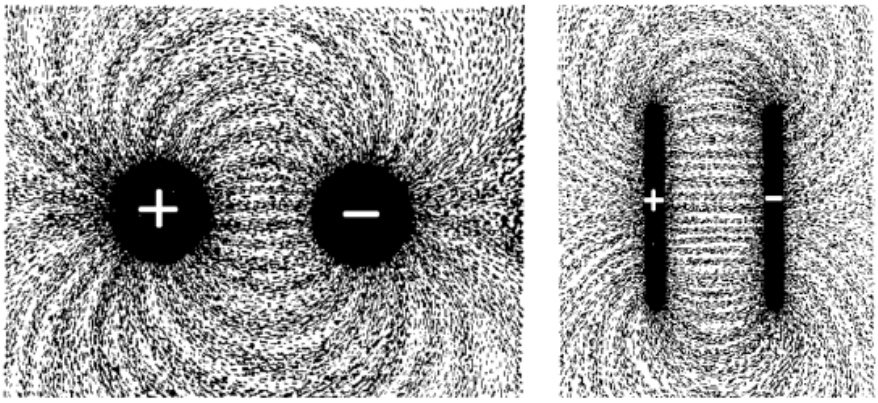
$$\mathbf{F_e} = \sum_{k=1}^{N} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Q_i}{r_i^2} \cdot \mathbf{e_i}$$

Ahol $\mathbf{e_i}$ az i-ik töltésből a próbatöltés felé mutató egységvektor lásd 6.3 (a) ábra .



6.3 ábra A szuperpozíció elve

Az 6.3 (b) ábráján azt szemlélteti, hogy ha egy amorf testünk van feltöltve, akkor is alkalmazható a szuperpozíció, csak a testet fel kell osztani infinitezimálisan kicsi térfogatelemere és az ezekben lévő töltéseket kell összegezni. Fontos megemlíteni, hogy a régebbi ún.: *távolhatás elmélete* megbukik, mivel kiderül kísérletezésekből és az elméletből is, hogy a kölcsönhatást a töltések között a tér maga közvetíti, hiszen a mostani térerősség definíciónkkal felfoghatjuk két töltés kölcsönhatását úgy is , hogy az egyik körül létrejön az elektromos tér és ez a tér hat a másik töltésre. A tapasztalat azt mutatja, hogy a *közelhatás* elmélete győz, mivel kimutatható, hogy a kölcsönhatás először rövidebb távolságokban jelentkezik és aztán "terjed" tovább véges sebességgel.



6.4 ábra Tipikus erővonalképek daraszemcsékkel

6.2.3. Az elektrosztatikus erőtér fluxusa

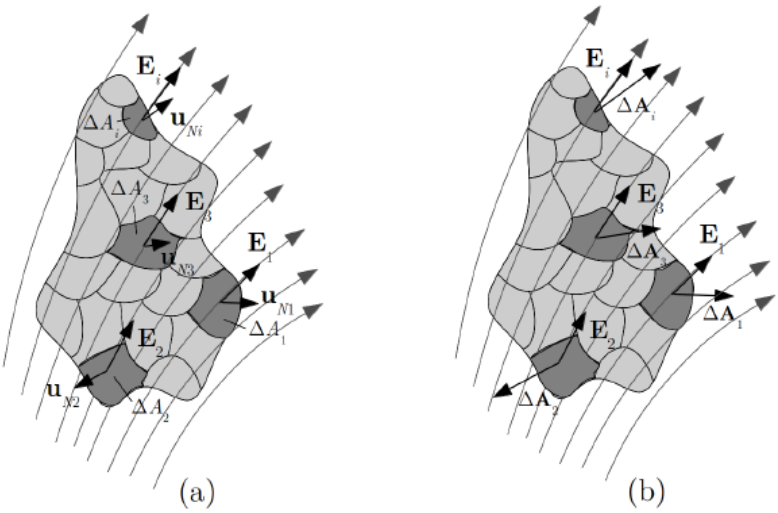
Célszerű bevezetni egy újabb mennyiséget, mely az adott felületen átmenő erővonalak sűrűségét jellemzi. Ez a mennyiség a fluxus. Az egyszerűség kedvéért először vegyünk homogén elektromos teret, ahol a felületet az erővonalak merőlegesen metszik. Ilyenkor egyszerűen számítható a fluxus, mégpedig

$$\Phi_E^A = E \cdot A$$

ahol az alsó és felső index arra utal, hogy a elektromos erőtér fluxusáról beszélünk egy A felületen. Dimenziója: Nm^2/C . Könnyű elképzelni, hogy mi van, ha az erővonalak irányához képest elforgatjuk a felületet, akkor hogyan módosul a fluxus, természetesen egész egyszerűen csak kap egy $\cos\alpha$ korrekciót. Általánosan elképzelhetjük, hogy ha van egy amorf test, melyen "átfolynak" az erővonalak, akkor itt is , mint a szuperpozíciónál, feloszthatjuk a testet kis elemi felületelemekre ahol a térerősség már hozzávetőleg állandónak tekinthető és a rajta keresztülhaladó erővonal(ak) merőlegesek, így megadhatóak egy felületelem vektor segítségével($\Delta A_i \cdot \mathbf{e_i} = \mathbf{\Delta f_i}$). Így a fluxus a teljes "krumplira":

$$\Phi_{\mathbf{E}}^{A_i} = \mathbf{E_i} \cdot \mathbf{\Delta f_i}$$

$$\sum_{i=1}^{N} \Phi_{\mathbf{E}}^{A_i} = \Phi_{\mathbf{E}}^{A} = \sum_{i=1}^{N} \mathbf{E_i} \cdot \mathbf{\Delta f_i}$$



6.5 ábra A fluxus számolása felületelemekkel (az ábrán u_i a szövegben e_i)

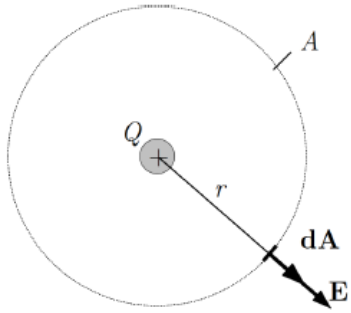
Ha a felületelemekkel ténylegesen tartunk a 0-hoz, akkor átírható a szummás kifejezés integrális alakban:

$$\Phi_E^A = \lim_{\Delta A_i \longrightarrow 0} \sum_{i=1}^{N} \mathbf{E_i} \cdot \mathbf{\Delta f_i} = \int_A \mathbf{E} d\mathbf{A}$$

Ez egy ún.: felületi integrál, számításának módszereivel a vektoranalízis foglalkozik, egyik legfontosabb tétel, melyet még sokszor fogunk használni az ún.: Gauss-tétel.
A tétel kimondja, hogy egy reguláris egyszeresen összefüggő vektortér zárt felületre vett integrálja megegyezik, a vektortér divergenciájának a felület által bezárt térfogatra vett integráljával. (**itt lehet bizonyítást is nyomni de nem érzem jelentőségét**)

Nézzük meg, hogy egy ponttöltés által keltett erőtérben egy r sugarú gömbfelületen (melynek középpontja a Q ponttöltés) mekkora a fluxus(6.6 ábra). Mivel gömbszimmetrikus a probléma, a térerősségvonalak és a felületelem vonalak minden pontban párhuzamosak egymásra. Így a skaláris szorzat $\mathbf{E}d\mathbf{A} = EdA$. E mellett a gömbfelület minden pontjában ugyanakkora a térerősség, így E kiemelhető az integrálás elé így a fluxus:

$$\Phi_E^{sphere} = \oint_A \mathbf{E} d\mathbf{A} = \oint_A EdA = E \oint_A dA = E4r^2\pi$$



6.6 ábra Ponttöltés tere

Mivel a gömbfelület felületelemeinek összege, maga a gömbfelület.
Végül beírva a térerősség értékét a kifejezésben $E = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Q}{r^2}$:

$$\Phi_E^{sphere} = \oint_A \mathbf{E} d\mathbf{A} = \oint_A EdA = E \oint_A dA = E4r^2\pi = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Q}{r^2}4r^2\pi = \frac{Q}{\epsilon_0}$$

Így tehát a vártnak megfelelően ebben a speciális esetben, a zárt felületre vett fluxus nagysága arányos a töltés nagyságával. Ez az összefüggés tetszőleges alakú, a ponttöltést körülvevő felület esetén érvényes!
Ha több ponttöltés van, akkor az egyes ponttöltések által keltett tér fluxusai összeadódnak. Ilyenkor a fenti képlet csupán ennyiben módosul:

$$\oint_A \mathbf{E} d\mathbf{A} = \frac{\sum Q}{\epsilon_0}$$

Ez tetszőleges zárt felületre és töltéseloszlásra igaz! Ez az elektrosztatika II. vagy Gauss-törvénye. Ez tulajdonképpen azt jelenti, hogy elektrosztatikus erőtérben az erővonalak töltéseken kezdődnek és végződnek, kezdő és végpontjuk között pedig folytonos vonalak haladnak.

Definiálhatjuk a térfogati töltéssűrűséget is, mely hasonló megfontolásokkal mint az előzőekben a testet elemi térfogati cellákra osztva, a teljes töltés megadható ilyen alakban: $\rho \sim \frac{\Delta Q}{\Delta V}$

$$\rho = \lim_{\Delta V \longrightarrow 0} \frac{\Delta Q}{\Delta V} = \frac{dQ}{dV}$$

$$Q = \lim_{\Delta V_i \longrightarrow 0} \sum_{i=1}^{N} \rho_i \cdot dV = \int_V \rho dV$$

Kifejezve a kettőt egymással a Gauss-tétel segítségével:

$$\oint_A \mathbf{E} d\mathbf{A} = \frac{1}{\epsilon_0} \int_V \rho dV$$

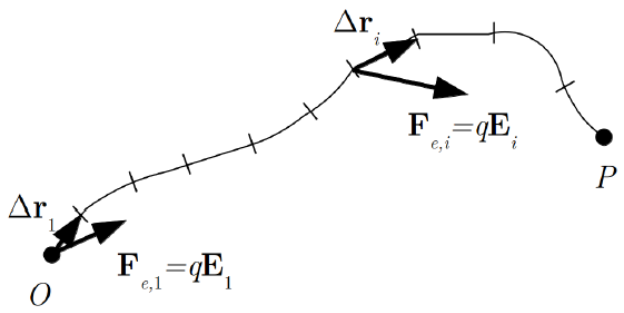
És így meg is született az első Maxwell egyenletünk, melynek differenciális alakja (átrendezve a fenti egyenlőséget 0-ra és kihasználva a Gauss-tételt):

$$div\mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}$$

Ez szemléletesen azt mondja ki, hogy az elektromos erőtér forrásai a töltések.

6.2.4. Ponttöltés munkája elektrosztatikus térben, elektromos potenciál

Mint a mechanikában is a gravitációs erőtérben itt, az elektrosztatikusban is hasonló módon bevezethetjük a helyzeti energia fogalmát, hiszen mindkét erőtér konzervatív. Azt, hogy az elektrosztatikus tér is konzervatív tapasztalati úton dönthetjük el. A helyzeti energiát itt is a mechanikában már megszokott módon vezethetjük be, az erőtér által végzett munka segítségével. Mivel az erőtér konzervatív , ezért a végzett munka csupán a kezdő és végpontoktól függ, a pályától nem, de tisztességesen egy vonal-integrállal írhatjuk le, melyet a 6.7-es ábra szemléltet nekünk.



6.7 ábra Vonalintegrál, az elektromos erőtér munkavégzésének szemléltetése

Elektromos erőtérben egy q töltésnek O ponttól P pontba történő tetszőleges pályán történő mozgása során az erőtér által végzett munka:

$$W_{eroter} = \lim_{\Delta\mathbf{r_i} \longrightarrow 0} \sum_i \mathbf{F_{e,i}} \Delta\mathbf{r_i} = \int_O^P \mathbf{F_{e,i}} d\mathbf{r} = \int_O^P q\mathbf{E} d\mathbf{r}$$

A helyzeti energia definíciójának megfelelően az erőtérben lévő q ponttöltés helyzeti (potenciális) energiája P pontban, az O pontra vonatkozóan:

$$E_h^O(P) = -W_{eroter} = -q \int_O^P \mathbf{E} d\mathbf{r}$$

Míg a pályától nem, de természetesen a vonatkoztatási ponttól függ a helyzeti energia mértéke. A q töltés potenciális energiája nem csak a vonatkoztatási ponttól és az erőtértől, hanem természetesen a q töltés nagyságától is függ. Így ha ezt leosztjuk a töltéssel, attól független mennyiséget kaphatunk:

$$U_h^O(P) = U_{OP} = \frac{E_h^O(P)}{q} = -\int_O^P \mathbf{E} d\mathbf{r}$$

Ez már csak az erőtértől és a P pontnak az O ponttól vett helyzetétől függ. Így ezzel az eljárással a tér bármely P pontjához hozzárendelhetünk egy számot (skalárt amely az egységnyi töltésen az OP elmozdulás során végzett munka mértéke), amelyet *az elektrosztatikus erőtér P pontbeli potenciáljának* nevezzük. Ilyen módon kapunk egy skalármezőt, mely egy újabb módja a tér jellemzésének az $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ vektorterünk mellett. A potenciál egysége definíció szerint: $1\ \frac{J}{C} = 1V$ ez a *volt*.

A potenciál mint minden helyzeti energia típusú mennyiség függ a vonatkoztatási ponttól, de ez nem okoz gondot fizikában, mivel általában annak megváltozására vagyunk kíváncsiak, ami már nem függ a vonatkoztatási ponttól. Nézzük is meg ezt az állítást közelebbről: Két pont között a potenciálkülönbséget úgy kaphatjuk meg, hogy meghatározzuk az egyes pontokban a közös vonatkoztatási pontokhoz viszonyított potenciált, majd kiszámoljuk ezek különbségét, amelyet szemléltet a 6.8-as ábra. B pontnak az A-hoz viszonyított U_{AB} potenciálkülönbségét az:

$$U_{AB} = U_{OB_{(1)}} - U_{OA} = U_{OB_{(2)}} - U_{OA}$$

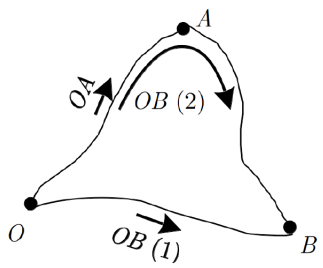
képlet adja meg, illetve a potenciál definíciójának felhasználásával kapott

$$U_{AB} = -\left(\int_O^A \mathbf{E}d\mathbf{r} + \int_A^B \mathbf{E}d\mathbf{r}\right) - \left(\int_A^O \mathbf{E}d\mathbf{r}\right) = -\int_O^A \mathbf{E}d\mathbf{r} - \int_A^B \mathbf{E}d\mathbf{r} + \int_O^A \mathbf{E}d\mathbf{r} = -\int_A^B \mathbf{E}d\mathbf{r}$$

összefüggés adja meg. Így az elemi $d\mathbf{r}$ elmozdulás kezdő és végpontja közti potenciálkülönbséget a

$$dU = -\mathbf{E}d\mathbf{r}$$

skaláris szorzat adja meg.



6.7 ábra Vonalintegrál, az elektromos erőtér munkavégzésének szemléltetése

6.2.5. Az elektrosztatika I. alaptörvénye

A fentiekből eljutottunk az elektrosztatika I. alaptörvényéhez, mely kimondja, hogy egy G zárt görbén végighaladva elektrosztatikus erőtérben a végzett munka zérus.

$$q\oint_G \mathbf{E}d\mathbf{r} = 0$$

Ebből triviálisan következik, hogy a potenciálkülönbségek összege a görbe mentén is zérus. Ez csupán egy újabb leírása annak, hoyg egy konzervatív erőtérrel van dolgunk. Ebből az egyszerű törvényből a tér szerkezetébe is betekintést nyerhetünk. Az egyik dolog, hogy az erővonalak nem lehetnek akármilyenek, például nem lehetnek önmagukban záródóak, mivel ha ez létrejöhetne akkor egy ilyen erővonalon véve a teljes zárt görbére a körintegrál értéke 0-tól különböző lenne. Ennek az az oka, hogy ilyenkor a térerősség és az elmozdulás görbe minden pontján egyirányú vagy ellentétes egymással, ezért az $\mathbf{E}d\mathbf{r}$ elemi skaláris szorzatok vagy mind negatívak vagy mind pozitívak így értékük nem lehet 0.

Ha már fentebb bevezettünk egy híres vektoranalitikai összefüggést, itt sem fukarkodunk vele, ezt a törvényt átírhatjuk az ún.: Stokes törvény segítségével, mely kimondja, hogy egy reguláris egyszeresen összefüggő vektortér zárt görbére vett vonalintegrálja megegyezik a vektortét rotációjának a görbe által körbezárt felületre vett integráljával.

$$q\oint_G \mathbf{E}d\mathbf{r} = \int_A rot\mathbf{E}d\mathbf{A}$$

ebből következik, hogy:

$$\int_A rot\mathbf{E}d\mathbf{A} = 0$$

tehát:

$$rot\mathbf{E} = 0$$

Amely egy újabb Maxwell egyenlet, csupán annak az elektrosztatikában használt alakjában.

6.2.6. Ponttöltés potenciálja

Itt inkább csak közlöm az eredményeket, mivel nagyon alap cuccok, könnyen integrálhatóak stb...

Q Ponttöltés r_0 viszonyítási pontból r-be "mozgatott" potenciálja:

$$U^{r_0}(r) = -\int_{r_0}^{r} \mathbf{E} d\mathbf{r} = -\frac{Q}{4\pi\epsilon_0}\int_{r_0}^{r} \frac{1}{r^2} d\mathbf{r} = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{1}{r} - \frac{1}{r_0}\right)$$

Ha a vonatkoztatási pontot gondolatban a végtelenbe helyezzük a gyakrabban használt képlethez jutunk:

$$U^{\infty}(r) = -U(r) = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}$$

Általánosan két tetszőleges r_1 és r_2 pontok között:

$$\Delta U_{12} = U(12) = U(r_2) - U(r_1) = U_{12} = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{1}{r_2} - \frac{1}{r_1}\right)$$

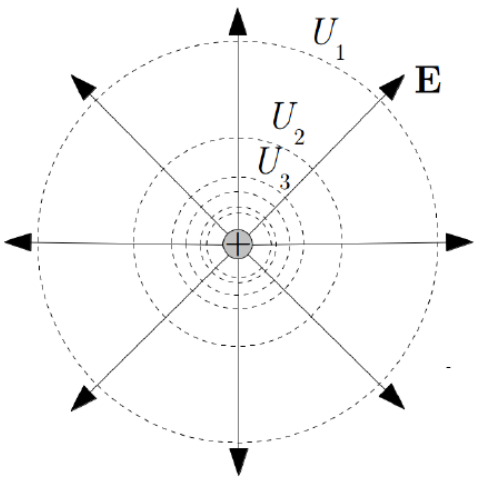
Ez a várakozásnak megfelelően nem is függ a vonatkoztatási pont megválasztásától. Gyakran hasznos ha ismerjük a térbeli potenciálviszonyokat, azaz, hogy merre milyen ütemben változik a potenciál. Ezt szemléletesen megtehetjük az ún. *ekvipotenciális felületek* berajzolásával, (melyek a potenciál definíciójából adódóan a térerősségvonalakra merőlegesek).

Taylor sorfejtés:

$$\Phi(\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{r}) + grad\Phi(\mathbf{r})\Delta\mathbf{r}$$

ebből látszik, hogy ha $\Phi(\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{r})$ akkor a skaláris szorzatnak 0-nak kell lenni amely akkor lehetséges a definíció értelmében, ha a közbezárt szög a gradiens és az elmozdulás vektor között 90 fok.

Hasonló ábrát kapunk, mint a térképeken látott vonalas ábrák, melyek az egyenlő magasságú (z tengely szerinti ekvidisztális) vonalak és az általuk határolt felületek. Ponttöltés esetében ezek gömbhéjak lesznek, melyet a 6.8-as ábra érzékeltet.



6.8 ábra Ponttöltés esetén az ekvipotenciális vonalak szemléltetése

Feltételezve, hogy a szuperpozíció elve itt is érvényes, felírhatjuk P pontban tetszőleges számú töltés potenciálját is:

$$U_P = \sum_i U_i(P) = \sum_i \frac{Q_i}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r_i}$$

6.2.7. Folytonos töltéseloszlás potenciálja

Egy V térfogatban folytonosan eloszló töltés potenciálját a Gauss törvény ismertetésénél megismert módon , a töltésnek pontszerű részekre történő osztásával kaphatjuk meg. Ha a ρ térfogati töltéssűrűséget mindenütt ismerjük, akkor egy P pont körül felvett elemi dV térfogatban lévő töltést ki tudjuk számolni a $dQ = \rho dV$ összefüggéssel. A szuperpozíció elvének értelmében a pontszerűnek tekintett elemi töltések által létrehozott potenciál:

$$U(P) = \int_V \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\rho dV}{r}$$

ahol r a dV térfogatelem távolsága a P ponttól. Hasonlóan járunk el ha felületi töltéseloszlásunk van, ezt most nem is részletezném: $\sigma \approx \frac{\Delta Q}{\Delta A}$ ha a felülettel tartunk a 0-hoz akkor megkapjuk határértékben az adott pontban lévő felületi töltéssűrűséget. Ez egy előjeles mennyiség, függ ugyanis a töltés előjelétől is! Ha az A felületet elemi dA részekre osztjuk, akkor az egyes felületelemeken lévő, pontszerűnek tekinthető töltés: $dQ = \sigma dA$ így a felületen lévő töltés által okozott potenciál egy P pontban:

$$U(P) = \int_A \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\sigma dA}{r}$$

6.2.8. Az elektromos térerősség és a potenciál kapcsolata

Hasonlóan mint a mechanikában , itt is van egy egyszerű kapcsolat a térerősség és a potenciál között. Ha az elektromos erőtérben egy q töltés helyzeti energiája csak az x-koordináta függvénye, akkor igaz:

$$dE_h(x) = -F_{ex}dx$$

átrendezve

$$F_{ex} = \frac{dE_h(x)}{dx}$$

Mivel a töltésre ható erő x komponense elektromos erőtérben $F_x = qE_x$, a fenti összefüggésből a térerősség is megkapható:

$$E_x = -\frac{1}{q}\frac{dE_h(x)}{dx} = -\frac{d}{dx}\frac{E_h(x)}{q} = -\frac{dU(x)}{dx}$$

Magasabb dimenzióban is általánosítva $(U(x,y,z), dr(dx,dy,dz))$

$$dU(x,y,z) = \frac{\partial U(x,y,z)}{\partial x} + \frac{\partial U(x,y,z)}{\partial y} + \frac{\partial U(x,y,z)}{\partial z}$$

Ezt kifejezve a térerősséggel:

$$dU(x,y,z) = -\mathbf{E}d\mathbf{r} = -(E_x dx + E_y dy + E_z dz)$$

Ebből kapjuk az elektromos erőtér komponenseit:

$$E_x = -\frac{\partial U(x,y,z)}{\partial x}$$

$$E_y = -\frac{\partial U(x,y,z)}{\partial y}$$

$$E_z = -\frac{\partial U(x,y,z)}{\partial z}$$

tehát

$$\mathbf{E} = -\left(\frac{\partial U(x,y,z)}{\partial x}\mathbf{i} + \frac{\partial U(x,y,z)}{\partial y}\mathbf{j} + \frac{\partial U(x,y,z)}{\partial z}\mathbf{k}\right)$$

Mely nem más mint a méltán híres összefüggés:

$$\mathbf{E} = -gradU$$

6.2.9. Gömbszimmetrikus töltéseloszlások tere

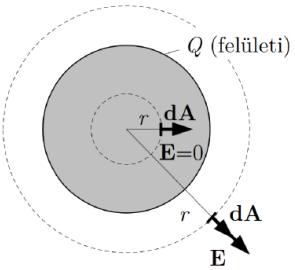
Korábban a fluxus tárgyalásakor láttuk, hogy milyen egy iylen töltéseloszlás tere:

$$\Phi_E^{sphere} = \oint_A \mathbf{E}d\mathbf{A} = \oint_A EdA = E\oint_A dA = E4r^2\pi$$

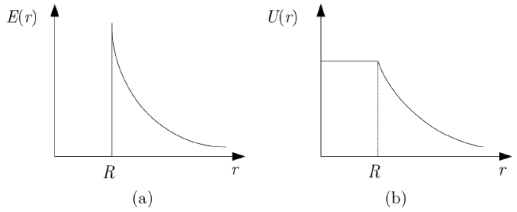
Beírva a térerősség értékét a kifejezésbe $E = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Q}{r^2}$:

$$\Phi_E^{sphere} = \oint_A \mathbf{E}d\mathbf{A} = \oint_A EdA = E\oint_A dA = E4r^2\pi = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Q}{r^2}4r^2\pi = \frac{Q}{\epsilon_0}$$

Egy feltöltött vezető gömb tere is ilyen, mivel a töltéseloszlás gömbszimmetrikus, a tér is az, tehát a térerősség nagysága a felvett gömbfelület minden pontjában azonos, és sugárirányban kifelé mutat (pozitív a töltés). Így a felületen mindenütt $\mathbf{E}||d\mathbf{A}$ és E=áll., ezért az elektrosztatika II. törvénye értelmében egyszerűen úgy írható mint fentebb írtuk. Most viszont vizsgáljuk meg a töltéseloszlás terét a gömbön belül és kívül is! A töltött



(a) 6.9 ábra Feltöltött vezető gömb terének meghatározása

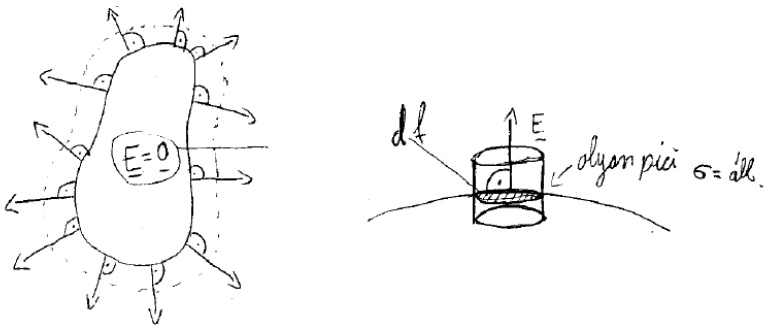


(b) 6.10 ábra A térerősség(a) és a potenciál(b) távolságfüggése

gömbön belül nincs töltés (felületen van), így ott egy zárt felület által bezárt töltés Q=0, a gömbön kívül felvett zárt felület által bezárt töltés Q. Így a töltött gömb tere:

$$E = \begin{cases} 0 \in r < R \\ \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Q}{r^2} \in r > R \end{cases}$$

tehát ha a gömbön belül vagyunk, nincs tér , kívül pedig olyan mintha a vezető gömb belsejében, középen lenne egy ponttöltés. A térerősség távolságfüggését ebben az összeállításban a 6.10-es ábra mutatja.
Tegyük fel, hogy valamennyi töltést juttatunk a fém felületére. A töltéselrendeződés elképzelhetetlenül hamar végbemegy(nanoszekundumok) így kialakul egy töltésmintázat a fém felületén úgy, hogy a felületre merőleges legyen a térerősség. Így a fém felülete *ekvipotenciális* felület lesz. Ennek a segítségével kiszámolhatjuk a felületi töltéssűrűséget



6.11 ábra Felületi töltéssűrűség számítása

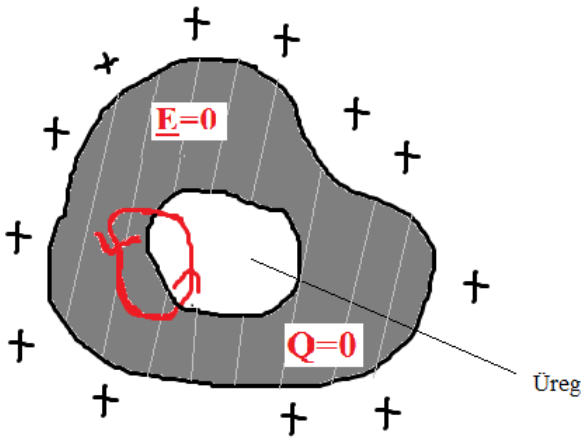
$\sigma = \frac{dQ}{df}$ egy iylen elrendezés esetén:

$$0 = \oint_{kishenger} \mathbf{E}d\mathbf{f} = \frac{1}{\epsilon_0}\sum Q = \frac{1}{\epsilon_0}\sigma df = \int_{alap} \mathbf{E}d\mathbf{f} + \int_{fedo} \mathbf{E}d\mathbf{f} + \int_{palast} \mathbf{E}d\mathbf{f}$$

A paláston az integrál értéke 0 , mivel az $\mathbf{E}\perp d\mathbf{f}$ és az alapon is , mivel az még a fém belsejében helyezkedik el, a fedőn viszont $\mathbf{E}||d\mathbf{f}$.
így: $Edf = \frac{1}{\epsilon_0}\sigma df$ Tehát

$$\sigma = \epsilon_0 E$$

Vegyünk most egy üreges fémtestet és nézzük meg hogyan teljesül az elektrosztatika I. törvénye. Kicsit részletesebben az alábbi levezetés szemlélteti a vezetőkön belüli térerősséget, ez tulajdonképpen Faraday-kalitkája (6.12 ábra).



6.12 ábra Faraday-kalitkája

$$0 = \oint \mathbf{E}d\mathbf{r} = \int_{anyag} \mathbf{E}d\mathbf{r} + \int_{ureg} \mathbf{E}d\mathbf{r}$$

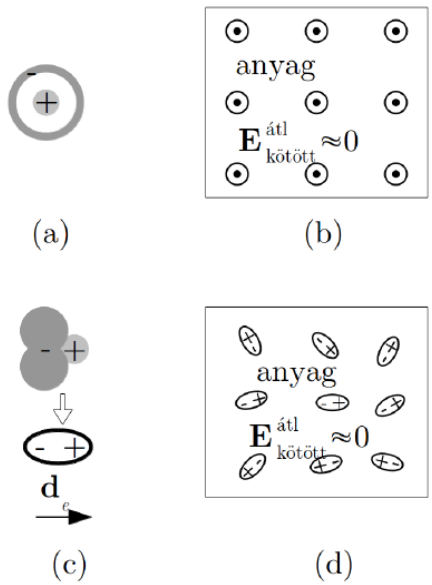
Hogy ez teljesülhessen a jobb oldalon mindkét tagnak 0-nak kell lennie. Tfh.: $\mathbf{E} \neq 0$az üregben, így $\int \mathbf{E}d\mathbf{r} > 0$ de ez ellentmond az előző egyenletnek így $\mathbf{E_{ureg}} = 0$

6.3. Vezetők, szigetelők, dielektrikumok

Kezdetben az elektrosztatika törvényszerűségeit szinte kizárólag csak levegőben vizsgálták és tárgyalták. Azzal a közelítéssel éltek, hogy a töltéselrendezések elektromos erőterét a levegő jelenléte semmilyen módon nem befolyásolja. Később kiderült, hogy ez a közelítés igen csak közel áll a valósághoz, hiszen a levegőben és a vákuumban majdnem teljesen megegyeznek ezen természeti törvényszerűségek hatásai. Azonban ha az elektromos jelenségek gázokban, szilárd anyagokban, vagy folyadékokban fejtik ki hatásukat, akkor merőben más fizikát kaphatunk a vákuumbelitől(vagy levegő). Ebből a szempontból a vezetők (fémek) nem különösebben érdekesek, hiszen az előzőekben tárgyaltak alapján (LSD 6.1.12) a fémek belsejében statikus elektromos tér nem alakulhat ki, így a továbbiakban csak szigetelőkről beszélünk. A szigetelők jellegzetessége éppen az, hogy a töltések bennük kötöttek, hosszú távon mozgásuk erősen korlátozott, ezért bennük elektromos erőtér jöhet létre.

Kísérlet: `http://fizipedia.bme.hu/index.php/F%C3%A1jl:Dielektrikum_mint_energiatarolo.ogv`

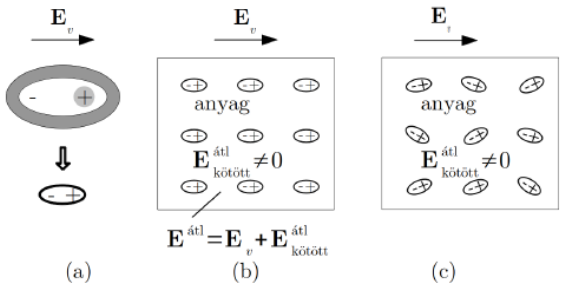
A jelenségben egyértelmű a jelenlevő szigetelőanyag, más néven *dielektrikum* szerepe, ezért érdemes megvizsgálni, hogy mi történik egy szigetelőben ha elektromos erőtérbe helyezzük. A továbbiakban a különféle elektromos erőterek megkülönböztetése érdekében az erőteret létrehozó töltéseket két csoportra osztjuk. Tudjuk, hogy az anyagokban normális körülmények között azonos mennyiségű pozitív és negatív töltés halmozódik fel. Azokat a töltéseket , amelyek az ellenkező előjelű párjaikkal fordulnak elő (vagyis egy adott térfogatban a töltések algebrai összege 0) *kötött töltéseknek* nevezzük. Amelyeket pl.: dörzsöléssel szét lehet választani, és így egy térrészben többségbe kerül az egyik előjelű töltés, azokat *szabad töltéseknek* fogjuk nevezni (érdemes odafigyelni hogy ezek a nevük ellenére nem feltétlenül mozgásképesek). A szigetelők belsejében kialakuló elektromos tér várhatóan különbözni fog attól a tértől, amit szabad töltések (pl.: feltöltött fémdarab) vákuumban hoztak volna létre, hiszen az anyagot alkotó kötött töltések tere módosítja azt. Ez annak ellenére így van, hogy az anyagok kifelé általában semlegesnek mutatkoznak, sőt rendszerint az anyagot alkotó kötött töltésekek elektromos terei is semlegesítik egymást. Az anyagokban jelenlévő kötött töltések ugyanis az alábbi két alapvető elrendezésben találhatóak. Az anyagot alkotó atomokban kétféle töltés bizonyos esetekben gömbszimmetrikus képződményt hoz létre (6.13 a,), amely csak a töltések közötti térben, vagyis az atom belsejében hoz létre elektromos teret. Ilyenkor , külső tér nélkül, az atomok közötti térben az átlagos elektromos tér gyakorlatilag 0 (6.13 b,). Egy másik töltéselrendezés az , amelyben az atom vagy molekula ellenkező előjelű töltéseinek súlypontjai nem esnek egybe, vagyis a töltéselrendezés egy dipólushoz hasonlít. A kötött töltések ilyen elrendezésének már "kifelé" is van elektromos tere.



6.13 ábra Töltéselrendezések a, gömbszimmetrikus apoláros c, pozitív és negatív töltések súlypontjában eltérő (poláros) molekula, és a belőlük álló anyag b és d, külső elektromos tér nélkül

Az esetek többségében mégsem alakul ki hosszú távú elektromos tér, mert a molekuláris dipólusok irányukat tekintve rendszertelenül helyezkednek el, így egymás elektromos terét kioltják (d, ábra). Más lesz a helyzet, ha a szigetelőt elektromos térbe helyezzük. Az eredetileg gömbszimmetrikus atomokban az elektromos erőtér hatására a töltések elmozdulnak, és a térerősség irányával párhuzamos dipólus jön létre (6.14 ábra a,) , aminek már az atomon kívül is van elektromos tere. Így az anyag a külső elektromos tér hatására a térerősséggel párhuzamos dipólusokat tartalmazó állapotba (b, ábra) kerül. Külső erőtér hatására ehhez hasonló végállapot jöhet létre az eredetileg rendezetlen dipólusokat tartalmazó anyagban is. Ha a dipólusok forgásképesek (valamennyire mindig azok), akkor az erőtér hatására rendeződnek, azaz kisebb-nagyobb mértékben a térerősség irányával párhuzamos helyzet felé fordulnak (c, ábra) , aminek következtében egymás terét már nem oltják ki. Ez a jelenség a *szigetelők polarizációja.* A végeredmény mindkét esetben ugyanaz: a külső elektromos tér hatására a kötött töltések a molekulák közötti térben egy hosszú távú elektromos erőteret hoznak létre, amely a külső térhez próbál igazodni. Mivel a térerősség irányába a beállt dipólusok erőtere a két töltés közötti, legerősebb tér tartományában a külső erőtér irányával lényegében ellentétes, az anyagban létrejövő elektromos erőtér várhatóan kisebb lesz, mint amilyen az anyag jelenléte nélkül lenne.

Tehát összefoglalva a polarizáció hatásait:



6.14 ábra Apoláros molekula külső tér hatására polarizálódik a, Apoláros b, illetve poláros c, molekulák alkotta anyag viselkedése külső elektromos térben

- Ha az anyagban eredetileg gömbszimmetrikus , kifelé mutató erőteret nem mutató atomok vannak, akkor az erőtér hatására az ellenkező előjelű töltések szétválnak, így a külső erőtér irányában rendezett dipólusok jönnek létre, amelyeknek eredő elektromos erőtere van
- Ha vannak az anyagban dipólusos-molekulák (pl.: víz), akkor külső elektromos tér nélkül azok átlagos erőtere a rendezetlen beállás miatt nulla, a külső elektromos erőtér azonban rendezi őket, és így lesz eredő elektromos erőterük.

6.3.1. Elektromos erőtér szigetelőkben

Itt várhatóan kicsit módosulnak a fent már részletezett törvények és az azokat leíró képletek, hiszen az elektromos erőteret módosítja az anyag jelenléte, azaz a létrejövő polarizált dipólusok. Nézzük meg mennyire igaz ez az állítás.

6.3.2. Az elektrosztatika I. alaptörvénye szigetelőkben

A szigetelőkben kötött töltésként megjelenő töltések ugyanazok, amelyek szabad töltésként megjelennek (elektronok vagy az atommagok kompenzálatlan protonjai). Az általuk kötött töltésként létrehozott elektromos erőtér feltehetőleg ugyanolyan jellegű, mint az az erőtér, amit szabad töltésként hoznak létre. tehát a konzervatív mivolta az erőtérnek feltehetőleg megmarad, így az I. alaptörvény is változatlan marad.

$$\oint_G \mathbf{E} d\mathbf{r} = 0$$

A tapasztalat természetesen alátámasztja a felvetésünket.

6.3.3. Az elektrosztatika II. alaptörvénye szigetelőkben

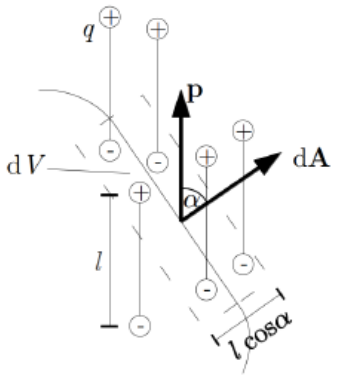
A kötött töltések erőterét és fluxus-járulékát a II. alaptörvényben figyelembe kell venni. Ez formálisan a kötött- vagy más néven *polarizált töltések* beírását jelenti

$$\oint_A \mathbf{E} d\mathbf{A} = \frac{Q_{sz}}{\epsilon_0} + \frac{Q_{pol}}{\epsilon_0}$$

ahol Q_{sz} és Q_{pol} a szabad és polarizált töltéseket jelöli. De mennyi kötött töltés van egy zárt felületen belül? Ha a zárt felület az egész szigetelőt tartalmazza, akkor $Q_{pol} = 0$, hiszen az anyag semleges. Ha azonban a zárt felület elmetszi a szigetelőt, akkor a dipólusokat elvághatja, azoknak egyik fele zárt felületen belülre, avagy kívülre esik. Így lehet $Q_{pol} \neq 0$ a zárt felületen belül.
Számoljuk ki a kötött töltéseket! Ehhez előbb érdemes a polarizációt makroszkopikusan jellemezni. Atomi szinten az atomok és molekulák $\mathbf{d}_e$ elektromos dipólusmomentuma jellemzi a polarizációt. Az egész test polarizációját a dipólmomentumok összegével jellemezhetjük így: $\mathbf{d}_e^{teljes} = \sum_i \mathbf{d}_{ei}$ ahol $\mathbf{d}_{ei}$ az i-edik dipólus dipólmomentuma. Az anyag egy kis térfogatában a dipólmomentum sűrűséget elnevezhetjük egy új mennyiségnek a *térfogati dipólmomentum sűrűségnek*:

$$\mathbf{P} = \frac{\Delta \mathbf{d}_e^{teljes}}{\Delta V} = \frac{\Delta(\sum_i \mathbf{d}_{ei})}{\Delta V}$$

Ez a *polarizáció vektor*. Nézzük meg , hogy a fluxus számolásához felvett zárt felület egy kis része mentén mennyi lesz a felület belsejébe kerülő töltés. A dipólusokat azonosnak tételezzük fel $d_{ei} = ql$ nagyságú dipólusmomentummal. A dA felület (6.15. ábra) azokat a dipólusokat vágja el (ezek negatív töltése a felületen belülre kerül), amelyek benne vannak az ábrán szaggatott vonallal jelzett dV térfogatban:



6.15 ábra Gauss-törvény számolása szigetelők esetében

Ha a dipólusok térfogati darabsűrűsége $n = \frac{dN}{dV}$, akkor az elmetszett dipólusok száma

$$dN = ndV = nldA|cos(\alpha)|$$

a felületen belülre került polarizációs töltések pedig (ez esetben negatív):

$$dQ_{pol} = -\frac{dN}{dV} qldAcos(\alpha)$$

ahol q egy dipólus töltése, dN az összes dipólusok száma a dV térfogaton belül. A kifejezés előjelhelyesen adja a töltést. Mivel α a dipólmomentum vektor és a felületvektor közötti szög, a töltés vektorokkal kifejezhető:

$$dQ_{pol} = -\frac{dN}{dV} \mathbf{d_e A} = -\mathbf{P} d\mathbf{A}$$

A zárt felületen lévő összes polarizációs töltés:

$$Q_{pol} = \oint_A \mathbf{P} d\mathbf{A}$$

Tehát hasonlóan mint eleinte is tárgyaltuk a szabad töltésekre vonatkozóan a Gauss-törvényt itt is az mutatkozik (csak itt természetese na polarizáció vektorra), hogy a polarizáció vektor forrásai a töltések. A polarizációs töltéssel felírt Gauss-törvény:

$$\oint_A \mathbf{E} d\mathbf{A} = \frac{Q_{sz}}{\epsilon_0} - \frac{1}{\epsilon_0} \oint_A \mathbf{P} d\mathbf{A}$$

Átrendezve:

$$\oint_A \left(\mathbf{E} + \frac{1}{\epsilon_0} \mathbf{P} \right) d\mathbf{A} = \frac{Q_{sz}}{\epsilon_0}$$

vagy

$$\oint_A \left(\epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} \right) d\mathbf{A} = Q_{sz}$$

alakot kaphatjuk.
Utóbbi jelentése, hogy az $\epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}$ vektormennyiség forrásai a szabad töltések, ennek a vektortérnek a vonalai szabad töltéseken kezdődnek és végződnek. Ezért ezt a vektort külön térjellemzőnek vezették be:

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}$$

az *elektromos eltolás vektor* néven. Kiszámításához ismerni kell a térerősséget és a polarizációt is. Ezzel megvan az elektrosztatika II. alaptörvényének általános alakja (egyik Maxwell egyenlet)

$$\oint_A \mathbf{D} d\mathbf{A} = Q_{sz}$$

differenciális alakja

$$div \mathbf{D} = \rho_{sz}$$

Megjegyzendő a fenti gondolatmenet arra épül, hogy a teret leíró mennyiségek ($\mathbf{D}, \mathbf{E}, \mathbf{P}$) vektorok egy kis térfogatelemben átlagolhatóak, és az anyag jelenlétében a mikroszkopikus térerősség vektorok helyett ezek átlagolt változatát használjuk az elektromos tér jellemzésére. Ezen átlagolás lényeges feltétele, hogy az ott használt térfogatelem az atomi méreteknél lényegesen nagyobb legyen (így a polarizációs töltések hatását mindenképpen kiátlagolva vesszük figyelemben), de elég pici legyen ahhoz, hogy szabad töltések által létrehozott "külső" térerősség még ne változzon meg lényegesen az átlagolási tartományon belül (így az átlagolás a "külső" teret lényegében nem változtatja meg). Az így kapott makroszkopikus térerősségvektorok jól használhatók kiterjedt testek és az atomi méretekhez képest lassan változó terek leírására, de nem alkalmasak az atomi méretek skáláján is változó térerősségek, vagy atomi méretű testek hatásának leírására.

6.3.4. Elektromos erőtér homogén, izotrop, lineáris dielektrikumokban

Az általános összefüggés a dielektromos eltolás vektor definíciójára:

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}$$

Különböző anyagok esetén $\mathbf{P}$ polarizáció vektor különböző módon függ az anyagra ható térerősség vektor értékétől. Elektromos szempontból *homogénnek* tekintünk egy anyagot, ha annak a polarizálhatósága helytől független, azaz egy tetszőleges $\mathbf{E}$ térerősség hatására a helytől független ugyanolyan $\mathbf{P}$ keletkezik. Egy homogén anyagban E és P iránya nem feltétlenül egyezik meg egymással. vannak olyan mikroszkopikus rendezettséggel bíró anyagok (általában kristályok), amelyekben különböző irányú de azonos nagyságú elektromos tér eltérő irányú és nagyságú polarizációt kelt. Ezen anyagok elektromos szempontból *anizotrop* anyagoknak nevezzük. Ezekkel ellentétben egy izotrop anyag polarizálhatósága minden irányban megegyezik. Homogén, izotrop anyagokban kis térerősségeknél legtöbbször érvényes $P \propto E$, ezek az anyagok a *lineáris dielektrikumok*. Az arányosságot a $\mathbf{P} = \epsilon_0 \chi \mathbf{E}$ adja, ahol χ az *elektromos szuszceptibilitás*, amely anyagi minőségtől függő fizikai mennyiség.A tapasztalat szerint minden anyagra fennáll a $\chi > 0$ összefüggés, vákuumban $\chi = 0$ (nincs polarizáció). Levegőben és a legtöbb gázban χ alig különbözik 0-tól ($\chi_{levego} = 0.00059$). Ilyenkor

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 (1 + \chi) \mathbf{E} = \epsilon_0 \epsilon_r \mathbf{E} = \epsilon \mathbf{E}$$

Itt $\epsilon_r = 1 + \chi$ az anyag *relatív dielektromos állandója* az $\epsilon = \epsilon_0 \epsilon_r$ mennyiség az anyag *abszolút permittivitása.* A $\chi > 0$ összefüggés miatt minden anyagban $\epsilon_r > 1$, vákuumban 1. Gázokban $\epsilon_r \approx 1$ (levegőben $\epsilon_r = 1.00059$). Ezért fogadhatjuk el jó közelítéssel a levegőben végzett kísérletek eredményeit vákuumbeli eredményeknek. Homogén, izotróp, lineáris dielektrikumokban az elektrosztatika II. alaptörvénye egyszerűbb balakban írható:

$$\oint_A \mathbf{D} d\mathbf{A} = \oint_A \epsilon_0 \epsilon_r \mathbf{E} d\mathbf{A} = \epsilon_0 \epsilon_r \oint_A \mathbf{E} d\mathbf{A} = Q$$

Itt és a továbbiakban a *szabad töltések* jelölésére az index nélküli Q-t használjuk. Ebből

$$\oint_A \mathbf{E} d\mathbf{A} = \frac{Q}{\epsilon_0 \epsilon_r}$$

Emiatt azonos szabad töltéseloszlás esetén minden vákuumra kapott összefüggésben, ahol szerepel az ϵ_0, az anyagban érvényes $\epsilon_0 => \epsilon_0 \epsilon_r$ cserével kapjuk meg. Így írható át pl.: a Coulomb-törvény is:

$$F_{12} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \frac{Q_1 Q_2}{r_{12}^2}$$

vagyis az elektrosztatikai erők csökkennek, ha a teret anyag tölti ki. A fenti összefüggésből következik az is, hogy az azonos szabad töltéseloszlás esetén adott helyen vákuumban (E_v) és anyagban (E) mért elektromos térerősségek között az

$$E = \frac{E_v}{\epsilon_r}$$

összefüggés áll fenn (homogén, izotrop, lineáris dielektrikumban). Természetesen ugyanez érvényes a potenciálokra is:

$$U = -\int_G \mathbf{E} d\mathbf{r} = -\int_G \frac{\mathbf{E_v}}{\epsilon_r} d\mathbf{r} = \frac{U_v}{\epsilon_r}$$

Ezzel értelmezhető az a kísérleti eredményünk, hogy a feltöltött üres kondenzátor lemezei közötti potenciálkülönbség lecsökken, ha szigetelőt csúsztatunk a lemezek közé (közben a lemezeken lévő szabad töltések nem változnak!), hiszen a levegőben a relatív dielektromos állandó értéke közel 1, a szigetelő lapban pedig ugyanezen érték nagyobb mint 2 (lásd majd a kondenzátoros résznél). A jelenség úgy is felfogható, hogy a szigetelő megnöveli a kondenzátor kapacitását:

$$C = \frac{Q}{U} = \frac{Q\epsilon_r}{U_v} = \epsilon_r C_v$$

A nagy permittivitású anyagok kapacitásnövelésre használhatóak.

6.3.5. Az erőtér két dielektrikum határán

Két különböző dielektrikum határán az erőteret jellemző mennyiségek vektorai megváltoznak. A határfelületen bekövetkező térerősség-változás számítására alkalmazzuk az elektrosztatika első és második törvényét a felület egy kis környezetére. Ehhez írjuk fel ezen törvényeket a határfelületre simuló zárt görbére (téglalap) mentén, melynek hosszan oldala (dl) párhuzamos a felülettel, rövidebb oldala (dx) merőleges a felületre (6.16-os ábra).

$$\oint_G \mathbf{E} d\mathbf{r} = 0$$

Legyen a téglalap mérete elég kicsi ahhoz, hogy a térerősséget a telkes dl oldal mentén állandónak tekinthessük, és vizsgáljuk a dx->0 határmenetet. Ekkor a téglalap rövidebb oldalai mentén elvégzett integrálok értéke nullához tart, míg a hosszabb oldalakra egy-egy konstanst kapunk:

$$\oint_G \mathbf{E} d\mathbf{r} = E_{1T} dl - E_{2T} dl = 0$$

így

$$E_{1T} = E_{2T}$$

Itt E_{1T} és E_{2T} a térerősség tangenciális komponensének értéke a határfelületen az ϵ_1 illetve ϵ_2 permittivitású közegben. Elmondhatjuk tehát, hogy az elektromos térerősség transzverzális komponense a határfelületen folytonosan megy át.

Az elektromos eltolás vektorról a Gauss-törvény ad mélyebb belátást, amennyiben azt felírjuk egy téglatestre, amelynek a határfelülettel párhuzamos oldalélei hosszabbak, és a határfelületre merőleges oldalélei rövidebbek (az oldallapok $d\mathbf{A}$ illetve -$d\mathbf{A}$ felületvektorai a felületre merőlegesek, ds vektorok a felülettel párhuzamosak). A téglatest rövidebb éleivel nullához tartva annak fedőlapjai két oldalról a határfelületre simulnak, és az oldallapjaira számított fluxus nullához tart. Így:

$$\oint_A \mathbf{D} d\mathbf{A} = -D_{1N} + D_{2N} dA = Q$$

Ha a határfelületen vannak szabad töltések, akkor az eltolás vektor normális komponensének változása azok felületi sűrűségével egyenlő:

$$D_{2N} - D_{1N} = \frac{Q}{dA} = \sigma$$

(új **D** vonalak csak szabad töltésekről lépnek ki, és ezen vonalak csak szabad töltéseken szűnhetnek meg). Ha nincs enek ott szabad töltések, akkor

$$D_{2N} = D_{1N}$$

ilyenkor az eltolás vektor normális komponense változatlan az átmenetnél. hasonló módon kapjuk a polarizáció vektorra a

$$\oint_A \mathbf{P} d\mathbf{A} = -Q_{pol}$$

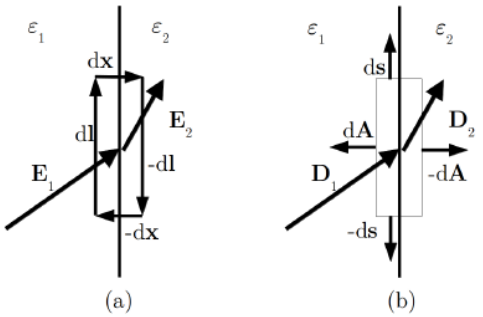
egyenletből, hogy a normális komponensének változása a polarizációs töltések felületi sűrűségének mínusz egyszeresével egyenlő

$$P_{2N} - P_{1N} = \frac{Q_{pol}}{dA} = \sigma_{pol}$$

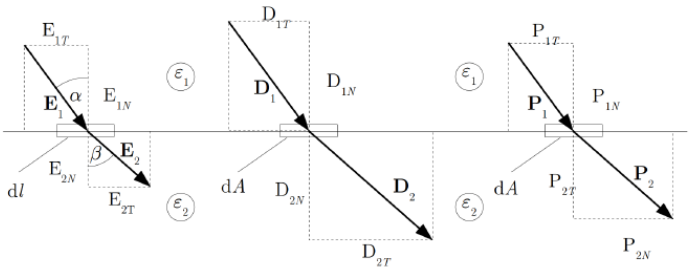
(új P vonalak polarizációs töltésekből lépnek ki és záródnak.) ha nincsenek a határfelületen polarizációs töltések, akkor

$$P_{2N} = P_{1N}$$

a polarizáció normális komponense változatlan. Ha a határfelületen nincsenek töltések, és az anyag elektromos



(a) 6.16 ábra Határfeltételek számítása



(b) 6.17 ábra E, D és P normálisai két homogén, izotróp lineáris dielektrikum határfelületén

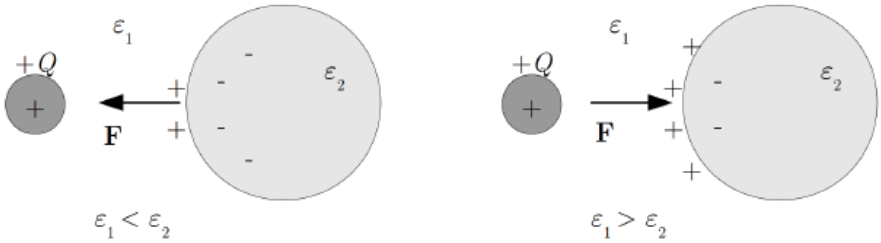
szempontból lineáris, akkor **E**,**D** és **P** egymással párhuzamosak maradnak (6.17 ábra). A térerősség-vektor törésének törvényét a fenti ábra és a fenti egyenletek alapján kaphatjuk meg.

$$tg(\alpha) = \frac{E_{1T}}{E_{1N}}$$

$$tg(\beta) = \frac{E_{2T}}{E_{2N}}$$

$$\frac{tg(\alpha)}{tg(\beta)} = \frac{E_{1T}E_{2N}}{E_{2T}E_{1N}} = \frac{E_{2N}}{E_{1N}} = \frac{D_{2N}\epsilon_1}{\epsilon_2 D_{1N}} = \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}$$

A határfelületi viselkedés magyarázza azt a kísérleti eredményt, hogy a töltött fémgömb és (szigetelő) paraffin gömb közötti erőhatás levegőben és ricinusolajban éppen ellenkező irányú(6.19 ábra). A kísérlet adatai: $\epsilon_r^{levego} \approx$



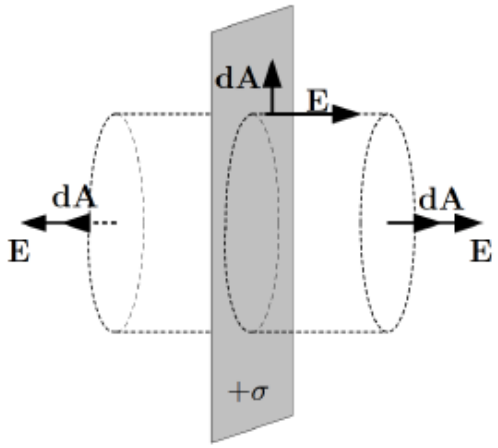
6.18 ábra Kísérlet: fémgömb és paraffin gömb közötti erőhatás levegőben (bal) és ricinusolajban (jobb)

$1, \epsilon_r^{r.olaj} \approx 4.6, \epsilon_r^{paraffin} \approx 2$ így $\epsilon_r^{levego} < \epsilon_r^{paraffin} < \epsilon_r^{r.olaj}$ ugyanez igaz a szuszceptibilitásokra is (a relációk). Ha a fémgolyó töltése pozitív, akkor a levegő és a paraffin golyó határfelületén az eredő polarizációs töltés negatív ($P_N^{paraffin} - P_N^{levego} = \sigma_{pol} => \sigma_{pol} < 0$): a pozitív fémgömb és a paraffin golyó között vonzást észlelünk. A ricinusolaj esetében ugyanez megfigyelhető csak ott éppen fordított relációs jelekkel, így taszítást figyelhetünk meg. Ugyanilyen elgondolás magyarázható az a kísérletünk is , hogy a pozitív töltésű üvegrúd a vízsugárra vonzó erőt fejt ki ($\epsilon_r^{levego} < \epsilon_r^{viz}$)

6.4. Kondenzátor, magnetosztatika

6.4.1. Térerősség és potenciál töltött síkok környezetében, a síkkondenzátor

A legegyszerűbb, ezért a valóságos terek közelítésekor leggyakrabban használt erőterek homogének. Az alábbiakban ilyen erőterekkel fogunk foglalkozni és számolni. Szimmetria okokból belátható, hogy homogén tér



6.19 ábra Feltöltött végtelen vezető sík terének meghatározása

jön létre egy elektromosan töltött "végtelen" kiterjedésű lemez két oldalán, amelyen a felületi töltéssűrűség ($\sigma = dQ/dA$) mindenütt azonos. Számítsuk ki a térerősséget (E_+), ha a lemez töltése pozitív. A térerősség az elektrosztatika II. alaptörvénye értelmében egyszerűen megkapható, ha a fluxust olyan zárt felületre számítjuk ki, amelynek csak a térerősséggel párhuzamos és térerősségre merőleges részei vannak(6.19 ábra). Erre a zárt felületre a fluxus:

$$\Phi_A^{zart} = \oint E_+ dA = 2\int_A E_+ dA = 2E_+ \int_A dA = 2E_+ A$$

másrészt viszont a II. alaptörvény szerint:

$$\Phi_A^{zart} = \frac{\sum Q}{\epsilon_0}$$

A két egyenletből (felhasználva ,hogy $\sum Q = \sigma A$)

$$E_+ = \frac{\sigma}{2\epsilon_0}$$

Negatívan töltött lemezre ugyanilyen nagyságú, csak ellenkező irányú térerősséget kapunk. Az eredmények szigorú értelemben véve cégtelen kiterjedésű lemezre igazak, de közelítő esetekben véges lemezekre is alkalmazhatóak, ha a lemeztől mért távolság sokkal kisebb, mint a lemez széleitől mért.
Érdekes, amikor két azonos mértékben töltött, de ellentétes előjelű lemezt helyezünk el egymással párhuzamosan szemben, viszonylag közel egymáshoz. Ekkor a két lemez közt a terek egyirányúak, ezért ott a térerősség megduplázódik, a lemezeken kívül azonban a terek kioltják egymást. Így a két lemez között homogén tér jön létre amelynek nagysága:

$$E = 2E_+ = \frac{\sigma}{\epsilon_0}$$

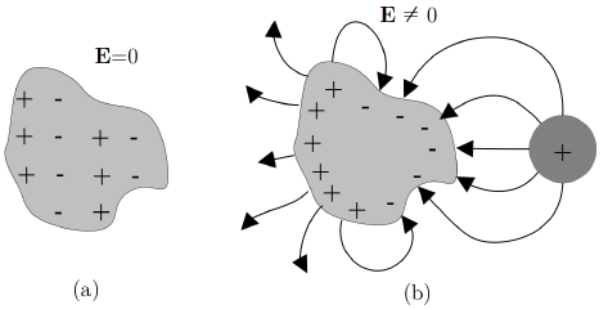
iránya pedig a pozitívan töltött lemeztől a negatív felé mutat. Számítsuk ki a két lemez közt fellépő potenciálkülönbséget is:

$$U = \int_0^d \mathbf{E} d\mathbf{r} = \int_0^d E dr = Ed = \frac{\sigma}{\epsilon_0} d$$

ahol d a lemezek között mért távolság.

6.4.2. Töltéselhelyezkedés vezetőn, kapacitás

Az elektromos kölcsönhatás kísérleti vizsgálata során láttuk, hogy egy vezetőben hosszú távú mozgásra képes töltéshordozók vannak. Ezek a töltések a vezetőben külső hatás jelenléte nélkül az ellenkező előjelű töltésekkel "összekeveredve" helyezkednek el, a vezető kifelé elektromosan töltetlen (semleges) testként viselkedik. A többlettöltést nem tartalmazó, semleges vezetőben azonban külső elektromos erőtérrel töltésátrendeződés hozható létre, és ilyenkor a vezetőben szétvált töltések miatt a vezető nem semleges testként viselkedik: körülötte elektromos erőtér jön létre (6.20 ábra). Ez a jelenség az elektromos megosztás, amit korábban már ismertettünk. Az is megfigyelhető, hogy vezetőkön a töltéselrendeződés nagyon hamar bekö-



6.20 ábra Elektromos megosztás

vetkezik és minden esetben a vezető felületére egymástól a lehető legtávolabb rendeződnek el.(Kísérlet: `http://fizipedia.bme.hu/index.php/F%C3%A1jl:Vezeto_feluleten.ogv`) Különböző töltéselrendezések elektromos erőterének vizsgálatánál azt az eredményt kaptuk, hogy a magában álló (egymástól igen messze elhelyezett) vezető gömb potenciálja arányos a rajta lévő töltéssel, az arányossági tényező pedig csak geometriai adatokat tartalmaz:

$$U_{vez} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 R} Q$$

Speciális esetben kapott eredményről kimutatható, hogy általánosan is igaz: tetszőleges alakú, magában álló, elektromosan töltött vezető végtelen távoli pontra vonatkozó potanciálja arányos a rajta lévő töltéssel, ezt így is írhatjuk:

$$U_{vez} = \frac{Q}{C}$$

ahol C állandót a vezető *kapacitásának nevezzük*, minél nagyobb C annál több töltést tud tárolni a vezető adott potenciálon. Eszerint egy R sugarú vezető gömb kapacitása:

$$C_{gomb} = 4\pi\epsilon_0 R$$

Hasonlóan a két párhuzamos töltött sík esetében:

$$U = \frac{\sigma}{\epsilon_0} d$$

mivel $\sigma = Q/A$

$$U = \frac{d}{\epsilon_0 A} Q$$

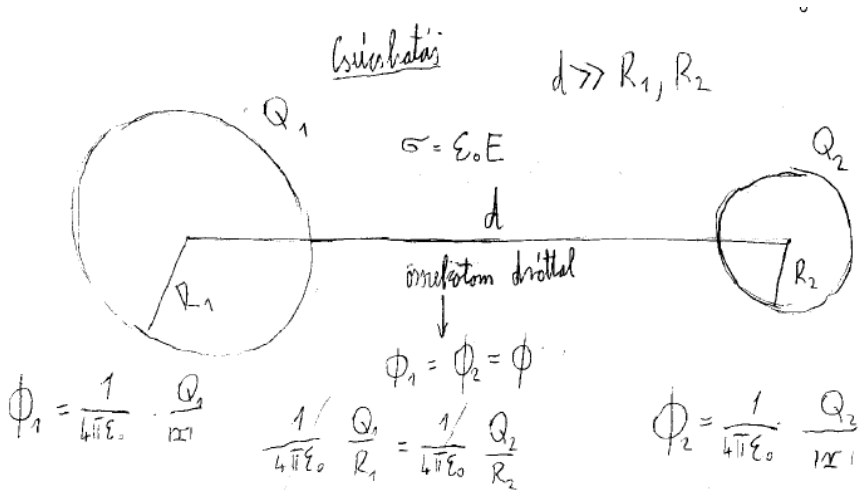
kifejezést kapjuk. Ez az összefüggés hasonló a kapacitás definíciójára szolgáló egyenlethez. Az analógia alapján bevezethetjük a síkkondenzátor kapacitását:

$$C = \frac{Q}{U} = \frac{\epsilon_0 A}{d}$$

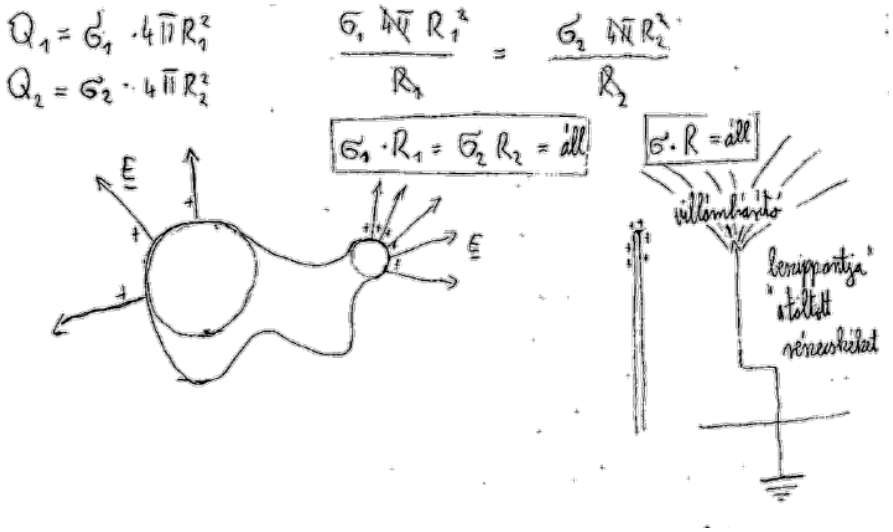
Mivel $Q = \frac{\epsilon_0 A}{d} U$ így látható, hogy adott potenciálkülönbség mellett minél nagyobb a kapacitás annál több töltést lehet felvinni a kondenzátorra, illetve a kapacitás annál nagyobb minél nagyobb a felület, vagy a távolság minél kisebb.(Kísérlet: `http://fizipedia.bme.hu/index.php/F%C3%A1jl:Sikkondenzator_I.ogv`)

6.4.3. Csúcshatás

A töltéseknek vezetőn történő elhelyezkedésével függ össze az a tapasztalat, hogy a töltött vezető kis görbületi sugarú (csúcsos) részeinél a térerősség sokkal nagyobb, mint a nagyobb görbületi sugarú részeknél.
Kísérletek:`http://fizipedia.bme.hu/index.php/F%C3%A1jl:Elektromos_csucshatas_I.ogv`
`http://fizipedia.bme.hu/index.php/F%C3%A1jl:Elektromos_csucshatas_II.ogv`)
A jelenség magyarázata az , hogy a csúcsnál kialakuló nagy elektromos térerősség miatt a csúcs polarizálja (dipólussá alakítja), és magához vonzza a levegő semleges molekuláit. A csúcsnál így jön létre a tapasztalt légáram. A nagy elektromos térerősség kialakulása azzal függ össze, hogy a mindenütt azonos potenciálú vezetőben a csúcsnál nagyobb a felületi töltéssűrűség, mint más helyeken. Ezt ki is számíthatjuk:



6.21 ábra Csúcshatás számítása



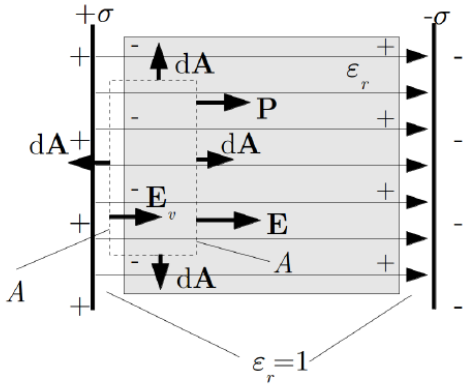
6.22 ábra Csúcshatás számítása

6.4.4. Polarizációs síkkondenzátor modellje

A polarizáció egyszerű modellje: egy síkkondenzátorban a dielektrikum felületén polarizációs töltések jelennek meg, és az erőteret létrehozó effektív szabad- és polarizációs töltések különbsége.
Igazolható ez a modell az általános törvények segítségével? A dielektrikummal kitöltött síkkondenzátorban (6.23 ábra) alkalmazzuk a II. alaptörvényt a szaggatott vonallal berajzolt zárt felületre:

$$\oint_A \mathbf{D} d\mathbf{A} = \oint_A (\epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}) d\mathbf{A} = -\epsilon_0 E_v A + \epsilon_0 E A + P A = Q_{sz} = 0$$

(a felület nem zár körül szabad töltést)



6.23 ábra Dielektrikummal töltött síkkondenzátor modellje

Így:

$$E = E_v - \frac{P}{\epsilon_0}$$

Mivel $E_v = \frac{\sigma}{\epsilon_0}$ és $P = P_N = -\sigma_{pol}$

$$E = \frac{\sigma}{\epsilon_0} + \frac{\sigma_{pol}}{\epsilon_0} = \frac{\sigma_{pol} + \sigma}{\epsilon_0}$$

illetve:

$$E = \frac{|\sigma_{pol}| - |\sigma|}{\epsilon_0}$$

ez az említett modell helyességét igazolja. Ugyanebben az elrendezésben mennyi a **D** nagysága a vákuum-résben és az anyagban? A két helyen:

$$\mathbf{D_v} = \epsilon_0 \mathbf{E_v}$$

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}$$

A nagyságokra:

$$D_v = \epsilon_0 \frac{\sigma}{\epsilon_0} = \sigma$$

$$D = \epsilon_0 \frac{\sigma + \sigma_{pol}}{\epsilon_0} - \sigma_{pol} = \sigma$$

vagyis $D_v = D$. Ez megfelel annak, hogy **D**-t szabad töltések felületi sűrűsége határozza meg (ez mindkét esetben σ).

6.4.5. Kondenzátor energiája és kapcsolások

Most már tudjuk, mi az a kapacitás, mi az a kondenzátor és mitől függ a lemezek között kialakuló potenciál nagysága, most nézzük meg, mekkora energiát lehet "tárolni" egy kondenzátorban. Vegyünk egy olyan kondenzátort, amelynek egyik lemezén az össztöltés Q_0 a másikon $-Q_0$. A kondenzátor lemezei között mozgó részecskék munkát végeznek (illetve a tér végez rajtuk munkát) $dW = UdQ = \frac{Q}{C}dQ$ tehát a teljes munka:

$$W = \int dW = \frac{1}{C}\int_0^{Q_0} QdQ = \frac{Q_0^2}{2C} = \frac{1}{2}QU = \frac{1}{2}CU^2 = \frac{1}{2}\frac{\epsilon_0 A}{d}U^2 = \frac{1}{2}\frac{\epsilon_0 A}{d}E^2d^2 = \frac{1}{2}\epsilon_0 E^2 Ad$$

ekkora munkát kell befektetnem , hogy a kondenzátor lemezei Q_0 és $-Q_0$ töltésű legyenek, úgy is mondhatnom, hogy ennyi munkát tárol a kondenzátor. Bevezethetünk egy újabb fontos mennyiséget, az ún.: *energiasűrűséget* mely definíció szerint $u := U/V$ így:

$$u = \frac{1}{2}\epsilon_0 E^2$$

mivel $Ad = V$. Bonyolultabb geometriájú esetekben általánosan:

$$U = \int_V udV = \frac{1}{2}\epsilon_0 \mathbf{E^2}(\mathbf{r})dV$$

Megj.: Az energiasűrűség nem csak itt érvényes, ez egy általános és gyakran használt mennyiség a fizikában! (xD) Nézzük meg a kapcsolásokat is gyorsan. Soros kapcsolás esetén a potenciál adódik össze: $U_1 + U_2 .... + U_N = U$ mivel $U = Q/C$ így:

$$\frac{Q}{C_1} + \frac{Q}{C_2} + ... + \frac{Q}{C_N} = \frac{Q}{C_{eredo}}$$

tehát

$$\sum_k \frac{1}{C_k} = \frac{1}{C_{eredo}}$$

Párhuzamos kapcsolás esetén a töltések adódnak össze, így:

$$\sum_k Q_k = Q => \sum_k C_k U = C_{eredo} U$$

tehát

$$\sum_k C_k = C_{eredo}$$

6.4.6. Magnetosztatika

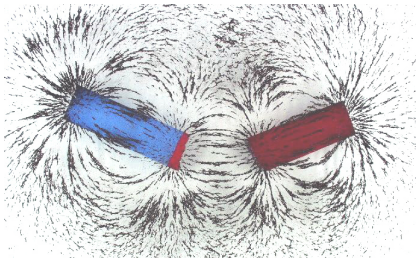
Csak úgy mint az elektrosztatika elején, itt is fejet hajthatunk a régi nagy felfedezőknek, csupán most néhány ezer km-t kalandozva az ókori Kínába vezet utunk. Az ókori kínaiak már a 11.század körül ismerték a mágneses jelenségkört. Ők csinálták az első iránytűket, melyek kisebb nagyobb pontossággal a Föld mágneses északi pólusához volt igazítva. Egyszerű vasreszelékes kísérletekkel könnyen feltérképezhetjük pl.: rúdmágnesek, vagy patkómágnesek mágneses mezejét. Hasonló eredményekre jutunk, mint az elektrosztatikában, viszont van egy óriási különbség a két erőtér között. A mágneses térnek nincsen forrása, az erővonalak önmagukban záródnak, ellentétben az elektrosztatikával.

6.4.7. Kísérletek

6.4.8. Hans Christian Ørsted kísérlete

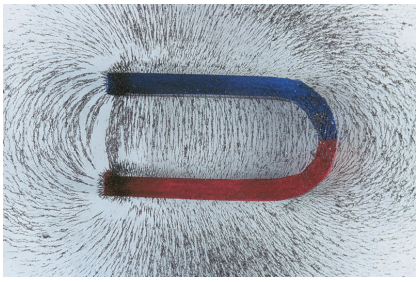
1820-ban egy dán fizikus Hans Christian Ørsted észrevette, hogy az árammal átjárt vezető közelében elhelyezett iránytű az áram hatására elfordul. Megállapította, hogy az elektromos áram mágneses teret létesít. (A mozgó töltések maguk körül mágneses teret hoznak létre.) Kísérletünkben az árammal átjárt vezető észak-déli irányban van elhelyezve. Az áram bekapcsolásakor, az iránytű a Föld mágneses terének és az áram mágneses terének eredőjének irányába fog beállni. Kísérlet:`http://fizipedia.bme.hu/index.php/%C3%81ram_m%C3%A1gneses_tere,_Oersted_k%C3%ADs%C3%A9rlet` Tehát az áramjárta vezetőnek mágneses tere van. További megfigyelésünk, hogy ha egy áramjárta vezetőt mágneses térbe helyezünk (pl.: patkómágnes), akkor egyensúlyi helyzetéből (amikor még nem kapcsolunk rá áramot) kitér, tehát erő hat rá. Ez az erő arányos az áramerősséggel (I), a vezető hosszúságával (l, ami a mágneses térben van), egy új mennyiséggel, a mágneses indukció vektorral és ezen új mennyiség és a rúd által bezárt szög szinuszával (ezért van $\mathbf{F_{max}}$):

$$\mathbf{B} = \frac{|\mathbf{F_{max}}|}{I \cdot l}$$

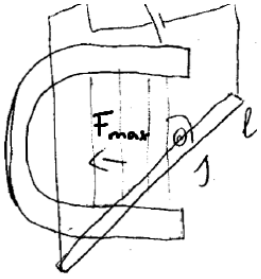


(a) 6.22 ábra Mágneses erővonalak

(b) 6.23 ábra Áram járta vezető drót mágneses tere



(c) 6.24 ábra Közelítőleg homogén mágneses tér a patkómágnes "közepén"

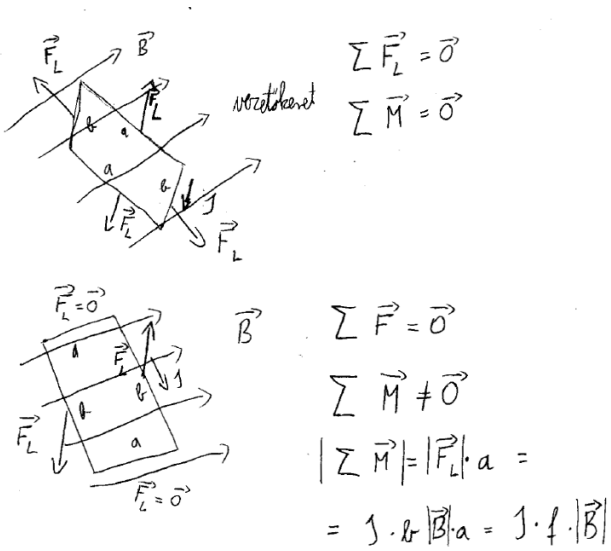


6.24 ábra Patkómágnes terében áram járta vezetőre erő hat

A mágneses indukcióvektor dimenziója $[\mathbf{B}] = N/Am = \frac{\frac{V}{m}C}{Am} = Vs/m^2 = 1T$ azaz 1 Tesla. Ez az erőhatás nem más mint a jó öreg Lorentz-erő:

$$\mathbf{F_L} = \mathbf{I}(\mathbf{l} \times \mathbf{B})$$

Jól lehet érzékeltetni, vezetőkeretek mozgásával:



6.25 ábra Vezetőkeretek és a Lorentz erő hatása

6.4.9. Forgatónyomaték és a mágneses momentum

A forgatónyomaték nagysága az előző példában is arányos volt az áramerősséggel, a vezetőkeret felület elem vektorával, a mágneses indukció abszolút értékével és a vezetőkeret illetve az indukció vektor közötti szög szinuszával.Vektoros alakban írva:

$$\mathbf{M} = I(\mathbf{f} \times \mathbf{B})$$

Bevezethetünk itt is egy új mennyiséget, az ún.: *mágneses momentumot* mely értéke: $\mathbf{m} = I\mathbf{f}$ tehát

$$\mathbf{M} = \mathbf{m} \times \mathbf{B}$$

Dimenziója: $[\mathbf{m}] = Am^2$, formálisan elképzelhető hasonló módon mint a homogén elektromos térben lévő dipólus. Kitekintés: Ha a tér inhomogén, akkor $F_x \sim m_x \frac{\partial B_x}{\partial x} + ...$ (1 dimenzióban + magasabb tagok, magasabb dimenzióban gradiens; Taylor sorfejtés) Egy áram járta vezető ugyanúgy viselkedik mágneses térben mint ha egy mágnes lenne:

$$dW = Md\Theta = mBsin\Theta d\Theta$$

$$W = \int_\Theta mBsin\Theta d\Theta = -mBcos\Theta$$

$$W = E_{pot} = -\mathbf{mB}$$

Elképzelhetjük ezt a hatást, úgy is mint amikor a vasreszelékek beállnak a mező által megszabott irányokban, mely effektusnak a generálója lényegében az, hogy akkor lesz energiaminimumon a rendszer, ha a mágneses momentum vektorok párhuzamosak lesznek az indukcióvektorokkal. Ilyenkor a forgatónyomaték zérus.

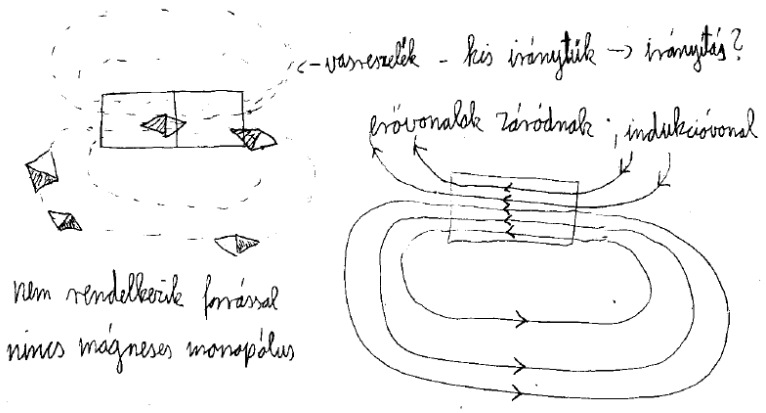
6.4.10. A magnetosztatika I. törvénye

Nagyon fontos kísérleti tapasztalat, hogy míg elektrosztatikában kiderült, hogy az elektromos tér forrásai a töltések, azaz minden erővonal töltéseken kezdődik és végződik, a magnetosztatikában nincsen ún.: *mágneses-monopólus*, azaz a mágneses tér forrásmentes erőtér. Így elő is áll a magnetosztatika I. alaptörvénye, mely a fenti állítást foglalja össze egy egyszerű képletben:

$$\oint_F \mathbf{B}d\mathbf{f} = 0$$

differenciális alakban írva:

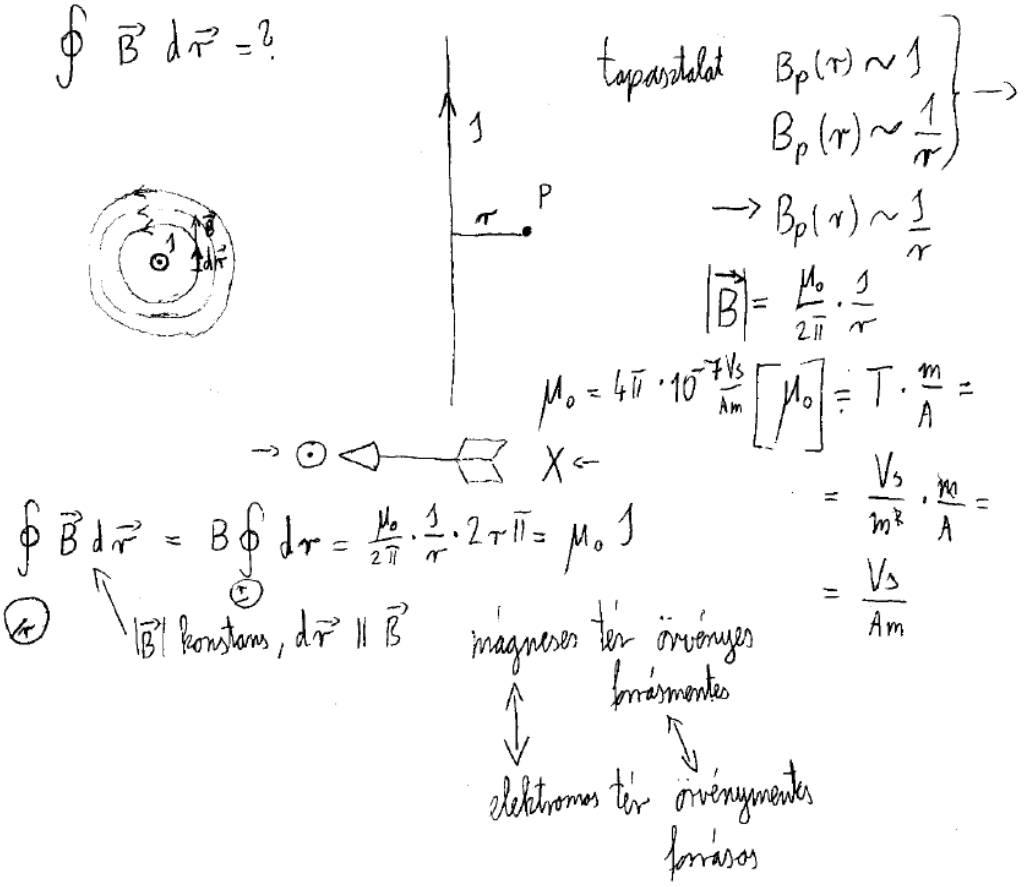
$$div\mathbf{B} = 0$$



6.26 ábra A mágneses indukcióvonalak záródnak, nincs mágneses monopólus

6.4.11. A magnetosztatika II. törvénye

Mi a helyzet a a vonalintegrállal ($\oint_G \mathbf{B}d\mathbf{r}$)? Tapasztalat szerint a mágneses indukció vektor nagysága egy áram járta vezető esetén arányos az áramerősséggel és a vezetőtől mért távolság reciprokával(6.27 ábra).



6.27 ábra A megnetosztatika II: törvényének bevezetése

Így empirikusan, mérésekkel kiokoskodhatjuk , hogy pontosan mekkora is az értéke:

$$|\mathbf{B}| = \frac{\mu_0}{2\pi}\frac{I}{r}$$

ahol $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} Vs/Am$ vákuum mágneses permeabilitása. Így:

$$\oint_G \mathbf{B}d\mathbf{r} = B\oint_G dr = \frac{\mu_0}{2\pi}\frac{I}{r}2r\pi = \mu_0 I$$

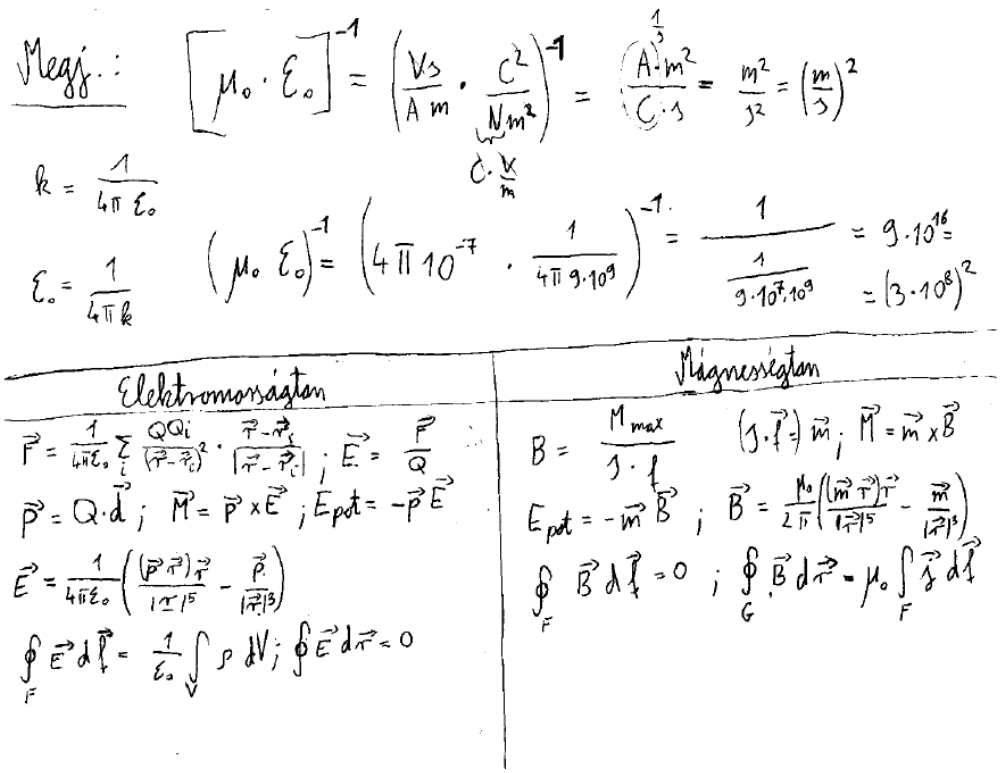
Kiderül még továbbá (megfelelő kísérletezéssel), hogy csak azon áramok adnak járulékot, amik a görbe által meghatározott felületet "előjelesen" döfik. Tehát általánosan:

$$\oint_G \mathbf{B}d\mathbf{r} = \mu_0 \sum_k I_k$$

vagy

$$\oint_G \mathbf{B}d\mathbf{r} = \mu_0 \int_F \mathbf{j}d\mathbf{f}$$

ahol **j** az áramsűrűség vektora (a felület elemnél fontos a jobb kéz szabály). Ez az Ampére féle gerjesztési törvény, amely feltételezi, hogy a kis molekuláris köráramok hozzák létre a mágneses teret.



6.28 ábra Összefoglaló táblázat és egy kitekintő érdekesség

6.4.12. Anyagok mágnessége

Ampére szerint az anyag válasza, hogy molekuláris köráramok keletkeznek, mely által a mágneses momentumok felvesznek egy orientációt az anyagban, mely hatására mágneses indukcióvonalak "keletkeznek". Tehát ha van egy külső mágneses terünk, és abban behelyezünk egy valamilyen anyagot, akkor ebből a folyamatból is kaphatunk egy járulékot a mágneses térhez. Definiálhatunk a polarizáció vektor analógiájára egy ún.: *Eredő mágnesezettség vektort* mely definíció szerint: $\mathbf{M} = \frac{1}{\Delta V} \sum_{\Delta V;k} \mathbf{m}_k$ tehát jelentése, hogy egy adott térfogat egységben mennyi mágneses momentum van. Ez egyfajta térfogati momentum sűrűség. Kis változást fog eredményezni az Ampére-féle gerjesztési törvény vákuumbeli megoldásához képest (természetesen az I. törvény minden esetben érvényes). Így anyagban:

$$\oint \mathbf{B} d\mathbf{r} = \mu_0 \sum (I_{sz} + I_m)$$

ahol

$$\mu_0 \sum I_m => \mu_0 \int \mathbf{j_m} d\mathbf{f}$$

Azon mágneses momentumok kezdőpontja ami járulékot ad a G görbéhez egy r sugarú hengeren helyezkednek el. Mennyi mágneses momentum van ebben a hengerben (6.29 ábra)?

$$\sum_k \mathbf{m_k} = \mathbf{M} r^2 \pi l => \sum_k I_k \mathbf{f_k} = \sum_k I_k r^2 \pi = M r^2 \pi l$$

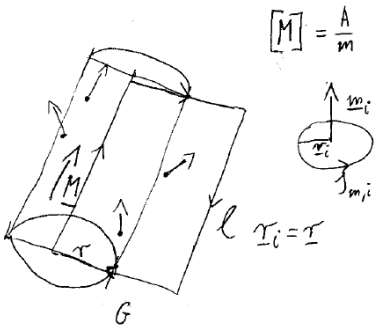
$$\sum_i I_{m,i} = \mathbf{Ml} = Ml$$

mivel most hengerről van szó és párhuzamosak.

$$\oint \mathbf{M} d\mathbf{r} = \int_{henger} + \int_{fedo} + \int_{alap} + \int_{kivul} = Ml = \sum_i I_{m,i}$$

mivel a fedőn és az alapon merőleges az M és dr illetve kívül feltesszük, hogy közel 0 a mágneses momentumok száma... Így

$$\oint \mathbf{B} d\mathbf{r} = \mu_0 \sum (I_{sz} + I_m) => \oint \left(\frac{\mathbf{B}}{\mu_0} - \mathbf{M} \right) d\mathbf{r} = \sum I_{sz}$$



6.29 ábra Ampére-féle gerjesztési törvény anyagban

ahol $\frac{\mathbf{B}}{\mu_0} - \mathbf{M} = \mathbf{H}$ mágneses térerősség. Tehát az Ampére-féle gerjesztési törvény anyagban:

$$\oint \mathbf{H} d\mathbf{r} = \int \mathbf{j_{sz}} d\mathbf{f}$$

Hasonlóan a dielektrikumok esetéhez, itt is definiálhatunk új mennyiségeket az anyagban lejátszódó események jellemzéséhez. Várhatóan kell legyen valamilyen arányosságnak **M** és **H** között, ezt mérésekkel megállapíthatjuk, és azt tapasztaljuk, hogy erősen anyagfüggő ez a mennyiség (és sok más paramétertől is függhet, pl.: hőmérséklet). Ez a mágneses szuszceptibilitás jele: χ_m

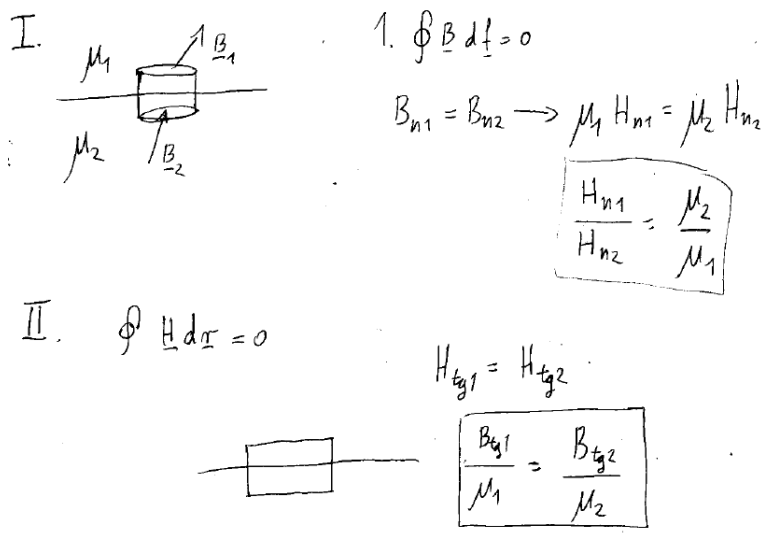
$$\mathbf{M} = \chi_m \mathbf{H}$$

. Ez a mennyiség lehet negatív, ilyenkor diamágneses anyagokról beszélünk, illetve pozitív, amikor paramágneses anyagokról. bevezethetjük a relatív mágneses permeabilitást is:

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{B}}{\mu_0} - \chi_m \mathbf{H} => \mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{H} + \chi_m \mathbf{H}) = \mu_0(1 + \chi_m)\mathbf{H}$$

ahol $1 + \chi_m = \mu$ az adott anyag relatív mágneses permeabilitása.

6.4.13. Határfeltételek



6.30 ábra Határfeltételek

6.5. Stacionárius áram, áramköri törvények

Tisztességesen ezt az alfejezetet elektrodinamikával érdemes tárgyalni, ezt a tárgyalásmódot megtalálhatjuk a Gálfi jegyzetben is akár. Itt most inkább a Révész féle tárgyalásmódra hagyatkozom. Alapvetően hogy is jön létre egy vezetőben áram? Létre kell hozni, egy potenciálkülönbséget a vezető végei közt (pl.: Q és -Q töltések vannak a végein), mely létrehoz egy elektromos teret, ami mozgatni fogja a töltéseket (és mellette mágneses teret is indukál). Ahhoz, hogy ez az állapot tartósan fennmaradjon, vagy folyamatosan pótolni kell a töltéseket, vagy valamilyen módon cirkuláris rendszert, egy áramkört kell felállítanunk. A vezetőben könnyen mozgó ún.:*szabad töltések* vannak.

6.5.1. Ohm-törvény

A törvény kimondja, hogy az elektromosan vezető anyagok a bennük áramló töltések mozgásával szemben a közegellenálláshoz hasonlítható elektromos ellenállással rendelkeznek. Ohm kísérletileg megállapította, hogy az áramerősség a vezeték két rögzített pontja között mérhető feszültséggel egyenesen arányos, vagyis

$$R = \frac{U}{I} = const$$

ahol az állandó az adott vezetékszakaszra jellemző elektromos ellenállás. (A törvény nem csak vezetékszakaszra, hanem általában bármilyen villamos ellenállást tanúsító fogyasztóra érvényes: a fogyasztó ellenállása megegyezik a sarkai közt mérhető feszültség és a rajta átfolyó áram hányadosával.) Az ellenállás egysége a

$$\frac{V}{A} = \Omega$$

neve ohm A mérésekből (és egyszerű gondolatmenetből is) következik, hogy egy adott A keresztmetszetű, homogén anyagú fémes vezeték l hosszúságú szakaszának ellenállása egyenesen arányos a vezeték hosszával és fordítottan arányos a keresztmetszetével:

$$\frac{l}{A}\rho = R$$

ahol ρ: arányossági tényező a vezeték anyagára jellemző ún. fajlagos ellenállás Ennek mérőszáma az egységnyi keresztmetszetű, egységnyi hosszúságú vezeték ellenállásának számértékével egyenlő. A fajlagos ellenállás SI-egysége az $\frac{1\Omega m^2}{m}$ ez azonban a gyakorlatban túl nagy érték, ezért helyette az 1 méter hosszú, 1 mm^2 keresztmetszetű vezeték ellenállását veszik alapul: $\frac{1\Omega mm^2}{m}$

6.5.2. Fémek vezetése

A szabad elektronok sebessége a vezetőben erősen hőmérsékletfüggő. Ha nincs tér a hőmozgás dominál, ha van akkor a Coulomb-erők kollektív mozgásra és egy kollektív sebességre "kényszerítik" az elektronokat, mely rendezett mozgás sebessége igen alacsony (tehát a közhiedelemmel ellentétben nem az elektronok ilyen jellegű mozgása által terjed olyan gyorsan az áram) $|\mathbf{v}| \approx 10^{-2} m/s$. Definíció szerint az áram nem más mint a vezető egységnyi keresztmetszetén adott idő alatt átáramló töltés mennyisége (megállapodás szerint a pozitív töltések mozgási iránya), tehát lokálisan

$$I = \frac{dQ}{dt}$$

mértékegysége C/s = A azaz 1 Ampére. Ha az áram időben állandó, akkor beszélünk stacionárius áramról. Áramsűrűséggel leírva:

$$j := \frac{dI}{df} \Longrightarrow I = \int_0^F \mathbf{j} d\mathbf{f}$$

Fajlagos vezetőképesség:

$$\sigma := 1/\rho$$

Tehát ha $U = RI = \rho \frac{l}{A} I$ akkor $\frac{U}{l} = \rho \frac{I}{A} \Longrightarrow U/l = E$ illetve $I/A = j$ így kapjuk az ún.: *differenciális Ohm-törvényt*

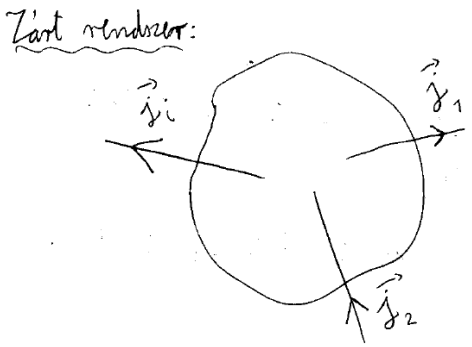
$$\mathbf{E} = \rho \mathbf{j}$$

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$$

Zárt rendszerben igaz a kontinuitási egyenlet, ("Ami befolyik az rögtön kifolyik")

$$\oint_F \mathbf{j} d\mathbf{f} + \frac{dQ}{dt} = 0$$

Stacionárius esetben, hány olyan részecske van ami vezet egységnyi térfogatban? Legyen n: a vezetőképes



6.32 ábra Zárt rendszer

részecskék részecskeszám sűrűsége $[n] = 1/m^3$ így:

$$dN = nV = nAvdt$$

$$dQ = qdN = qnAvdt$$

osszunk le /:Adt-vel

$$\mathbf{j} = qn\mathbf{v}$$

$$qn\mathbf{v} = \sigma\mathbf{E}/ : \sigma$$

$$\frac{q^2n}{\sigma}\mathbf{v} = q\mathbf{E}$$

így

$$\mathbf{F} = \frac{q^2n}{\sigma}\mathbf{v}$$

ami az ún.:*Stokes-törvény*-el ekvivalens (lásd folyt.köz.).

6.5.3. A vezetés Drude modellje

A Drude-modell az elektronok transzport tulajdonságaival magyarázza az anyagok (főleg a fémek) elektromos vezetőképességét. Paul Drude 1900-ban dolgozta ki a róla elnevezett Drude-modellt. A modell, mely a kinetikus elmélet egy alkalmazása, feltételezi, hogy az elektronok mikroszkopikus viselkedése klasszikus módon történik a szilárd testekben, és úgy néz ki, mint egy flipper gépben a golyók viselkedése, ahol az elektronok állandóan ide-oda pattognak a nehezebb és relatíve kevésbé mozgékony pozitív ionok társaságában.
A Drude-modell úgy tekinti a fémeket, hogy azok pozitív töltésű ionok tömegéből állnak, melyektől elkülönülnek a "szabad elektronok". Amikor a vezetési sáv kapcsolatba kerül más atomok potenciájával, ezek az elektronok leválnak. Mindamellett az ilyen szabad elektronok eredeténél a Drude-modell nem veszi figyelembe az elektronok és az ionok hosszútávú kölcsönhatását és azt feltételezi, hogy az elektronok nem hatnak egymásra. Az egyetlen lehetséges kölcsönhatás a pillanatnyi ütközés a szabad elektron és egy ion között, mely egy adott valószínűséggel következik be egy időegység alatt. A Drude-modell egy tisztán klasszikus modell, az elektronokat és az ionokat szilárd gömbként kezeli. Bővebben itt (36.oldal):`http://fizweb.elte.hu/download/Fizika-BSc/Elektromagnesseg/Jegyzet/elektromag-alap-jegyzet_2013.pdf` vagy `https://hu.wikipedia.org/wiki/Drude-modell`

6.5.4. Áramköri Kirchoff-törvények

A Kirchhoff-törvények a villamosságtanban a töltés és az energia megmaradását tárgyalják. Először Gustav Kirchhoff mondta ki őket 1845-ben. Mindkét törvény közvetlenül levezethető a Maxwell-egyenletekből, de Kirchhoff még Ohm törvényeinek általánosítását használta fel. Egy tetszőlegesen bonyolult villamos hálózat (áramkör) elemeire egyenként alkalmazható az Ohm-törvény, hiszen az összetartozó áram, feszültség és ellenállás mennyiségek közötti kapcsolatot mutatja. Viszont a több elemből álló hálózatnál a Kirchhoff-törvények nyújtanak segítséget, amelyek leegyszerűsíthetik a számítási műveleteket. Bonyolultabb áramkörök esetén a Kirchoff egyenletrendszerek megoldása rendkívül hosszadalmas, ezért célszerűbb a Norton-tétel, Thévenin-tétel, Millman-tétel, vagy a szuperpozíció tételének alkalmazása.
A tárgyaláshoz vegyük a már megtanult stacionárius áram esetét egy zárt rendszerben ahol igaz a kontinuitás egyenlet. Mivel az áramkörök is hasonló rendszerek ez jó modellnek ígérkezik. Az áramvonalak lényegében zárt görbék melyekre felírhatjuk az elektrosztatika II. törvényét illetve a differenciális Ohm törvénnyel kiegészítve. A 6.33-as ábrán fent láthatjuk a zárt görbét amire fel is írjuk a megfelelő egyenleteket.
A differenciális Ohm-törvényt kiegészítjük egy $\mathbf{E_i}$ idegen térerősség taggal, mivel ez a telepből származó kémiai potenciál által hajtott folyamatokra ($\mathbf{E_i} \approx grad\mu$) jellemző mennyiség, nem a töltésekből származik, tehát térerősség van, de áramsűrűség nincs. Ennek ismeretében írjuk fel a jelenségkört leíró egyenleteket:

$$\mathbf{j} = \sigma(\mathbf{E} - \mathbf{E_i}) = \frac{1}{\rho}(\mathbf{E} - \mathbf{E_i})$$

$$\mathbf{E} = \rho\mathbf{j} + \mathbf{E_i}$$

A 6.33 ábra alsó részén láthatjuk az áramköri kapcsolási rajzot, melyre felírjuk a további egyenleteket:

$$\oint \mathbf{E}d\mathbf{r} = \oint \rho\mathbf{j}d\mathbf{r} + \oint \mathbf{E_i}d\mathbf{r}$$

Az bal oldal definíció szerint 0, hiszen megbeszéltük, hogy az elektrosztatikus tér konzervatív, a jobb oldal első tagja legyen A a második pedig B. Foglalkozzunk első körben az A taggal:

$$A := \rho_1 j_1 l_1 + \rho_2 j_2 l_2 + ... = \rho_1 \frac{l_1}{A_1} j_1 A_1 + \rho_2 \frac{l_2}{A_2} j_2 A_2 + ... = R_1 I_1 + R_2 I_2$$

mivel $\rho_i \frac{l_i}{A_i} = R_i$ és $j_i A_i = I_i$

$$B := \int \mathbf{E_i}\mathbf{dr} = -\epsilon_\mathbf{i}$$

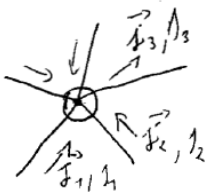
elektromotoros erő $[V]$ (azért nem körintegrál, mert ez csak a telepben van).
Tehát

$$0 = \sum_i I_i R_i + \sum_j -\epsilon_j = \sum_i I_i R_i - \sum_j \epsilon_j \longrightarrow \sum_j \epsilon_j = \sum_i R_i I_i$$

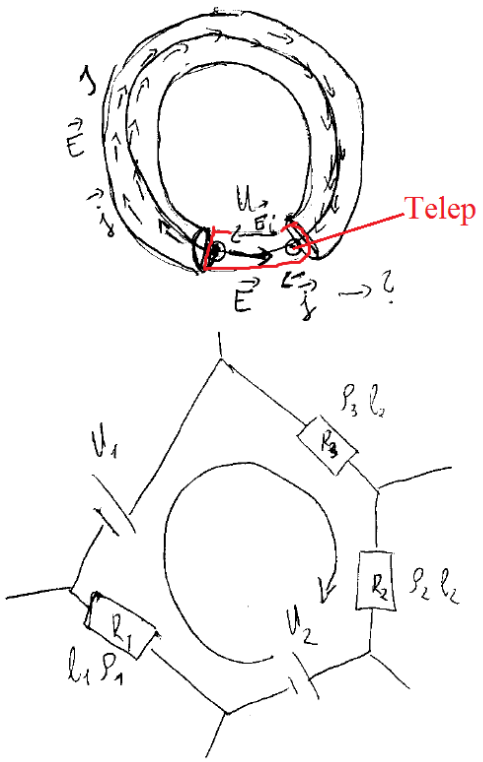
Így elő is áll nekünk Kirchoff I. törvénye azaz a hurok-törvény. Továbbá szinte egyenesen a kontinuitásból és a stacionárius esetből következik, hogy zárt rendszerben

$$\oint \mathbf{j}d\mathbf{f} = 0$$

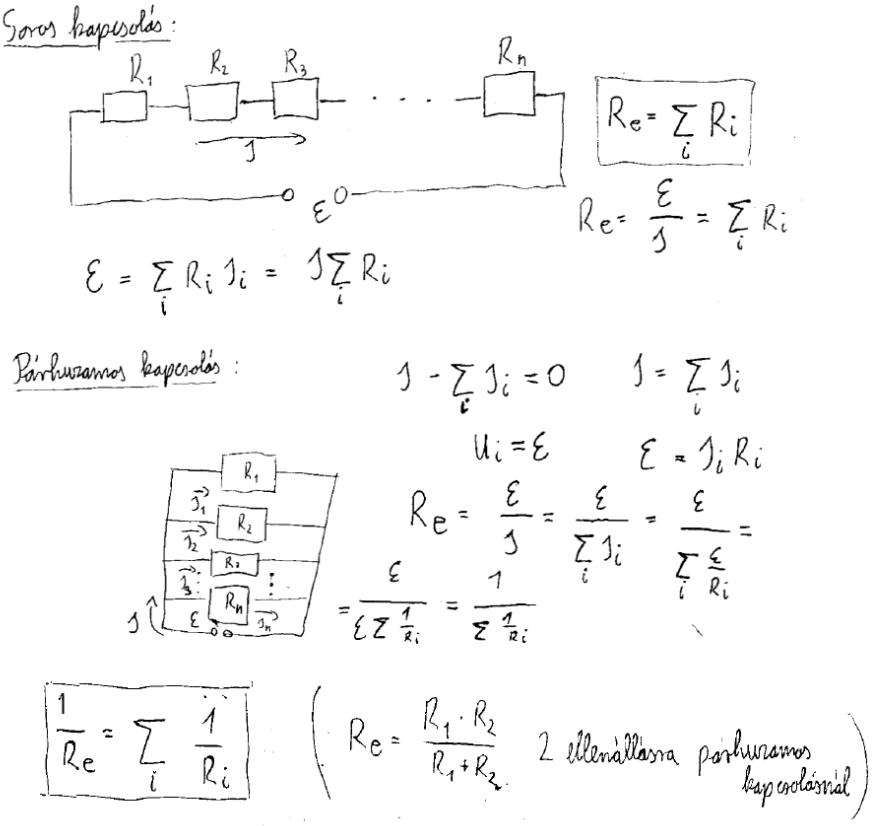
tehát $\sum_i I_i = 0$ ez a csomóponti törvény azaz Kirchoff II. törvénye(6.34 ábra).



6.33 ábra csomóponti törvény



6.34 ábra Áramkörök egyszerű modellje



6.35 ábra Példa áramköri kapcsolásokra

7. Elektrodinamika(Demeter Márton)

Az elektromos és mágneses jelenségek már az ókorban is ismertek voltak, de valódi természetüket felismerni és tulajdonságaikat matematikai formába önteni csak az újkorban sikerült. Coulomb felfedezte az elektrosztatika alaptörvényét, Volta és Galvani az elektromos áramok jelenségét. A mágnességet már a középkorban Petrus Peregrinus kísérletileg vizsgálta, munkáját a Föld mágnességének vizsgálatával az újkorban William Gilbert folytatta. Oersted fedezte fel az elektromos és mágneses jelenségek kapcsolatát, Ampère az áramok kölcsönhatását, Faraday a mágneses indukciót. A koronát munkásságukra Maxwell a 19. század legnagyobb elméleti fizikusa tette fel az elektromágnesség egységes elméletének megalkotásával. Maxwell az Ampère-törvényt kiegészítette az időben változó elektromos tér keltette mágneses térrel, és a további egységesítésként Coulomb elektrosztatikus potenciálja mintájára bevezette a vektorpotenciál fogalmát. Egyenleteivel megjósolta az elektromágneses hullámok létezését, amelyeket később Hertz fedezett fel. Írjuk fel kezdésképpen tehát a Maxwell egyenleteket integrális illetve differenciális alakban:

7.1. Maxwell-egyenletek

Megnevezés	Differenciális alak	Integrális alak	Szemléletes jelentése
Gauss-törvény	$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho$	$\oint_A \mathbf{D} \cdot d\mathbf{A} = \int_V \rho \cdot dV = Q$	Az elektromos tér forrásos, azaz elektromos töltés jelenlétében erővonalak indulnak a pozitív töltésekről, melyek a negatív töltéseken végződnek.
Faraday–Lenz-törvény	$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$	$\oint_L \mathbf{E} \cdot d\mathbf{l} = -\frac{d}{dt}\int_A \mathbf{B} \cdot d\mathbf{A}$	A mágneses indukció változása örvényes elektromos teret indukál, amelynek iránya ellenkező mint az őt létrehozó változás.
Gauss mágneses törvénye	$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$	$\oint_A \mathbf{B} \cdot d\mathbf{A} = 0$	A mágneses tér forrásmentes, azaz a mágneses tér erővonalai önmagukba záródnak.
Ampère-törvény Maxwell kiegészítésével	$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}$	$\oint_L \mathbf{H} \cdot d\mathbf{l} = \int_A \mathbf{j} \cdot d\mathbf{A} + \frac{d}{dt}\int_A \mathbf{D} \cdot d\mathbf{A}$	Az elektromos áram, illetve a folytonossági egyenlet kielégítéséből adódó eltolási áram mágneses teret hoz létre.

7.1 ábra A Maxwell egyenletek (Wikipediáról)

Másik megközelítésben is felírható az egyenletrendszer(7.2-es ábra). Amiket mérendő avagy ismeretlen mennyiségek, azok az $\mathbf{E}$ elektromos térerősség, $\mathbf{B}$ mágneses indukció vektor, ill. a $\mathbf{D}$ és $\mathbf{H}$ elektromos eltolás és mágneses térerősség vektorok. Ismertnek tételezzük fel a ρ térfogati töltéssűrűséget és a $\mathbf{j}$ térfogati áramsűrűséget. Fontos még, $\mu_0\epsilon_0 = \frac{1}{c^2}$ állandó is. Fontos, hogy az első felírásban (7.2-es ábra) ρ és $\mathbf{j}$ mennyiségek mások, mint a másodikban! Az első esetben a töltés és áramsűrűségek minden lehetséges "fajtáját" tartalmazzák, míg a másodikban az anyagokban megjelenő polarizációs töltéssűrűség illetve a polarizációs és mágneses áramsűrűségek NEM jelennek meg. Ezért bevezetjük az újabb jelöléseket a második esetre: ρ_{val} és $\mathbf{j_{val}}$ valódi töltés és áramsűrűségeket (ami annyit tesz, hogy nem polarizációs vagy mágneses). Mivel a valódiakat általában jobban ismerjük, mint a nem valódiakat, ezért célunk, hogy $\mathbf{E}$ és $\mathbf{B}$ vektormezőket meghatározzuk, de ehhez tudnunk kell milyen kapcsolatban vannak $\mathbf{D}$ és $\mathbf{H}$ vektormezőkkel. A kapcsolatuk anyagtól és körülményektől függően nagyon bonyolult is lehet.
SI-ben az elektrodinamika alapmennyisége az áramerősség, definíció szerint két egyenes, egymással párhuzamos, végtelen hosszú, elhanyagolhatóan kis keresztmetszetű vákuumban lévő vezetőben, amelyek egymástól 1m távolságra helyezkednek el, akkor folyik 1A erősségű áram, ha méterenként $2 \cdot 1^{-7}$ N erő hat rájuk. A többi mennyiség egységeit az elektrodinamika törvényeiből származtatjuk, a töltéseket például $Q = It$, az elektromos térerősséget az $\mathbf{F} = Q\mathbf{E}$ egyenletekből.
A mágneses indukció vektor definíciója: 1T (Tesla) a mágneses indukció nagysága, ha $1m^2$ területű, 1A erősségű áramhurokra gyakorolt maximális forgatónyomaték 1Nm. A törvény természetesen csak kis áramhurokra érvényes jó közelítéssel. Ezen definíciókhoz felhasznált törvényeket a Maxwell-egyenletekből le lehet vezetni.

$$c^2 \oint \mathbf{B} d\mathbf{s} = \int \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} d\mathbf{f} + \frac{1}{\varepsilon_0} \int \mathbf{j} d\mathbf{f}$$

(1)
$$\oint \mathbf{E} d\mathbf{f} = \frac{1}{\varepsilon_0} \int \rho dV$$

$$\oint \mathbf{E} d\mathbf{s} = -\int \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} d\mathbf{f}$$

$$\oint \mathbf{B} d\mathbf{f} = 0$$

(2)
$$\oint \mathbf{H} d\mathbf{s} = \int \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} d\mathbf{f} + \int \mathbf{j} d\mathbf{f}$$

$$\oint \mathbf{D} d\mathbf{f} = \int \rho dV$$

7.2 ábra A Maxwell egyenletek másképp

Mit is fejeznek ki a Maxwell-egyenletek? Föntről lefele haladva a 7.2-es ábrán az 1/1-es egyenlet leírja, hogy az áram és az időben változó elektromos tér mágneses teret kelt. Az 1/2-es egyenlet kifejezi, hogy az elektromos tér forrásai a töltések. Az 1/3-as azt állítja, hogy az időben változó mágneses tér elektromos teret kelt. Végül az 1/4 egy kísérleti tény, miszerint nincs mágneses monopólus. Az integrális alakokból a Gauss és Stokes tételek segítségével megkaphatjuk a lokális vagy differenciális alakokat (lásd 7.1-es ábra). Ezek a differenciál egyenletek térrészenként érvényesek, a térrészek határain határfeltételek állnak fenn. Az integrális egyenletekből levezethetőek a határfeltételek (lásd Elektro- és magnetosztatika 6.2.5).

- $E_{n_2} - E_{n_1} = \frac{\eta}{\epsilon_0}$ azaz az elektromos erőtér felületre merőleges, normális komponense a két térrészt elválasztó rétegen át ugrik, az ugrás nagysága az η felületi töltéssűrűséggel arányos.
- $E_{t_2} = E_{t_1}$ azaz az elektromos térerősség felülettel párhuzamos, tangenciális komponense a két térrészt elválasztó határon folytonosan megy át.
- $B_{n_2} = B_{n_1}$ a mágneses indukció vektor normális komponense a két térrész között folytonosan megy át.
- $\mathbf{n} \times (\mathbf{B_2} - \mathbf{B_1}) = \frac{\mathbf{i}}{\epsilon_0 c^2}$ a mágneses indukció vektor tangenciális komponense (mivel ez ad járulékot a vektoriális szorzáshoz) a két térrészt elválasztó felületen ugrik, és az ugrás mértéke a felületi áramsűrűségtől $\mathbf{i}$, és az 1-es térrészből a kettes térrészbe mutató normálvektortól $\mathbf{n}$ függ (és az állandóktól persze).

Vegyük a 7.1-es ábrán látható differenciális alakok közül a kiegészített Ampére törvény divergenciáját és a Gauss-törvény (elektrosztatika) idő szerinti parciális deriváltját, majd összehasonlítva a kettőt, némi számolás után az egyik legfontosabb megmaradási tételre találunk, az ún.: *kontinuitási egyenlet*-re:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + div\mathbf{j} = 0$$

Talán a legfrappánsabban Nagy Feró írta le egyik nagy slágerében a *8 óra munka 8 óra pihenés 8 óra szórakozás* c. számában, miszerint "Ami befolyik az rögtön kifolyik" . Ahogy a Feró által pedzegetett hidrodinamikában az anyagmegmaradás tételeként ismerhettük meg, itt ugyanez lesz érvényes csupán a töltésmegmaradás tételeként. Gauss tétellel integrális alakra hozva rögtön látszik is szemléletes jelentése $\frac{d}{dt}\int \rho dV + \oint \mathbf{j} d\mathbf{f} = 0$, azaz, hogy egy tetszőleges térfogatban az elektromos töltés csak azért változhat meg időben, mert a térfogat határfelületén töltés áramolhat ki és be. Tehát igaz Nagy Feró állítása, persze abban az esetben, ha nincsen egy esetleges forrás, vagy nyelő a rendszerben mely elnyeli avagy bepumpálja a rendszerben a töltéseket. Ilyenkor a 0 helyében szokás definiálni valamilyen forrás tagot. Érdemes még tudni, hogy a $\mathbf{j}$ áramsűrűség két tagra bontható, $\mathbf{j} = \mathbf{j_{konv}} + \mathbf{j_{kond}}$ azaz konduktív(vezetési) és konvektív(szabadon mozgó) töltések áramsűrűségeire. $\mathbf{j_{konv}} = \rho \mathbf{v}$ azaz a töltéssűrűség és a töltések sebességének szorzata. Az Ohm-törvényt a Maxwell egyenletek nem tartalmazzák. Kapcsolatot teremt a vezetőben folyó áram sűrűsége és az elektromos térerősség között. Tapasztalat szerint az áramerősség $I = \frac{\Delta\Phi}{l}\sigma d$ ahol a $\Delta\Phi$ potenciálkülönbség az l hosszúságú, d állandó keresztmetszetű vezetődarab végei közt, σ a vezető anyagi minőségére jellemző vezetőlépesség, $R = I/d\sigma$ a vezetődarab ellenállása. Az áramsűrűség nagysága $\mathbf{j} = I/d = \sigma\frac{\Delta\Phi}{l}$ az $\to 0$ határmenetben $\sigma|grad\Phi| = \sigma\mathbf{E}$-hez tart, és mivel az áram iránya a pozitív töltés mozgásiránya, ezért $\mathbf{j} = \sigma\mathbf{E}$ a differenciális Ohm-törvény. Itt az áramsűrűség mindenhol vezetési volt.

7.1.1. Vektor- és skalárpotenciál

Nagyon hasznos a továbbiakban bevezetni újabb mennyiségeket az elektrodinamikai és egyéb fizikai rendszerek tárgyalásához. Pusztán vektoranalitikai megfontolásokból bevezethetünk lényegében definíció szerint egy *vektorpotenciál* nevű mennyiséget(mivel $dib\mathbf{B} = 0$):

$$\mathbf{B} = rot\mathbf{A}$$

Ha ezt visszaírjuk az $\mathbf{E}$ egyenletébe

$$0 = rot\mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = rot\left[\mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}\right]$$

Egy nulla rotációjú vektormezőt írhatunk gradiens alakban:

$$\mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -grad\Phi => \mathbf{E} = -grad\Phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

vagyis a skalárpotenciál valamivel bonyolultabban jelentkezik az elektromos tér kifejezésében. ha ezeket visszaírjuk a Maxwell-egyenletekbe:

$$-div\mathbf{E} = \Delta\Phi + \frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{A} = -\frac{\rho}{\epsilon_0}$$

$$-rot\mathbf{B} = \Delta\mathbf{A} - \boldsymbol{\nabla}\cdot(\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{A}) = -\mu_0\mathbf{j} + \frac{1}{c^2}\boldsymbol{\nabla}\cdot\frac{\partial}{\partial t}\Phi + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\mathbf{A}$$

Felhívjuk a figyelmet arra, hogy $\mathbf{A}$ és Φ **nem** fizikai mennyiségek, csupán $\mathbf{E}$ és $\mathbf{B}$. Ebből kifolyólag, ha olyan vektor- illetve skalár potenciált választunk, amely ugyanazt az $\mathbf{E}$ és $\mathbf{B}$ adja, akkor az ekvivalens az eredeti választással (mértékinvariancia, mértékszabadság). Időfüggő esetben $\mathbf{A}$ továbbra is egy gradienssel lehet megváltoztatni, mert annak rotációja nulla, viszont az elektromos tér bonyolultabb kifejezése miatt a skalárpotenciál másképp változtatandó:

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \boldsymbol{\nabla}\Psi \qquad \Phi' = \Phi - \frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

A mértéktranszformációval összeköthető $\mathbf{A}$ és Φ terek ekvivalenciaosztályokat jelölnek ki az összes téren belül: ezek mérték-orbitok (mértékpályák). A mértékpályákhoz azonos fizika tartozik. Megtehetjük tehát azt, hogy a mérték-orbitokból mindig kiválasztunk egy reprezentáns elméletet (amit $\mathbf{A}(\mathbf{t},\mathbf{x}); \Phi(t,\mathbf{x})$ mezőkonfiguráció jelent). A kiválasztás módját nevezzük mértékrögzítésnek, az azt leíró egyenletet mértékfeltételnek vagy egyszerűen csak mértéknek. Nyilván olyan mértéket kell választani, amely minden mérték-orbitot csak egyszer metsz el. Vannak különösen jól bevált mértékek:

(a) Coulomb-mérték: itt előírjuk, hogy $div\mathbf{A} = 0$. Ez teljesíthető, hiszen ha ez eredetileg nem nulla, akkor megkövetelve a $div\mathbf{A}' = \mathbf{0}$-t kapjuk.

$$0 = div\mathbf{A}' = div\mathbf{A} + \Delta\Psi => \Delta\Psi = -div\mathbf{A}$$

amely megoldható, pontosabban marad benne egy térben állandó de esetleg időfüggő konstans. Ebben az esetben a skalárpotenciál egyenlete ugyanaz mint a stacionárius esetben:

$$\Delta\Phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0} => \Phi(t,\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\int d^3\mathbf{x}'\,\frac{\rho(t,\mathbf{x}')}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}$$

Ezzel a megoldással rögzítjük az időfüggő konstans értékét nullára. Miután megvan a Φ értéke, visszaírva a második egyenletbe:

$$\Delta\mathbf{A} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\mathbf{A} = -\mu_0\mathbf{j} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{\nabla}\cdot\Phi$$

Itt a bal oldal divergenciája 0, és ezzel konzisztens a jobb oldal is, hiszen a $-\mu_0$-t kiemelve:

$$div\left[\mathbf{j} - \epsilon_0\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{\nabla}\cdot\Phi\right] = div\mathbf{j} - \epsilon_0\frac{\partial}{\partial t}\Delta\Phi = div\mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial t}\rho = 0$$

kontinuitás egyenlet miatt. Fogalmazhatunk úgy is, hogy a $\mathbf{j}$-t felbontjuk transzverzális és longitudinális részre, hogy

$$\mathbf{j} = \mathbf{j_t} + \mathbf{j_l} \qquad \boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{j_t} = 0 \qquad \boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{j_l} = 0$$

Ezen egyenlet $\Delta\mathbf{A} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\mathbf{A} = -\mu_0\mathbf{j} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{\nabla}\cdot\Phi$ bal oldala tisztán transzverzális, míg jobb oldalon $\boldsymbol{\nabla}\cdot\Phi$ tisztán longitudinális (mert rotgrad=0). Vagyis a transzverzális módusra vonatkozó egyenlet:

$$\Delta\mathbf{A} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\mathbf{A} = -\mu_0\mathbf{j_t}$$

(b) Lorentz-mérték (sugárzási mérték): ekkor azt követeljük meg, hogy

$$\nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial}{\partial t}\Phi = 0$$

Ebben az esetben mindkét egyenlet ugyanolyan alakot ölt:

$$\Delta \mathbf{A} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\mathbf{A} = -\mu_0 \mathbf{j}$$

$$\Delta \Phi - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0}$$

Láthatóan mindkét mértékben a tér- és időderiváltak egy kombinációja jelenik meg:

$$\Box = \Delta - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}$$

ez az ún.: *D'Alambert operátor*. Így

$$\Box \mathbf{A} = -\mu_0 \mathbf{j}$$

$$\Box \Phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0}$$

7.2. Lorentz-erő

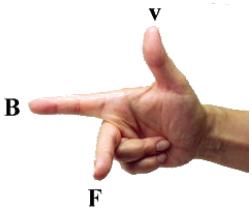
A Lorentz-erő az elektromágneses térben egy elektromos töltésre ható erő. Ennek két komponense közül az elektromos arányos és egyirányú az elektromos térerősséggel, a mágneses arányos és merőleges a mágneses indukcióra és a töltés sebességére.A Lorentz-erő Hendrik Lorentz (1853 – 1928) holland fizikus nevét viseli.
A mágneses indukciós tér jelölése: A

$$\vec{F} = q\vec{v} \times \vec{B}$$

A Lorentz-erő merőleges a részecske sebességére, valamint a

$$F = qvBsin\alpha$$

aholα a részecske sebességvektora és a B tér vektora közötti szög
A Lorentz-erő merőleges a részecske sebességére, tehát infinitezimális elmozdulására is, azaz a homogén indukciós tér nem végez munkát a töltött részecskén, vagyis a részecske sebességének nagyságát nem, csak az irányát képes megváltoztatni. A csak mágneses indukciós térben haladó pozitív töltéssel rendelkező részecskére ható erő irányát könnyű meghatározni (és emlékezni a módszerre) a jobbkéz-szabály alapján (természetesen egy negatív töltésre ellenkező irányú erő hat): Amennyiben elektromos tér is hat a részecskére és a fenti formulát



7.3 ábra Jobbkéz-szabály

kiegészítjük az elektrosztatikus erővel, akkor kapjuk a Lorentz-erő általános alakját:

$$\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$$

Fontos megjegyezni, hogy az előzőek alapján már most jól látszik, hogy a töltött részecskére ható elektromos és a mágneses erő "más szerkezetű" és ez a különbség az E és a B között még szembetűnőbb lesz az elektromos és mágneses terek egységes tárgyalását lehetővé tevő Maxwell-egyenletekben. Ez a természet sok jelenségének leírásában fontos szerephez jut, tehát akár azt is mondhatnánk, hogy ez is az oka annak, hogy olyan a világ körülöttünk, amilyennek ismerjük.

7.2.1. Lorentz erő áram járta vezetődrótra és a Biot-Savart törvény

Láttuk, hogy egy mozgó töltött részecskére erő hat az indukciós térben, a Lorentz-erő. Ezután kézenfekvőnek tűnik a kérdés, hogy hat-e erő a mágneses térbe helyezett áramjárta huzalra. A válasz az, hogy igen, és a Lorentz-erőt megadó formula ügyes átalakításával annak matematikai alakját is könnyedén meghatározhatjuk:

$$\vec{F} = q\vec{v} \times \vec{B} \qquad \Rightarrow \qquad \vec{F} = dq\vec{v} \times \vec{B} = dq\frac{d\vec{s}}{dt} \times \vec{B} = \frac{dq}{dt}d\vec{s} \times \vec{B}$$

Egy véges, áramjárta vezetékdarabra ható erő:

$$\vec{F} = I\int_s d\vec{s} \times \vec{B}$$

Ennek egyszerűbb alakját kapjuk abban az esetben, amikor egy ℓ hosszúságú, áramjárta vezetékdarab homogén mágneses indukciós térben van:

$$\vec{F} = I\vec{\ell} \times \vec{B}$$

Az áram mágneses tere megfelelő szimmetriát mutató árameloszlás pl. végtelen hosszú egyenes vezetőben folyó áram esetén a Maxwell-egyenletek integrális alakjából viszonylag könnyen meghatározható, a végtelen viszont matematikai nehézséget okozhat.
A differenciális egyenletek megoldása, amelyet a következőkben tárgyalunk, mentes az ilyen nehézségektől, és elvezet az ún. Biot-Savart törvényhez, mely eredmény egyszerű integrálással előállítható, s kiderül, hogy ugyanaz, mint amit az integrális egyenletekből kaptunk volna a végtelent figyelmen kívül hagyva.
Most csak felírom levezetés nélkül, ha érdekel a levezetés itt van (kísérlettel és videóval egybekötve):
`http://study.com/academy/lesson/the-biot-savart-law-derivation-examples.html`
`https://www.youtube.com/watch?v=WUpDMi5OzPs`
A végtelen hosszú, egyenes vezető mágneses tere I áramerősség esetén a tér valamelyik vezetőn kívüli, **r** helyvektorú pontjában:

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0}{2\pi}\frac{\mathbf{I} \times \mathbf{r}}{r^2}$$

Ezzel akár megadhatjuk az áramerősség definíciójául szolgáló egyenletet is, az egyik vezető mágneses terére:

$$\mathbf{B} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 c^2}\frac{2\mathbf{I_1} \times \mathbf{r}}{r^2} = \frac{\mu_0}{2\pi}\frac{\mathbf{I_1} \times \mathbf{r}}{r^2}$$

a másik vezető l hosszúságú darabjára ható erő:

$$|\mathbf{l_2} \times \mathbf{B}| = \frac{\mu_0}{2\pi}\frac{I_1 I_2 l}{r}$$

Vázoljuk a mágneses indukció vektor definícióját is. Kis áramhurok esetén **B** állandónak tekinthető, lineáris vezetőre $\mathbf{I}ds = Ids$. A vezető kis ds elemére ható forgatónyomaték $d\mathbf{M} = \mathbf{r} \times \mathbf{dF} = I\mathbf{r} \times (\mathbf{ds} \times \mathbf{B}) = I(\mathbf{rB}) - I\mathbf{B}(\mathbf{r}ds)$, **r** a kis vezetőszakasz helyvektora.
Így a teljes forgatónyomaték:

$$\mathbf{B} = I\oint \mathbf{rB}ds$$

mert a második tag körintegrálja 0. A Stokes-tétel felhasználásával és némi vektoranalitikai átalakítással($rds \approx df$):

$$\mathbf{M} = I\int \mathbf{df} \times \mathbf{B}$$

ez kis áramhurokra körülbelül

$$\mathbf{M} = I\mathbf{f} \times \mathbf{B}$$

A maximális forgatünyomaték nagysága IfB, amikor merőlegesek egymásra a felületelem vektor és **B** indukcióvektora.

7.3. Indukció

Az elektromágnes indukció elektromágneses kölcsönhatás, amely során egy vezetőben elektromos feszültség indukálódik. Felfedezése Michael Faraday nevéhez fűződik (1831).
Az elektromágneses indukció jelenségét két csoportra oszthatjuk: mozgási indukció (pl: dinamó) és nyugalmi indukció (pl: transzformátor). Kíérletek:`http://fizipedia.bme.hu/index.php/M%C3%A1gneses_indukci%C3%B3_I.`
`https://phet.colorado.edu/sims/html/faradays-law/latest/faradays-law_hu.html`
Faraday a legenda szerint véletlenül, egy tudományos prezentáció alkalmával fedezte fel a jelenséget, ismerte az Oersted kísérletet és az áramjárta vezetőkkel és hurkokkal kísérletezett, és "véletlenül" egy tekercs belsejébe behelyezett egy rúdmágnest, amikor is a feszültségmérő kilengett, áram indukálódott a tekercsben, mely arányos volt a mozgatás előjeles sebességével, a mágnes indukció vektor nagyságával, a vezető hosszával és adott esetben menetszámával (ha tekercs).

$$U_i = NBlv$$

A mozgási indukció során vagy a mágneses mező, vagy a vezető, vagy mind a kettő mozog egymáshoz viszonyítva. Leggyakoribb mozgásforma a forgómozgás (generátor elv), de előfordul a haladó mozgással létrehozott elektromágneses indukció is (általában - de nem csak - szemléltető eszközök esetében alkalmazzák).
A nyugalmi indukció során sem a vezető, sem a mágneses mező nem mozog. Ebben az esetben az indukciót az időben változó fluxus hozza létre.
Ha egy vezetőt mágneses mezőben mozgatunk, akkor a vele együttmozgó töltéshordozókraegy idegen erő erő, az úgynevezett Lorentz-erő hat. Ennek megfelelően az idegen térerősség:

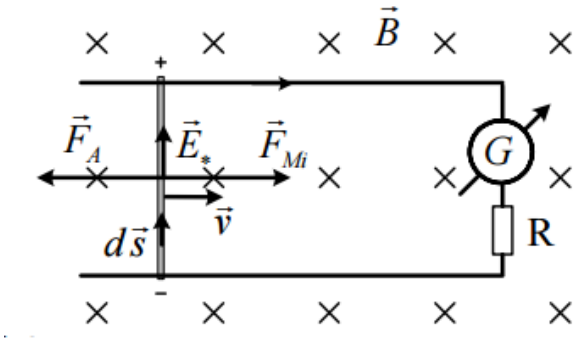
$$\mathbf{F} = q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$$

$$\mathbf{E} = \frac{\mathbf{F}}{q} = \mathbf{v} \times \mathbf{B}$$

A mozgó vezető vonal mentén elektromotoros erő indukálódik (keletkezik). A mozgási indukciót leíró Neumann-törvény:

$$\varepsilon_{AB} = \int_{AB} \mathbf{E} d\mathbf{r} = \int_{AB} (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) d\mathbf{r}$$

Ha a vezetőből készített vonal zárt, akkor az indukált elektromotoros erő hatására indukált áram jön létre.
Tekintsük egyenes vezetőt, és $\mathbf{v}, \mathbf{B}, \mathbf{ds}$ legyenek egymásra merőlegesek. Így leegyszerűsödik a törvény:



7.4 ábra Neumann-törvény, egyszerű vezetőkerettel szemléltetve

$$\varepsilon_{AB} = \int_{AB} \mathbf{E} d\mathbf{r} = \int_{AB} (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) d\mathbf{r} = \mathbf{v}\mathbf{B}l$$

a létrejövő áram és kapocsfeszültség pedig:

$$I = \frac{\varepsilon}{R + r}$$

illetve

$$U = IR = \varepsilon \frac{R}{R + r} < \varepsilon$$

A fellépő Ampère-erőt egy $\mathbf{F}_{\mathbf{M_i}}$ erővel kell kompenzálnunk. Ennek az erőnek a teljesítménye fedezi a fogyasztón mért teljesítményt. A generátorok mechanikai teljesítmény árán szolgáltatnak elektromos teljesítményt.

Ha egy irányított – nem feltétlenül merev – zárt vezetőhurok mágneses mezőben mozog akkor a benne indukált elektromotoros erő:

$$\varepsilon_{AB} = \oint_{AB} (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) d\mathbf{r}$$

Ez a mozgási indukcióra vonatkozó törvény az alábbi alakba írható át:

$$\varepsilon_O = -\frac{d\Phi}{dt}$$

Faraday törvénye kimondja, hogy stacionárius mágneses mezőben a mozgó zárt vezetőhurokban indukált elektromotoros erő egyenlő a zárt hurok által körülfogott mágneses fluxus változási gyorsaságának ellentettjével (Fluxus-szabály). Az egyenletben

$$\Phi = \int \mathbf{B} d\mathbf{f}$$

mágneses indukció fluxus. A fluxus-szabály segítségével az indukált elektromotoros erő gyakran könnyebben számítható, mint a Neumann-törvénnyel. A - előjel az ún. Lenz-törvény, amely azért lép fel, mert a körüljárás iránya a jobbkéz szabály szerint megszabja a felület normálisának, így a $d\mathbf{f}$ vektor irányát.Azaz oylan az indukált mágneses tér, ami akadályozza az őt indukáló hatást.
Ebben a fenti speciális példában a nyugalmi és mozgási indukcióval kapott indukált feszültség megegyezik és ez nem véletlen, mivel az indukált feszültséget úgy is definiálhattuk volna, hogy az elektromos térerősség érintő irányú komponensének tetszőleges zárt görbére vett integrálja a görbével együtt mozgó koordináta rendszerben. A bemutatott példában a speciáis-relativitáselmélet Lorentz-transzformációjának segítségével ki kellett volna számolni, hogy a szakasszal együttmozgó rendszerben mekkora az elektromos térerősség, ennek integrálja a fenti eredményt adta volna.
Tehát a Maxwell egyenleteket ki kell egészíteni az indukció törvényszerűségeivel:

$$\oint \mathbf{E_i} d\mathbf{r} = -\frac{d}{dt} \int \mathbf{B} d\mathbf{f}$$

ez a mozgási indukciós tag illetve a nyugalmi indukció (hurok által határolt terület időben állandó):

$$\oint \mathbf{E_i} d\mathbf{r} = -\frac{d}{dt} \int \mathbf{B} d\mathbf{f} = -\int \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} d\mathbf{f}$$

mivel a terület időben nem változik, így a $-\frac{d}{dt}\int \mathbf{B} d\mathbf{f} = -\int \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} d\mathbf{f} - \int \mathbf{B} \frac{\partial d\mathbf{f}}{\partial t}$ kifejezés második tagja nulla.

7.3.1. A Maxwell-egyenletek kvázistacionárius esetben

Az elektromos és mágneses mező egyenleteit felírhatjuk így:

$$rotrot\mathbf{E} = graddiv\mathbf{E} - \Delta\mathbf{E} = \frac{1}{\epsilon_0}\boldsymbol{\nabla}\rho - \Delta\mathbf{E} = -\frac{\partial}{\partial t} rot\mathbf{B} = -\mu_0 \frac{\partial}{\partial t}\mathbf{j} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\mathbf{E}$$

$$rotrot\mathbf{B} = graddiv\mathbf{B} - \Delta\mathbf{B} = -\Delta\mathbf{B} = \mu_0 \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{j} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial}{\partial t} rot\mathbf{E} = \mu_0 \frac{\partial}{\partial t}\mathbf{j} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\mathbf{B}$$

tehát

$$\Box\mathbf{E} = -\frac{1}{\epsilon_0}\boldsymbol{\nabla}\rho + \mu_0 \frac{\partial}{\partial t}\mathbf{j}$$

$$\Box\mathbf{B} = -\mu_0 \nabla \times \mathbf{j}$$

Az időfüggés tárgyalásában az első lépés, ha a második deriváltakat elhanyagoljuk (vagyis a d'Alambert operátor helyett Laplace operátort veszünk). Ennek fizikai oka lehet, hogy a második deriváltak egy $1/c^2$ faktorral vannak beszorozva, vagyis csak akkor jelentősek, ha a mezők térbeli és időbeli változásának skálája c faktorban különbözik. Ez azt jelenti, hogy az azt létrehozó töltések mozgására is ez kell vonatkozzon, tehát $v \approx c$ esetben lesz jelentős.
Lassú, kis frekvenciás jeleknél tehát valóban elhanyagolhatóak ezek a tagok. Szabad töltéshordozókkal rendelkező vezetőben lejátszódó alacsony frekvenciás folyamatok leírására például igen alkalmas ez a közelítés, ezt fogjuk most megvizsgálni:
Jó vezetőkben gyakran eltekinthetünk a szabad töltések felhalmozódásától, azaz vehetjük a $\rho = 0$ közelítést. Feltehetjük, hogy az áramsűrűség lineárisan függ a térerősségtől.

Differenciális Ohm-törvény:

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$$

alkalmazva az Ohm-törvényt az imént felírt elektromos és mágneses mező egyenleteire:

$$\Box \mathbf{E} = -\mu_0 \sigma \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}$$

$$\Box \mathbf{B} = -\mu_0 \sigma \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}$$

alacsony frekvenciás közelítésre megkapjuk az ún. *távíró-egyenleteket*:

$$\Delta \mathbf{E} = -\mu_0 \sigma \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}$$

$$\Delta \mathbf{B} = -\mu_0 \sigma \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}$$

Lorentz mértékben, lineáris anyagban kvázistacionárius esetben a potenciálok így írhatóak fel:

$$\triangle \Phi = -\frac{\varrho}{\varepsilon} \quad \Rightarrow \quad \Phi(t, \mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon} \int d^3\mathbf{x}' \frac{\varrho(t, \mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}$$

$$\triangle \boldsymbol{A} = -\mu \boldsymbol{J} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{A}(t, \mathbf{x}) = \frac{\mu}{4\pi} \int d^3\mathbf{x}' \frac{\boldsymbol{J}(t, \mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}.$$

7.3.2. Indukciós együttható

Vegyünk változó áramsűrűségű rendszert homogén térben. Egy kijelölt $C = \partial F$ görbe mentén mérhető elektromos erő ekkor a fenti egyenlet alapján:

$$\varepsilon_C = -\partial_t \int_F d\mathbf{f}\mathbf{B} = -\partial_t \oint_C ds \mathbf{A} = -\frac{\mu}{4\pi} \oint_C ds \int d^3\mathbf{x}' \frac{\partial_t \mathbf{j}(t, \mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}$$

Tegyük fel, hogy az áramok vezetőkben folynak, és a vezetőkben az árameloszlás térbeli eloszlása nem változik időben, csak a nagysága. Vagyis:

$$\mathbf{j}(t, \mathbf{x}') = \sum_i I_i(t) \mathbf{j_i}(\mathbf{x}')$$

Ezt visszaírjuk és megkapjuk:

$$\varepsilon_C = -\sum_i L_{C_i} \dot{I}_i$$

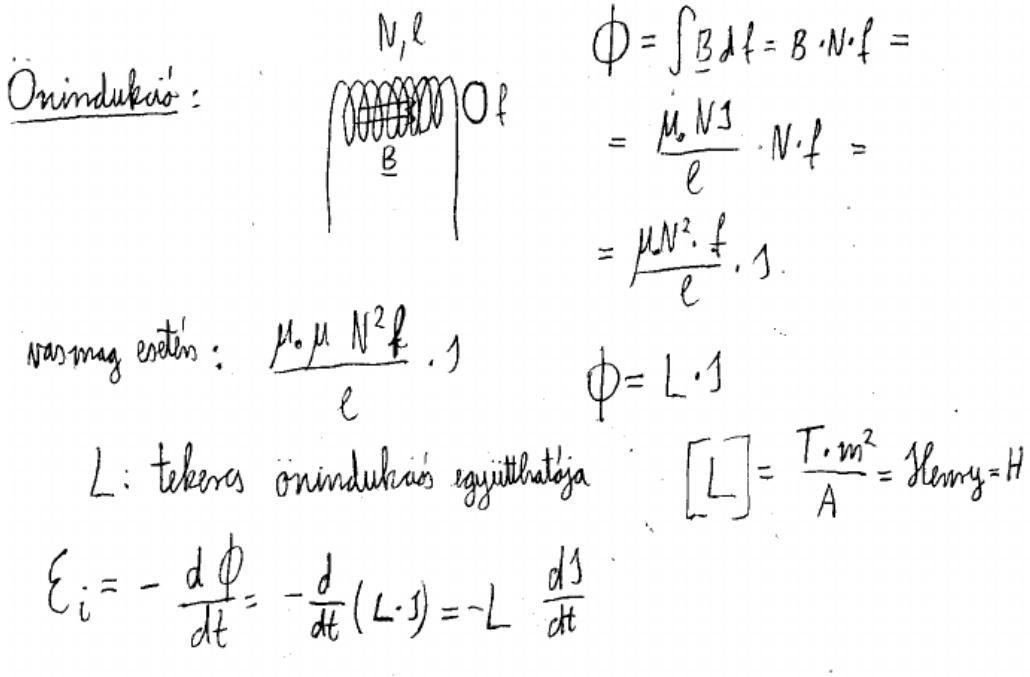
$$L_{Ci} = \frac{\mu}{4\pi} \oint_C ds \int d^3\mathbf{x}' \frac{\mathbf{j_i}(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}$$

Az L csak az árameloszlás geometriájától függ, azaz időben állandó. neve indukciós együttható.
Ha vékony vezetőről van szó, amelyek a C_i görbék mentén folynak, akkor a k. körben ébredő elektromotoros erő:

$$\varepsilon_k = -\sum_i L_{ki} \dot{I}_i$$

$$L_{ki} = \frac{\mu}{4\pi} \oint_{C_k} ds \oint_{C_i} ds' \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}$$

ahol L_{ki} a kölcsönös indukciós együttható. k=i esetben önindukciós együtthatóról beszélünk, de ekkor nem szabad a vezető nagyságát elhanyagolni.



7.5 ábra Példa: N menetszámú tekercs önindukciója.

7.4. Elektromágneses tér energiája, impulzusa, impulzusmomentuma

7.4.1. Töltésrendszer energiája

Elektromos mezőben mozgó töltésre ható erő $\mathbf{F} = q\mathbf{E}$. Ha fel akarunk építeni egy töltésrendszert, ezen erő ellen kell dolgoznunk, vagyis $-\mathbf{F}$ erőt kell kifejtenünk, dx elmozdulás esetén az általunk végzett munka:

$$dW = -\mathbf{F}d\mathbf{x} = -q\mathbf{E}dx \rightarrow W_{x_1 \rightarrow x_2} = -q \int_{x_1}^{x_2} d\mathbf{s}\mathbf{E}(\mathbf{s}) = q(\Phi(x_2) - \Phi(x_1))$$

$x_1 \rightarrow x_2$ mozgásnál végzett munka független a pályától (lásd elektrosztatika tétel). Ha $x_1 = \infty$ és $\Phi(\infty) = 0$ (ez véges töltésrendszernél mindig megtehető), akkor $W_{\infty \rightarrow x} = q\Phi(x)$.
Az általuk végzett munka - az energiamegmaradás miatt- a töltésrendszer energiájában tárolódik. Ezért a fenti képletet a következőképpen értelmezzük: ha van egy töltésrendszerünk, amely már létrehozott egy $\mathbf{E}(\mathbf{x})$ térerősséget, s ehhez hozzáadunk egy δq töltést a végtelenből x_0 helyre, akkor a töltésrendszer energiájának változása:

$$\delta W = \delta q \Phi(x_0)$$

Teljes töltésrendszer felépítésénél egyesével tesszük be a töltéseket, az újonnan betett töltések a régiek terét érzik:

$$W = \sum_{i=1}^{n} q_i \sum_{j=1}^{i-1} \frac{q_j}{4\pi\epsilon} \frac{1}{|\mathbf{x_i} - \mathbf{x_j}|} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1, i \neq j}^{n} \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon} \frac{1}{|\mathbf{x_i} - \mathbf{x_j}|}$$

Itt ki kell hagyni az i=j esetet, mert ekkor végtelent kapnánk.
Folytonos esetre is áttudjuk írni a fenti gondolatot. Ha egy $\delta\rho$ töltéseloszlással módosítjuk a már meglévő töltésrendszerünket, akkor

$$\delta W = \int d^3\mathbf{x} \delta\rho(\mathbf{x}) \Phi(\mathbf{x})$$

munkát kellet végezzünk a rendszeren. Ezt átalakíthatjuk a Maxwell-egyenletek segítségével. Kihasználhatjuk, hogy a töltéssűrűség az elektromos eltolás forrása:

$$div\mathbf{D} = \rho, \qquad div(\mathbf{D} + \delta\mathbf{D}) = \rho + \delta\rho \Longrightarrow \delta\rho = div\delta\mathbf{D}$$

Ezt visszaírva és felhasználva, hogy $\Phi(\infty) = 0$:

$$\delta W = \int d^3\mathbf{x} div(\delta\mathbf{D})\Phi = -\int d^3\mathbf{x}\delta\mathbf{D} grad\Phi = \int d^3\mathbf{x}\delta\mathbf{D}\mathbf{E}$$

Amennyiben a konstitúciós reláció lineáris, azaz $\mathbf{D} = \epsilon\mathbf{E}$, akkor a fenti alak felintegrálható:

$$W = \int d^3\mathbf{x}\delta\mathbf{D}\mathbf{E} = \frac{1}{2}\int d^3\mathbf{x}\mathbf{E}\epsilon\mathbf{E}$$

Ez az elektrosztatikus energia a térerősséggel kifejezve. Észrevehetjük, hogy az energia egy lokális mennyiség térintegráljaként áll elő, $W = \int d^3\mathbf{x}u(\mathbf{x})$. Emiatt beszélhetünk az energia sűrűségéről, amelynek kifejezése:

$$u = \frac{1}{2}\mathbf{E}\epsilon\mathbf{E} = \frac{1}{2}\mathbf{E}\mathbf{D}$$

Intuitíve hihetnénk azt is, hogy ebből a képletből

$$W = \sum_{i=1}^{n} q_i \sum_{j=1}^{i-1} \frac{q_i}{4\pi\epsilon}\frac{1}{|\mathbf{x_i} - \mathbf{x_j}|} = \frac{1}{2}\sum_{i,j=1,i\neq j}^{n} \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon}\frac{1}{|\mathbf{x_i} - \mathbf{x_j}|}$$

egyenesen következik az előbb vázolt kifejezés az elektrosztatikus tér munkájára, mégis ebből kifejezve akár lehetne negatív is (pl. akkor ha két egymással ellentétes ponttöltésünk van) mennyiségünk is míg az előbbiből kizárólag pozitív. Az ellentmondás feloldására vegyük észre, hogy az első esetben kizártuk i=j esetet, a folytonos leírásban erre nem volt mód. Úgy fogalmazhatunk, hogy a folytonos eset tartalmazza a "sajátenergiát" is. Például ha egy ponttöltésre kiszámítjuk a fenti integrált $W = \int d^3\mathbf{x}\delta\mathbf{D}\mathbf{E}$, végtelent kapunk, míg természetesen a szummás képlet 0-t adna. Ha valahogyan regularizáljuk az integrált (pl. hipotetikus "elektronsugár" bevezetésével), akkor véges eredményt kapunk a sajátenergiára.
Ha pedig kivonjuk a két ponttöltés $W = \int d^3\mathbf{x}\delta\mathbf{D}\mathbf{E}$ képlet alapján számolt teljes energiájából a két különálló ponttöltés sajátenergiáját, akkor már a szummás eredménnyel konzisztens végeredményt kapunk.

7.4.2. Az energia mérlegegyenlete

Ha elektromágneses térről beszélünk, a kifejezés kiegészül a fentiekben tárgyalthoz képest. Mivel a mágneses tér létrehozásához az indukció jelensége fontos, ezért nem hanyagolhatjuk el az időfüggést. Az időfüggést felhasználva azonban az energia-és impulzusmegmaradás egy más szemléletét kapjuk.
Ehhez nézzük meg, hogy egy töltés mozgatásakor, mekkora teljesítményt kell leadnunk.
A teljesítmény kifejezése általában $P_F = \mathbf{v}\mathbf{F}$, és ha az erő elektromágneses kölcsönhatásból származik, akkor

$$P_F = \mathbf{v}q(\mathbf{E} + \mathbf{v}\times\mathbf{B}) = q\mathbf{v}\mathbf{E} \Longrightarrow P_F = \int d^3\mathbf{x}\mathbf{j}(\mathbf{x})\mathbf{E}(\mathbf{x})$$

A tér felépítéséhez szükséges teljesítmény ennek ellentettje. Ezért

$$P = -P_F = -\int d^3\mathbf{x}\mathbf{j}(\mathbf{x})\mathbf{E}(\mathbf{x}) \Longrightarrow p = -\mathbf{E}\mathbf{j}$$

teljesítménysűrűség definiálható.
Ezt átírhatjuk a Maxwell-egyenletek segítségével, (beszúrunk egy 0-t is $\mathbf{H}rot\mathbf{E} - \mathbf{H}rot\mathbf{E}$!!!)

$$-\mathbf{E}\mathbf{j} = \mathbf{E}(-rot\mathbf{H} + \partial_t\mathbf{D}) = \mathbf{E}\partial_t\mathbf{D} - \mathbf{E}rot\mathbf{H} + \mathbf{H}rot\mathbf{E} - \mathbf{H}rot\mathbf{E} = \mathbf{E}\partial_t\mathbf{D} + \mathbf{H}\partial_t\mathbf{B} - \mathbf{E}rot\mathbf{H} + \mathbf{H}rot\mathbf{E}$$

Az első két tag teljes időderivált alakban írható:

$$\mathbf{E}\partial_t\mathbf{D} + \mathbf{H}\partial_t\mathbf{B} = \partial_t u, \qquad \delta u = \mathbf{E}\delta\mathbf{D} + \mathbf{H}\delta\mathbf{B}$$

Lineáris anyagokban:

$$u = \frac{1}{2}(\mathbf{D}\mathbf{E} + \mathbf{B}\mathbf{H}) = \frac{\epsilon}{2}\mathbf{E}^2 + \frac{1}{2\mu}\mathbf{B}^2$$

Az utolsó két tag teljes divergencia, hiszen ha definiáljuk az ún.*Poynting-vektor*

$$\mathbf{S} = \mathbf{E}\times\mathbf{H}$$

Ha ennek vesszük a divergenciáját, visszakapjuk a kívánt tagot:

$$div\mathbf{S} = H_k\varepsilon_{ijk}\partial_i E_i - E_j\varepsilon_{jik}\partial_i H_k = \mathbf{H}rot\mathbf{E} - \mathbf{E}rot\mathbf{H}$$

Vagyis:

$$\partial u + div\mathbf{S} + \mathbf{j}\mathbf{E} = 0$$

A teljes térre integrálva a divergencia nem ad járulékot, azaz

$$\partial_t \int d^3\mathbf{x} u = \int d^3\mathbf{x}(-\mathbf{jE}) = P$$

vagyis u integrálja az elektromágneses tér energiájeként értelmezhető, u maga az energiasűrűség.

Így $\partial u + div\mathbf{S} + \mathbf{jE} = 0$ az energia megmaradását fejezi ki mérlegegyenlet formájában.
Ilyen módon a Poynting-vektor is fizikai mennyiség lesz, ez képviseli az energia-áramsűrűséget.
Az utolsó tagot ($\mathbf{jE}$) vagy forrásnak tekintjük, vagy az elektromágneses térben mozgó áramok teljesítménysűrűségének értelmezve az energia anyaghoz kötött részét képviseli.

7.4.3. Az impulzus mérlegegyenlete

Hasonló módon járhatunk el az impulzusváltozásnál is: ha egy próbatöltést helyezünk elektromágneses térbe, akkor a rá ható erő a Lorentz-erő:

$$\mathbf{F} = \int d^3\mathbf{x}(\rho\mathbf{E} + \mathbf{j} \times \mathbf{B})$$

ebből következően:

$$\mathbf{f} = \rho\mathbf{E} + \mathbf{j} \times \mathbf{B}$$

az ún.*erősűrűség*, mely a térfogatban lévő töltésekre ható mechanikai erőt fejezi ki. Az erő az impulzusváltozás forrása, ugyanolyan szerepet játszik, mint a teljesítmény az energia kapcsán.
Ezért megpróbálhatjuk kifejezni az elektromágneses tér impulzus mérlegegyenletét.
Átalakítva a jobb oldalt

$$\rho\mathbf{E} + \mathbf{j} \times \mathbf{B} = \mathbf{E}div\mathbf{D} - \mathbf{B} \times (\mathbf{rotH} - \partial_\mathbf{t}\mathbf{D}) = \mathbf{EdivD} + \mathbf{B} \times \partial_\mathbf{t}\mathbf{D} - \mathbf{B} \times \mathbf{rotH}$$

$$= \partial_t(\mathbf{B} \times \mathbf{D}) - \dot{\mathbf{B}} \times \mathbf{D} + \mathbf{E}div\mathbf{D} + \mathbf{H}div\mathbf{B} - \mathbf{B} \times \mathbf{rotH}$$

$$= -\partial_t(\mathbf{D} \times \mathbf{B}) + \mathbf{E}div\mathbf{D} + \mathbf{H}div\mathbf{B} - \mathbf{B} \times \mathbf{rotH} - \mathbf{D} \times \mathbf{rotE}$$

Az első tag teljes időderivált, a második tag pedig egy teljes divergencia, hiszen lineáris anyagban:

$$(\mathbf{E}div\mathbf{D} - \mathbf{D} \times \mathbf{rotE})_i = E_i\partial_j D_j - \varepsilon_{kij} D_j \varepsilon_{klm} \partial_l E_m = E_i\partial_j D_j - D_j\partial_i E_j + D_j\partial_j E_i = \partial_j \left(E_i D_j - \frac{1}{2}\mathbf{DE}\delta_{ij} \right)$$

és hasonlót kapunk a mágneses szektorban is.
Bevezetve

$$\mathbf{g} = \mathbf{D} \times \mathbf{B} = \frac{1}{c^2}\mathbf{S}$$

és

$$T_{ij} = \frac{1}{2}(\mathbf{DE} + \mathbf{BH})\delta_{ij} - E_i D_j - H_i B_j$$

mennyiséget kapjuk, hogy

$$\partial_t g_i + \partial_j T_{ij} + (\rho\mathbf{E} + \mathbf{j} \times \mathbf{B})_i = 0$$

Az egyenlet értelmezéséhez integráljuk ki a teljes térre a fenti kifejezést:

$$\partial_t \int d^3\mathbf{x} g_i = -\int d^3\mathbf{x}(\rho\mathbf{E} + \mathbf{j} \times \mathbf{B})_i$$

A jobb oldal az anyagra ható erő ellen ereje, tehát a bal oldal nem más, mint az elektromágneses tér impulzusa, vagyis $\mathbf{g}$ az elektromágneses tér impulzussűrűsége, a divergencia faktor pedig a mérlegegyenletek szokásos értelmezése szerint, az impulzus áramsűrűsége vagy az ún. *Maxwell-féle feszültségtenzor*.
Másik megközelítés: (`http://tankonyvtar.ttk.bme.hu/pdf/151.pdf` 6.fejezet)

7.4.4. Elektromágneses tér impulzusmomentuma

A forgatónyomatékot kifejezhetjük a Lorentz-erőből:

$$\mathbf{M} = \int d^3\mathbf{x}\mathbf{x} \times (\rho\mathbf{E} + \mathbf{j} \times \mathbf{B})$$

A forgatónyomaték egységnyi idő alatti impulzusmomentum változást jelent, innen tehát az elektromágneses tér impulzusmomentuma olvasható le. Az előbb láttuk ($\partial_t g_i + \partial_j T_{ij} + (\rho\mathbf{E} + \mathbf{j} \times \mathbf{B})_i = 0$) egyenletet, ebből:

$$\partial_t(\mathbf{x} \times \mathbf{g})_i + \varepsilon_{ijk} x_j \partial_l T_{kl} + [\mathbf{x} \times (\rho\mathbf{E} + \mathbf{j} \times \mathbf{B})]_k = 0$$

A középső tagban írhatjuk:

$$\partial_l(\varepsilon_{ijk} x_j T_{kl}) = \varepsilon_{ilk} T_{kl} + \varepsilon_{ijk} x_j \partial_l T_{kl}$$

de itt az első tag nulla, mert $\varepsilon_{ikl} k \leftrightarrow l$ cserére antiszimmetrikus, T_{kl} pedig szimmetrikus.
Vagyis a második tag teljes divergencia. Így:

$$\partial_t(\mathbf{x} \times \mathbf{g})_i + \partial_l(\varepsilon_{ijk} x_j T_{kl}) + [\mathbf{x} \times (\rho\mathbf{E} + \mathbf{j} \times \mathbf{B})]_k = 0$$

a korábbiak alapján $\mathbf{x} \times \mathbf{g}$ az elektromágneses tér impulzusmomentum sűrűsége $\varepsilon_{ijk} x_j T_{kl} \equiv (\mathbf{x} \times \mathbf{T})_{il}$ az impulzusmomentum i-edik elemének áramsűrűsége.

7.5. Váltakozó áram, transzformátor, rezgőkörök

A váltakozó áram (gyakran kissé pontatlanul váltóáram) olyan elektromos áram, amelynek iránya és intenzitása periodikusan változik. Tiszta váltakozó áramról beszélünk, ha az egy periódus alatt egy irányban átfolyó össztöltés zérus. Nem tiszta váltakozó áram felbontható egy tiszta váltakozó áram és egy egyenáram komponens összegére.
Rokon fogalom a váltakozó feszültség, ami olyan feszültség, aminek nagysága és iránya periodikusan változik.
Elméleti és gyakorlati szempontból különös jelentősége van a tisztán szinuszos váltakozó áramnak.
Szinuszos váltakozó áram időfüggvénye felírható a következő alakban:

$$i(t) = I\cos(\omega t + \phi)$$

Ebben a kifejezésben

I az áram amplitúdója vagy csúcsértéke ω az áram körfrekvenciája, ami arányos a függvény frekvenciájával $\omega = f \cdot 2\pi$ összefüggés szerint. t az idő ϕ a jel fázisa
Váltakozó áramok és feszültségek intenzitásának jellemzésére a csúcsérték mellett (különösen a villamos energetikában) használják az effektív értéket is. Szinuszos függvény effektív értéke I csúcsérték esetén

$$I_{\text{eff}} = \frac{I}{\sqrt{2}}$$

A hálózati feszültség nagyságát például effektív értékével szokás megadni. A 230 V-os, Magyarországon használt fogyasztói feszültségszint tehát 230 V effektív értékű, körülbelül 325 V csúcsértékű feszültséget jelent.
Olyan helyzetben, amikor a frekvencia egy rendszerben a vizsgálat idején állandó, az amplitúdót és a fázist gyakran összevonják az úgynevezett komplex csúcsértékbe, amelyet a következő összefüggés definiál:

$$\hat{I} = Ie^{j\phi}$$

Ez a jelölés onnan származik, hogy az Euler-képlet értelmében $i(t) = \text{Re}\{Ie^{j\phi}e^{\omega t}\}$, ahol a komplex függvény időfüggetlen része Î. Ezzel a jelöléstechnikával egyetlen szimbólumban jelenik meg mind az amplitúdó, mind a fázis, ami rövidebb kifejezésekhez vezet, többek között azáltal, hogy lehetővé teszi az impedancia fogalmának bevezetését, aminek segítségével induktív vagy kapacitív hálózati elemek az ellenállásokhoz hasonlóan kezelhetők.

7.6. Általános váltakozó áram jellemzése

Egy periodikus időfüggvényt, így a váltakozó áram időfüggvényét is jellemezhetjük néhány jellegzetes adatával, ilyen például

a függvény T periódusideje, illetve az ebből számítható f = 1/T alapfrekvencia minimuma és maximuma, melyek abszolút értéke nem feltétlenül egyezik meg középértéke (amely megegyezik az egyenkomponenssel) effektív értéke (I_{eff}) abszolút középértéke (I_a), amely a függvény abszolút értékének átlaga

7.7. Effektív érték

A váltakozó feszültség, illetve áram effektív értéke intuitív megközelítéssel az az egyenfeszültség-szint vagy egyenáram-áramerősség, amely átlagosan ugyanakkora Joule-hőt termel egy ellenálláson. A pillanatnyi teljesítmény értéke$p = u^2(t)/R$, illetve $p = i^2(t)R$, ennek megfelelően az effektív érték matematikai definíciója az áram- vagy feszültségjel négyzetes középértékkel.

$$I_{\text{eff}} = \sqrt{\frac{1}{T}\int_0^T i^2(t)\,dt}$$

Az effektív érték és különböző egyéb jellemző értékek hányadosait is szokás számítani. A formatényező (kf) és a csúcstényező (km) az alábbi módon számítható:

$$k_f = \frac{I_{\text{eff}}}{I_a}$$

$$k_m = \frac{I_m}{I_{\text{eff}}}$$

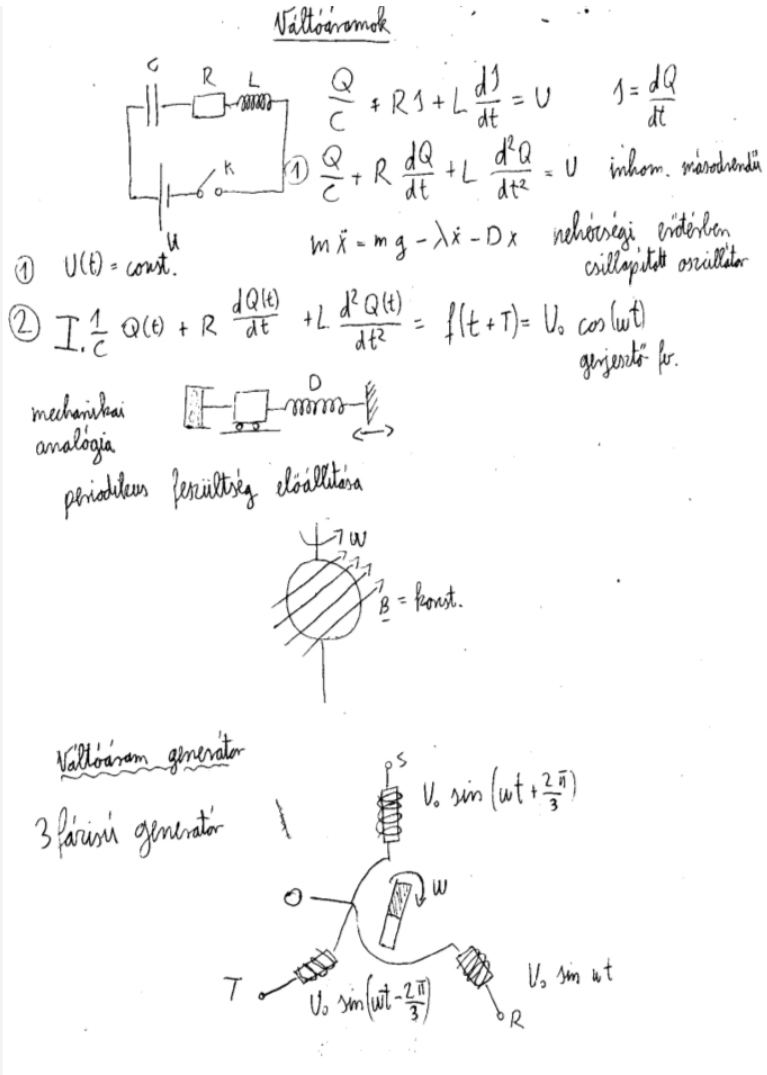
ahol I_a az abszolút középérték, I_m a csúcsérték.
Az effektív érték számítható a jel Fourier-sorának ismeretében is, ekkor

$$I_{\text{eff}} = \sqrt{I_0^2 + \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{\infty} I_n^2}$$

ahol I_0 a jel középértéke, I_n pedig a teljes $f_n = n \cdot f$ frekvenciájú szinuszos összetevő amplitúdója.

7.7.1. Rezgőkörök differenciálegyenletei

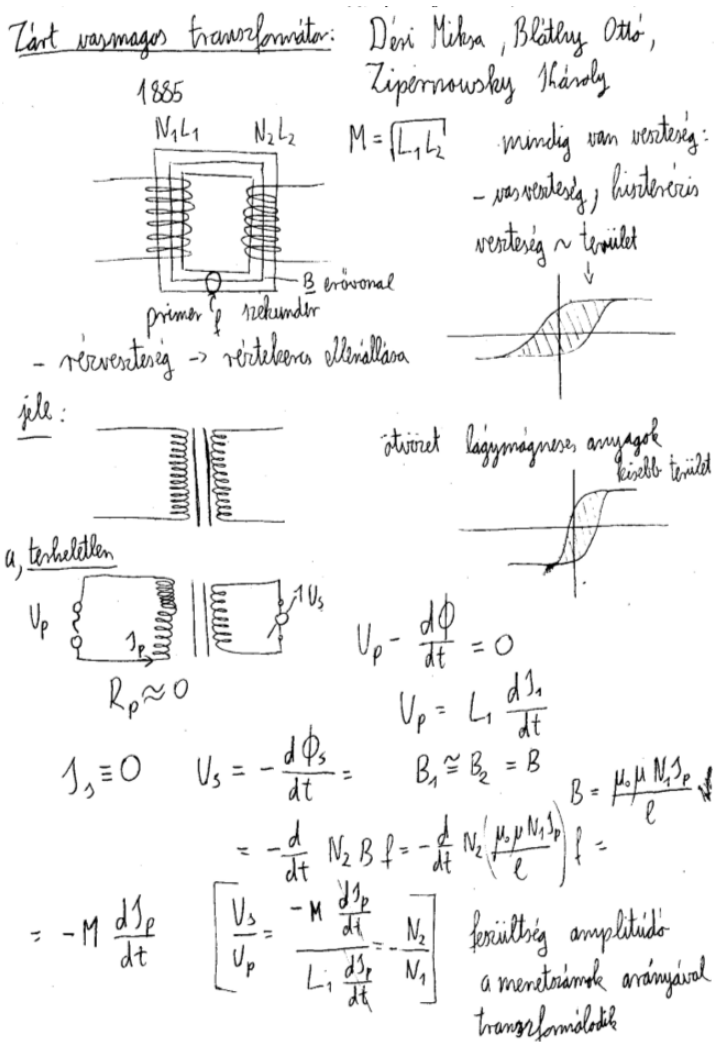
Bővebben 98.oldaltól. itt:`http://fizweb.elte.hu/download/Fizika-BSc/Elektromagnesseg/Jegyzet/elektromag-alap 2013.pdf`



7.6 ábra RLC rezgőkör differenciál egyenlete illetve váltóáramú generátor vázlata.

7.7.2. Zárt vasmagos transzformátor

Legegyszerűbb esetben két tekercs (primer és szekunder) helyezkedik el a közös, többnyire zárt vasmagon. A primer tekercs huzaljában folyó áram a jobbkézszabállyal meghatározható irányú mágneses erővonalakat hoz létre, ezek a mágneses erővonalak a tekercs belsejében összegződve hozzák létre az ábrán jelölt mágneses fluxust. Mivel ez a mágneses fluxus pillanatról pillanatra változó, a szekunder tekercsben feszültséget indukál. Ha a szekunder kapcsok egy terheléssel zárt áramkört képeznek, a körben áram folyik. Működése során a transzformátor primer oldalán a váltakozó áram a nyitott vagy zárt vasmagban változó mágneses fluxust kelt, ami a szekunder áramkörben feszültséget indukál. A szekunder oldalra villamos terhelést kapcsolva megindul a szekunder áram, és ezzel valósul meg az energiaátvitel. A működés alapfeltétele a primer oldali váltakozóáramú táplálás, mivel csak a változó mágneses fluxus képes a szekunder oldalon feszültséget kelteni.
A működési alapelvekből adódik az is, hogy a két áramkörben a frekvencia azonos, míg a primer és szekunder oldali feszültségek aránya jó közelítéssel a megfelelő oldali tekercsek menetszámainak arányával egyezik meg. A transzformátorban állandósult állapotban az átmenő energia nem halmozódhat, tehát a bemenő és a továbbmenő teljesítmény különbsége a transzformátor veszteségeivel egyenlő. Mivel a transzformátorok jó hatásfokkal működnek, a két teljesítmény gyakorlatilag ugyanakkora. Ebből adódik, hogy a primer és szekunder oldali áramok aránya durva közelítéssel megegyezik a menetszámáttétel reciprokával.
A transzformátort leggyakrabban a nagy teljesítményű (erőátviteli) villamos hálózatokban használják a feszültségszint, és ezzel az áramszint megváltoztatására. Ennek jelentősége abban áll, hogy azonos teljesítmény magasabb feszültségű átviteléhez kisebb áramra van szükség, így az átviteli hálózat ohmos veszteségei, valamint a vezetékek keresztmetszetei jelentősen csökkenthetők, és így lehetővé válik a villamos energia nagy távolságokra történő gazdaságos továbbítása. Bővebben 103.oldaltól.`http://fizweb.elte.hu/download/Fizika-BSc/Elektromagnesseg/Jegyzet/elektromag-alap-jegyzet_2013.pdf`



7.7 ábra Zárt vasmagos transzformátor vázlata.

A transzformátor a kölcsönös indukció elvén alapul. Ideális esetben a primer és a szekunder tekercsek között a csatolás tökéletes, azaz mindkét tekercs ugyanazt a mágneses fluxust (Φ) veszi körül. Ekkor a Faraday-féle indukciós törvény alapján (Maxwell II. egyenlete) az N_2 menetű szekunder tekercsben indukált feszültség: Egyetlen menet indukált effektív feszültsége:

$$U_e = 4k_f f \Phi_{\max}$$

míg N sorba kapcsolt menet indukált feszültsége:

$$U_e = 4k_f f N \Phi_{\max}$$

Másképpen:

$$U_2 = N_2 \frac{d\Phi}{dt}$$

A primer tekercs is ugyanezt a fluxust veszi körül, azaz

$$U_1 = N_1 \frac{d\Phi}{dt}$$

Az első egyenletből az N2, a másodikból az N1 tagot baloldalra rendezve a két jobboldal megegyezik, akkor a két baloldal is megegyezik, a két feszültség hányadosa mindenkor a két menetszám hányadosával egyezik meg, azaz

$$\frac{U_2}{N_2} = \frac{U_1}{N_1}$$

Az ideális transzformátor áramáttételét Maxwell I. egyenlete alapján határozhatjuk meg. Ez kimondja, hogy bármely zárt térbeli hurokra a mágneses térerősség vonalmenti integrálja megegyezik a zárt hurok által meghatározott felületen átfolyó áramok összegével. (Feltételezve, hogy az úgynevezett eltolási áramok elhanyagolhatóak.) Ideális csatoláshoz közel végtelen permeabilitású vasra van szükség, így feltételezhetjük, hogy a mágneses térerősség a vason belül közel zérus. Ezzel egy tetszőleges, mindenhol a vasban futó zárt hurokra felírt egyenlet a következő alakra egyszerűsödik: $N_1 I_1 + N_2 I_2 = 0$ Ebből pedig:

$$\frac{I_1}{I_2} = \frac{N_2}{N_1}$$

Ez a transzformátor áttételi egyenlete.
A primer és szekunder oldali teljesítmények megegyeznek, de ellentétes előjelűek. Az ideális transzformátor tehát veszteségmentes átalakító. Nem ideális esetben:

$$N_1 I_1 + N_2 I_2 = N_1 I_{1,0}$$

Ez a transzformátor gerjesztési egyenlete.

8. Hullámegyenlet és hullámjelenségek(Demeter Márton)

Az elektromágneses sugárzás egymásra merőlegesen haladó oszcilláló elektromos és mágneses tér, mely a térben hullám formájában fénysebességgel terjed energiát és impulzust szállítva. Részecskéi (kvantumai) a fotonok. A 380 nm és 780 nm közötti hullámhosszú elektromágneses sugárzás az emberi szem számára is látható, emiatt látható fénynek nevezik. Az összes elektromágneses sugárzás elrendezhető frekvencia (hullámhossz, energia) szerint, ekkor kapjuk az elektromágneses spektrumot. Az elektromágneses sugárzás fizikáját az elektrodinamika írja le.

8.1. Megismerésének története

Az elektromágneses hullámok elméletét James Clerk Maxwell (1831 – 1878) skót fizikus dolgozta ki 1873-ban. A „Tanulmány az elektromos és mágneses térről" című munkájában közzétett Maxwell-egyenletek megjósolták az elektromágneses hullámok létezését. Az elmélet magában foglalta a nagyon rövid ill. nagyon hosszú hullámhosszak létezését, az elektromágneses hullámoknak nincs felső ill. alsó hullámhosszhatára. Ezzel a feltételezéssel Maxwell olyan elektromágneses sugárzások létére következtetett, amelyeket csak a halála után fedeztek fel. A Maxwell-egyenletek helyességét Heinrich Hertz bizonyította be a szikragenerátorral végzett kísérletei alapján.
William Herschel (1738 – 1822) német csillagász észrevette, hogy a kísérleteiben használt fényforrás hőmérséklet-változást idéz elő. Ezzel felfedezte az infravörös (angol rövidítéssel: IR, azaz „infrared") hősugarakat. (Egy villanykörte a sugárzásának 90 százalékát ebben a tartományban bocsátja ki.)
Johann Ritter (1776 – 1829) 1801-ben kémiai vizsgálatok alapján arra a következtetésre jutott, hogy a (látható) kék hullámhosszú fény frekvenciájánál létezik nagyobb frekvencia, amely atomi szinten hat; ezzel felfedezte az ultraibolya (UV = ultraviola) sugárzást.
Az elektromágneses spektrum tartományaiból a földi légkör csak a látható fényt és a hozzá csatlakozó hullámhossznak kis részét, a közepes és termális infravörös $3 - 5\mu m$ és a 8-15 μm hullámhossztartományaiba eső sugárzást, valamint az 1 mm – 20 m hullámhosszú rádiósugárzást engedi át. Ennek a tartománynak a kiaknázására született meg a rádiócsillagászat.

8.2. Maxwell-egyenletek

Természetesen most is a Maxwell-egyenletekből indulunk ki, célunk, hogy az egyenletrendszerből származtassuk a hullámegyenleteket.

Megnevezés	Differenciális alak	Integrális alak	Szemléletes jelentése
Gauss-törvény	$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho$	$\oint_A \mathbf{D} \cdot d\mathbf{A} = \int_V \rho \cdot dV = Q$	Az elektromos tér forrásos, azaz elektromos töltés jelenlétében erővonalak indulnak a pozitív töltésekről, melyek a negatív töltéseken végződnek.
Faraday–Lenz-törvény	$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$	$\oint_L \mathbf{E} \cdot d\mathbf{l} = -\frac{d}{dt}\int_A \mathbf{B} \cdot d\mathbf{A}$	A mágneses indukció változása örvényes elektromos teret indukál, amelynek iránya ellenkező mint az őt létrehozó változás.
Gauss mágneses törvénye	$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$	$\oint_A \mathbf{B} \cdot d\mathbf{A} = 0$	A mágneses tér forrásmentes, azaz a mágneses tér erővonalai önmagukba záródnak.
Ampère-törvény Maxwell kiegészítésével	$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}$	$\oint_L \mathbf{H} \cdot d\mathbf{l} = \int_A \mathbf{j} \cdot d\mathbf{A} + \frac{d}{dt}\int_A \mathbf{D} \cdot d\mathbf{A}$	Az elektromos áram, illetve a folytonossági egyenlet kielégítéséből adódó eltolási áram mágneses teret hoz létre.

8.1 ábra A Maxwell egyenletek (Wikipédiáról)

8.3. Rugalmas és elektromágneses hullámok leírása

A hullámterjedés dinamikai leírása, a hullámegyenlet.
A hullám leírása akkor teljes, ha a hullámfüggvényt a hullámot létrehozó hatások segítségével le tudjuk vezetni, azaz ismerjük a hullámfüggvény meghatározására szolgáló fizikai egyenletet.
Ez a hullámegyenlet, amelyet mechanikai hullámok esetén a hullámban elmozduló közeg térfogatelemére felírt mozgásegyenlet segítségével, elektromágneses hullámoknál pedig az elektromágnességtan alapegyenleteiből (Maxwell-egyenletek) kaphatunk meg.

8.3.1. Hullámegyenlet mechanikai hullámok esetén

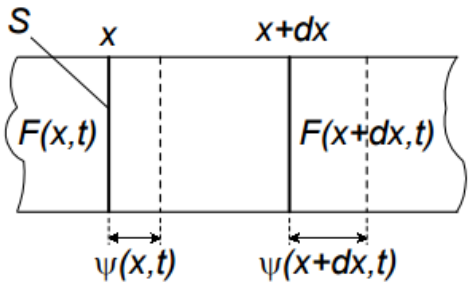
A hullámegyenlet levezetésének alapelve az, hogy a közeg elemi darabjára felírjuk a mozgásegyenletet, és a mennyiségeket a hullámfüggvénnyel fejezzük ki. Ekkor a hullámfüggvényre vonatkozó differenciálegyenletet kapunk.
Példaként S keresztmetszetű rugalmas rúdban x-irányban terjedő egydimenziós longitudinális hullámra végezzük el a számolást. A mozgásegyenlet egy dm tömegű térfogatelemre

$$xdF = dm \cdot a_x$$

A rúd elemi darabjára ható dF erő a Hooke-törvény segítségével fejezhető ki az elmozdulást megadó hullámfüggvénnyel. Ehhez először írjuk fel az elemi darab ε deformációját (8.2ábra), ami a

$$d\Psi = \Psi(x + dx, t) - \Psi(x, t)$$

hosszváltozás és az eredeti dx hossz hányadosa, vagyis



8.2 ábra Mechanikai hullámterjedés

$$\varepsilon = \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x}$$

A Hooke törvény szerint az erő és a deformáció arányos

$$F(x,t) = SE\varepsilon(x,t) = SE\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x}$$

Az elemi darabra ható erő adott pillanatban

$$dF = dF|_t = F(x + dx, t) - F(x, t) = \frac{\partial F(x,t)}{\partial x}dx$$

ami az erő kifejezése alapján:

$$dF = SE\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}dx$$

A gyorsulás a helykoordináta (itt a hullámfüggvény) második időderiváltja, azaz

$$a_x = \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial t^2}$$

A vizsgált térfogatelem tömege a ρ sűrűséggel kifejezve:

$$dm = Sdx\rho$$

Így a $dF = dma_x$ mozgásegyenlet a hullámfüggvénnyel kifejezve:

$$\frac{E}{\rho}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} = \frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial t^2}$$

Ez a hullámterjedést leíró hullámegyenlet a vizsgált esetben. Ennek megoldása a harmonikus hullámot leíró

$$\Psi(x,t) = Acos(\omega t - \mathbf{kx} + \phi)$$

hullámfüggvény is.
Behelyettesítés után kapjuk, hogy ez a függvény akkor megoldás,ha a terjedési sebesség

$$c = \sqrt{\frac{E}{\rho}}$$

Így a hullámegyenlet:

$$c^2\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} = \frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial t^2}$$

alakba írható.
Kimutatható, hogy ez az alak nem csak a fenti speciális esetben érvényes, hanem ez az egydimenziós hullámegyenlet általános alakja.
Konkrét hullámterjedés vizsgálatánál a hullámegyenlet levezetése során mindig megkapjuk a terjedési sebesség kifejezését az adott esetben. Így pl.
Transzverzális hullám megfeszített húrban: $c\sqrt{\frac{F}{\rho S}}$(F a húzóerő, S a húrkeresztmetszete).
Nyomás- és sűrűséghullám gázban: $c\sqrt{\frac{\kappa}{\rho_0}}$ (κ a kompressziómodulus, $\rho_0$az átlagos sűrűség).
Nyírási hullám rugalmas rúdban:$c\sqrt{\frac{G}{\rho}}$ (G a nyírási modulus)
Gázban és folyadékban gyakorlatilag csak longitudinális hullámok terjednek(nyírófeszültség nem ébred bennük). Szilárd anyagokban longitudinális és transzverzális hullámok is terjednek, és terjedési sebességük eltérő: általában a longitudinális hullámok terjednek gyorsabban.

8.3.2. Hullámegyenletek származtatása a Maxwell egyenletekből

Vegyük most a Maxwell-egyenleteket töltés és árammentes térben, $\mathbf{j}, \rho = 0$.

$$c^2 rotB = \partial_t\mathbf{E} \qquad div\mathbf{E} = 0 \qquad rot\mathbf{E} = -\partial_t\mathbf{B} \qquad div\mathbf{B} = 0$$

Keressük a triviálistól ($\mathbf{E}, \mathbf{B} \neq 0$) megoldásokat. Képezzük az első egyenlet rotációját:

$$rotrot\mathbf{B} = graddiv\mathbf{B} - \Delta\mathbf{B} = \frac{1}{c^2}\partial_t(rot\mathbf{E}) = -\frac{1}{c^2}\partial_t^2\mathbf{B}$$

Innen mivel $divB = 0$ következik:

$$\Delta\mathbf{B} - \frac{1}{c^2}\partial_t^2\mathbf{B} = 0$$

Hasonlóan az elektromos térre nézve:

$$\Delta\mathbf{E} - \frac{1}{c^2}\partial_t^2\mathbf{E} = 0$$

Ezek az ún. *homogén* vagy *szabad* hullámegyenletek. Mivel vektoriális egyenletek, $\mathbf{E}$ és $\mathbf{B}$ mindhárom derékszögű komponensére ilyen egyenlet érvényes. Speciális megoldásokat keresünk. $\mathbf{E}(\mathbf{r},\mathbf{t}) = \mathbf{E_0}f(t - \frac{\mathbf{nr}}{c})$ megoldása az egyenletnek, ha $\mathbf{E_0}$ állandó, $\mathbf{n}$ tetszőleges egységvektor, f argumentumának tetszőleges függvénye.
Az hogy ez valóban megoldás, behelyettesítéssel bizonyosodhatunk meg belőle.
Az ilyen megoldást síkhullámmegoldásnak nevezzük.

Miért síkhullám?
A kérdés megválaszolásához stílusosan tegyünk fel még egyet...
Hol vannak azok a pontok a térben, melyek egy adott t_0 időpontban $\mathbf{E}$ ugyanazt az értéket veszi fel?
$\mathbf{E}$ értéke biztosan ugyanaz lesz azokban az $\mathbf{r}$ helyvektorú pontokban, melyekre teljesül, hogy $t_0 - \frac{\mathbf{nr}}{c}$ állandó. Minthogy t_0 állandó, ehhez $\mathbf{nr}$ =áll kell teljesüljön, ami egy az $\mathbf{n}$ vektorra merőleges sík egyenlete.
Természetesen előfordulhat, hogy különböző $\mathbf{n}$-re merőleges síkokban veszi fel $\mathbf{E}$ ugyanazt az értéket.
Tegyünk fel tehát egy újabb kérdést: hol vannak a térben azok a pontok, amelyekben $t_0 + \Delta t$ időpontban $\mathbf{E}$

ugyanazt az értéket veszi fel, mint amit felvett t_0 időpontban az előző síkon. Ez azokra az $\mathbf{r_0} + \Delta\mathbf{r}$ helyvektorú pontokban teljesül melyekre igaz:

$$t_0 - \frac{\mathbf{nr}}{c} = t_0 + \Delta t - \frac{\mathbf{n}(\mathbf{r} + \mathbf{\Delta r})}{c}$$

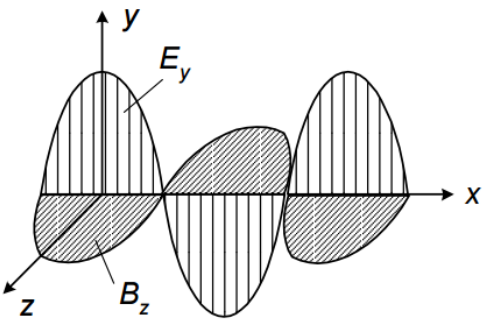
Innen $\mathbf{n} * \Delta\mathbf{r} = c\Delta t$ ez pedig azt jelenti, hogy a két sík távolsága $c\Delta t$.
Most adtuk meg, az elektromágneses hullámok terjedési sebességét, amely nem más mint c. Tehát a Maxwell egyenletekben szereplő c állandó mely nem más mint $\frac{1}{\sqrt{\mu_0\epsilon_0}} \approxeq 299792458m/s$ (vákuumban), ez a fény terjedési sebessége, ami nem meglepő, hiszen a fény felfogható elektromágneses hullámként is.
f argumentumában szereplő $\mathbf{n}$ vektor a hullám terjedési iránya.
Hasonlóképpen belátható, hogy $\mathbf{E}(\mathbf{r},\mathbf{t}) = \frac{1}{r}\mathbf{E_0}f(t \pm \frac{r}{c})$ is megoldása a szabad hullámegyenletnek, ez az ún. *gömbhullámmegoldás*. Az indoklás az előzőekhez hasonlóan "brute-force" módon behelyettesítéssel történhet. A - előjel egy pontból kifutó, a + előjel egy pontba befutó hullámokat jelzi.
Mivel a hullámegyenletekhez a Maxwell-egyenletek differenciálásával, nem azonos átalakítással jutottunk, meg kell győződnünk róla, hogy a megoldás a Maxwell-egyenleteket is kielégíti.
Vizsgáljunk egy $\mathbf{E}(\mathbf{r},\mathbf{t}) = \mathbf{E_0}f(t - \frac{\mathbf{nr}}{c})$, $\mathbf{B}(\mathbf{r},\mathbf{t}) = \mathbf{B_0}f(t - \frac{\mathbf{nr}}{c})$ elektromágneses síkhullámot. A $div\mathbf{E} = 0$ és $div\mathbf{B} = 0$ egyenletekbe való behelyettesítés arra vezet, hogy $\mathbf{En}, \mathbf{Bn} = 0$ kell teljesüljön, azaz $\mathbf{E}, \mathbf{B}$ merőlegesek a terjedési irányra, tehát transzverzális hullámok.Bármelyik rotációs egyenletbe való behelyettesítéssel, azt kapjuk, hogy $\mathbf{B} = \frac{1}{c}\mathbf{n} \times \mathbf{E}$, azaz $\mathbf{E}, \mathbf{B}$ is merőleges egymásra.
Az ilyen transzverzális hullámok energiasűrűsége

$$u = \frac{\epsilon_0}{2}\mathbf{E}^2 + \frac{\epsilon_0 c^2}{2}\mathbf{B}^2$$

energia-áramsűrűsége:

$$\mathbf{S} = \epsilon_0 c^2 \mathbf{E} \times \mathbf{B} = cu\mathbf{n}$$

(lásd Elektrodinamika fejezet) Tehát az energiaszállítás iránya megegyezik a terjedési iránnyal.



8.3 ábra Elektromágneses hullámterjedés

Megjegyezzük, hogy most üres térben terjedő elektromágneses hullámokról beszélünk, ezekre érvényesek ezek az állítások.
Vannak longitudinális elektromágneses hullámok is, hullámvezetőkben (drótokban) ilyenek is terjednek. Ilyenkor a vezető felületen érvényes határfeltétel miatt $\mathbf{E_0}, \mathbf{B_0}$ amplitúdója nem állandó, a divergenciás egyenletekben való behelyettesítésnél ezeket is deriválni kell, ezért a hullámok nem feltétlenül transzverzálisak.

8.4. Vezetőben terjedő elektromágneses hullámok

Ezen jelenségkör leírásához az első Maxwell-egyenletet $rot\mathbf{H} = \mathbf{j}_{val} + \partial_t\mathbf{D}$ alakja alkalmas, a vezetőben alkalmazzuk a differenciális Ohm-törvényt, így $\mathbf{j}_{val} = \sigma\mathbf{E}$. Feltételezzük, hogy a közeg lineáris, tehát $\mathbf{B} = \mu\mathbf{H}, \mathbf{E} = \epsilon\mathbf{D}$ anyagi egyenletek érvényesek és továbbá $\rho_{val} = 0$. A vákuumbeli hullámegyenletek levezetéséhez hasonlóan a

$$\Delta\mathbf{E} - \mu\epsilon\partial_t^2\mathbf{E} - \mu\sigma\partial_t\mathbf{E} = 0 \qquad \Delta\mathbf{B} - \mu\epsilon\partial_t^2\mathbf{B} - \mu\sigma\partial_t\mathbf{B} = 0$$

ún. *távíró egyenletek*-hez jutunk. $\sigma = 0$ esetén a dielektrikumokban érvényes hullámegyenleteket kapjuk, a terjedési sebesség ott $v = \frac{c}{\sqrt{\epsilon_r\mu_r}} = \frac{1}{\sqrt{\mu\epsilon}}$.
A periodikus síkhullám megoldás:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},\mathbf{t}) = \mathbf{E_0}exp\left(-\frac{\omega}{c}\kappa(\mathbf{nr})\right)exp[i(wt - \mathbf{kr})]$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r},\mathbf{t}) = \mathbf{B_0} exp\left(-\frac{\omega}{c}\kappa(\mathbf{nr})\right) exp[i(wt - \mathbf{kr})]$$

Itt $\kappa = c\sqrt{\frac{\epsilon\mu}{2}}\sqrt{\sqrt{1+\tau^2}-1}$, a vezető extinkciós koefficiense(lásd Lambert-Beer tv.), $\tau = \omega\mu\sigma$.
Ezek a síkhullámok transzverzálisak (ez a megoldás végtelen vezető közegben érvényes), $\mathbf{E},\mathbf{B}$ merőleges egymásra, fáziskülönbség van közöttük, ami jó vezetőre és nem túl nagy frekvenciára $\approx 45^o$. Hallgatólagosan feltételezzük, hogy a σ frekvenciától független állandó, túl nagy frekvenciánál ez sem igaz.
Ebben a viszonylag egyszerű elméletben a szigetelők átlátszóak, mert $\sigma = 0$ esetén $\kappa = 0$, a vezetők nem átlátszóak, mert vezetőkre $\kappa > 0$. Ezzel szemben a jó szigetelő ebonit nem átlátszó, a jó vezető konyhasó oldat átlátszó.
Az ellentmondás legfőbb oka az, hogy a látható frekvenciatartományban a σ nem független a frekvenciától.
A vezetőben haladó elektromágneses hullám amplitúdója exponenciálisan csökken, a csillapodás frekvenciafüggő.
A hullám hatására meginduló áram hőt fejleszt, ez fogyasztja az elektromágneses tér energiáját.

8.5. Diszperzió, csoport és fázissebesség, Doppler-effektus

Tekintsük most a Maxwell-egyenleteket teljes időfüggésükkel. Megmutatható, hogy a konstitúciós-relációk lineáris közelítése anyag esetén megfelelő lesz (lásd. Elektrodinamika/Energiasűrűség). Ekkor részlegesen homogén közegben ugyanazok az egyenletek igazak, mint vákuumban, így az elektrodinamika összes egyenlete hasonló szerkezetű lesz:

$$\Box\Psi = -f \qquad (\Delta - \frac{1}{c^2}\partial_t^2)\Psi = -f$$

Lorentz-mértékben a potenciálok minden komponensére, Coulomb-mértékben a vektorpotenciálra, adott forrás esetén $\mathbf{E},\mathbf{B}$ komponenseire ez az egyenlet lesz igaz. A d'Alambert operátorban lévő konstans lineáris közelítés esetén:

$$c_k = \frac{1}{\sqrt{\epsilon\mu}} = \frac{c}{\sqrt{\epsilon_r\mu_r}} = \frac{c}{n} \qquad n = \sqrt{\mu_r\epsilon_r}$$

n a törésmutató.
A legtöbb anyagra, amelyben a fény képes terjedni, μ_r jó közelítéssel 1. Ezért a törésmutató a vizsgálatánál használhatjuk az $n \approxeq \sqrt{\epsilon_r}$ képletet. A fenti egyenlet inhomogén lineáris másodfokú differenciálegyenlet. Az általános megoldást két összege:

(a) a homogén rész (f=0) általános megoldása

(b) az inhomogén rész egy partikuláris megoldása

Most kezdjük a homogén rész vizsgálatával, azaz:

$$\Box\Psi = 0$$

Az egyenlet megoldását keressük $\Psi(\mathbf{x},t) \approx exp(\pm iwt - i\mathbf{kx})$ alakban. Visszaírva az egyenletben:

$$\omega^2 = c^2k^2$$

egyenletet kapjuk, melynél ω függvénye $\mathbf{k}$-nak. Ezt *diszperziós relációnak*, vagy röviden csak diszperziónak hívják.
Ha nincs kitüntetett irány a térben (izotróp tér), akkor csak $|\mathbf{k}|$-tól függhet ω- jelen esetben a függés lineáris.
Az általános megoldás a fenti alakok összege tetszőleges együtthatóval:

$$\Psi(\mathbf{x},t) = \frac{1}{2}\int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} a(\mathbf{k}) exp(-iw_k t + \mathbf{kx}) + b(\mathbf{k}) exp(iw_k t + \mathbf{kx}), \qquad w_k = kc$$

a kezdeti 1/2 csak a kényelem kedvéért van a képletben, hiszen a és b tetszőleges együtthatók.
Mivel Ψ vaós ($\Psi^*(\mathbf{x},t) = \Psi(\mathbf{x},t)$ ezért $a^*(-\mathbf{k}) = b(\mathbf{k})$. Emiatt:

$$\Psi(\mathbf{x},t) = \Re\int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} a(\mathbf{k}) exp(-iw_k t + \mathbf{kx}) = \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} a_0(\mathbf{k}) cos(-w_k t + \mathbf{kx} + \phi_k))$$

ahol $a(\mathbf{k}) = a_0 exp(i\phi_k)$. Emiatt minden lineáris kifejezésben nyugodtan használhatjuk a komplex megoldást (b(k) nélkül), és a végén a valós részt vesszük.
Egy dimenziós esetben az egyenletünket meg lehet általános kezdőfeltételekre oldani:

$$1D: \qquad \ddot{\Psi} = c^2\Psi'' \qquad \Longrightarrow \qquad \Psi(x,t) = f_1(x-ct) + f_2(x+ct)$$

A két függvényt a kezdőfeltételekből határozzuk meg:

$$\Psi(x,0) = f_1(x) + f_{2(x)} \qquad \partial_t\Psi(x,0) = -c(f_1'(x) - f_2'(x))$$

azaz

$$f_1^{'}(x) = \frac{1}{2}\left(\Psi^{'}(x,0) - \frac{1}{c}\dot{\Psi}(x,0)\right) \qquad f_2^{'}(x) = \frac{1}{2}\left(\Psi^{'}(x,0) - \frac{1}{c}\dot{\Psi}(x,0)\right)$$

ahonnan integrálással kaphatjuk ak ét függvényt.

8.5.1. Fázis- és csoport sebesség

Tekintsük most azt az általános esetet, amikor $\omega_k = ck$ nem áll fent, hogy a tárgyalás a későbbiekre is érvényes lehessen.
Mit ír le a megoldásunk?
Tekintsünk egyetlen módust először, azaz $a(\mathbf{q}) = a\delta(\mathbf{q})$. Ekkor a valódi, valós megoldás alakja:

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = acos(\omega t - \mathbf{kx} + \phi)$$

A megoldás időben és térben is periodikus. Egy $t = t_0$-n kiválasztott x_0 ponttal azonos fázisban lévő pontok halmazának elemei:

$$\omega t_0 - \mathbf{kx_0} + \phi = \omega t - \mathbf{kx} + \phi + 2n\pi \qquad n \in \aleph$$

Ebből

$$\mathbf{x} = \mathbf{x_0} + (t - t_0)v_f\hat{\mathbf{k}} + \lambda n\hat{\mathbf{k}} + \beta\hat{\mathbf{k}_\perp}, \qquad v_f = \frac{\omega_k}{k}, \qquad \lambda = \frac{2\pi}{k}, \qquad \mathbf{kk}_\perp = \mathbf{0}$$

$t = t_0$-nál tehát $\mathbf{x_0}$-al azonos fázisban van a $\mathbf{k}$-ra merőleges sík (hullámfront), valamint ennek λ-val való eltoltjai (hullámhossz). Ez a megoldás tehát haladó síkhullámot ír le (ún. *monokromatikus síkhullám*). Az idő előrehaladtával a hullámfrontok $\hat{\mathbf{k}}$ irányában v_f sebességgel haladnak tovább, vagyis ez az azonos fázisú pontok sebessége, az ún. *fázissebesség.* Vákuumban $v_f = c$ =állandó. Miután az elektromágnese hullámokat a fénnyel azonosítjuk, ezért a fázissebesség a fénysebesség.
Monokromatikus síkhullámra igaz, hogy:

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \Psi(\mathbf{x} - v_f t\hat{\mathbf{k}}, 0)$$

azaz a síkhullámalak csak eltolódik, nem deformálódik. Általános $a(\mathbf{k})$ esetén ez nem lesz így, a hullám gyorsan összekuszálódik. Viszont ha azonos irányú síkhullámokat teszünk össze, azaz egy dimenziós változást nézünk, akkor a hullámterjedés irányát tekintve x iránynak felírhatjuk:

$$\Psi(x, t) = \int \frac{dk}{2\pi} a(k) exp(-i\omega_k t + ikx)$$

Tegyük fel, hogy a(k) valamilyen k_0 körül erősen csúcsos függvény, és azon a tartományon, ahol $a(k) \neq 0$, ott ω_k lassan változik. Jelöljük $a(k) = r(k - k_0)$, ekkor t=0-nál a hullám alakja:

$$\Psi(x, 0) = \int \frac{dk}{2\pi} a(k) exp(ikx) = exp(ik_0 x) \int \frac{dk}{2\pi} r(k) exp(ikx) = exp(ik_0 x) r(x)$$

ahol r(x) lassan változó függvény (hiszen csak kis hullámszámú módusokat tartalmaz). A fenti alak egy r(x)-szel modulált síkhullám, neve *hullámcsomag.* A körfrekvenciát is sorba fejthetjük k_0 körül:

$$\omega_k = \omega_0 + (k - k_0)\left(\frac{d\omega_k}{dk}\right)|_{k=k_0} + ...$$

Bevezetjük az ún. *csoportsebességet* a következőképpen:

$$v_{cs} = \left(\frac{d\omega_k}{dk}\right)|_{k=k_0}$$

ekkor

$$\int \frac{dk}{2\pi} r(k - k_0) exp(-i(\omega_0 + (k - k_0)v_{cs})t + ikx) = exp(-i\omega_0 t + ik_0 x) \int \frac{dk}{2\pi} r(k) exp(ik(x - v_{cs}t))$$

$$= exp(ik_0(x - v_f t)) r(x - v_{cs}t)$$

Ez ugyanazzal a függvénnyel modulált síkhullám alak, az eredetihez hasonló. A burkoló v_{cs} sebességgel halad, ez indokolja a csoportsebesség elnevezést. A fázis a hullámcsomagon belül továbbra is v_f sebességgel megy előre. Általában $v_{cs} \neq v_f$, kivéve, ha ω_k lineáris k-ban, mint a vákuumbeli fényterjedésnél.
Információ küldésekor mindig hullámcsomagot kell előállítani, hiszen végtelen síkhullámban nincs semmi szerkezet. Emiatt az információtovábbítás sebessége v_{cs}.

Előfordulhat bizonyos esetekben, hogy ezek a sebességek nagyobbak a fénysebességnél, ez azonban csak annak a jele, hogy ott nem használhatók ezek a fogalmak.
Ha a fázissebességet a fénysebességből a törésmutatóval képezzük, amelynek ismerjük a frekvenciafüggését:

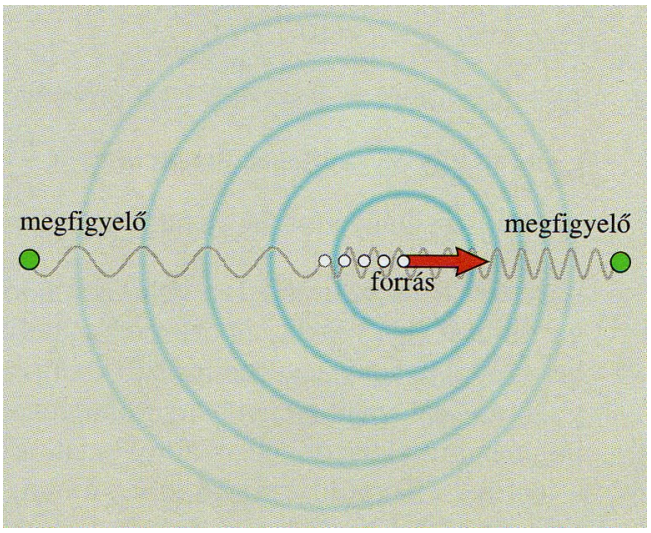
$$v_f = \frac{c}{n} = \frac{\omega}{k} \Longrightarrow k = \frac{n\omega}{c}$$

Ekkor a csoportsebesség:

$$v_{cs} = \frac{1}{\frac{dk}{d\omega}} = \frac{c}{n + \omega\frac{dn}{d\omega}} = \frac{c}{n + \frac{\omega}{2n}\frac{d\varepsilon_r}{d\omega}}$$

8.6. Doppler-effektus

A Doppler-effektus a hullám frekvenciájában és ezzel együtt hullámhosszában megjelenő változás, mely amiatt alakul ki, hogy a hullámforrás és a megfigyelő egymáshoz képest mozog. Nevét felfedezőjéről, Christian Dopplerről kapta.
A fénynél a jelenséget vöröseltolódásnak (távolodáskor) illetve kék eltolódásnak (közeledéskor) nevezzük, de a vöröseltolódás (kék eltolódás) oka más is lehet.
Az olyan hullámok esetében, mint a hanghullámok, amelyek valamilyen közegben terjednek, a megfigyelő és a forrás közeghez viszonyított sebességével kell számolni. A teljes Doppler-effektus a két mozgásból eredő hatásból származik. Mindkét hatást külön tárgyaljuk.



8.4 ábra A Doppler-effektus szemléltetése

8.6.1. Felfedezése

Az 1830-as évekre a vonatok sebessége elérte az 50 km/h-t. A zajosan elhaladó vonatok hangja folyamatosan megfigyelhető volt.
Christian Andreas Doppler osztrák matematikus és fizikus megfigyelte a vonatok elhaladását és észrevette, hogy a hangjuk hirtelen elmélyül, amint a megfigyelő mellett elhaladnak, és gondolkozni kezdett ennek lehetséges magyarázatán. 1843-ra elméletét, vagyis azt, hogy „a frekvencia megváltozik, ha a forrás mozog”, fényre is kiterjesztette, és azt állította, hogy ez magyarázza a távoli kettőscsillagok fényében észlelhető kék és vörös színárnyalatot (az egymás körül keringő és éppen felénk közeledő csillag fénye kékebbnek, a tőlünk távolodó vörösebbnek látszik).
A Cseh Tudományos Társaságnak 1844-ben benyújtott értekezésében Doppler ismertette elméletét, miszerint a megfigyelő felé mozgó tárgy által kibocsátott hang vagy fény összenyomódik, ezáltal frekvenciája magasabb (fény esetén kékebb) lesz. Ennek ellenkezője történik, ha az objektum a megfigyelőtől távolodik: a hang mélyebb, a fény vörösebb lesz. Azt állította, hogy ez megmagyarázza a csillagok fényében gyakran látható vöröses és kékes árnyalatot. Valójában az eltérés olyan kicsi, hogy azt még nem lehetett kimutatni Doppler korában, mert nem álltak rendelkezésre megfelelően érzékeny műszerek (a színek megfigyelt eltérését nem a mozgás, hanem a csillagok ténylegesen eltérő színű fénye okozta). Dopplernek a gyakorlatban is bizonyítania kellett elméletét.
Ezt fénnyel nem tudta megtenni, mert nem voltak elég fejlettek a távcsövek és a mérőberendezések. Elhatározta, hogy a hang frekvenciaeltolódását fogja bemutatni és megmérni.

1845-ös híres kísérletében zenészeket ültetett egy vonatra, akiknek az volt a feladatuk, hogy egész idő alatt egyetlen hangmagasságot játsszanak a trombitájukon. Ugyanekkor más zenészek a vonatállomáson helyezkedtek el (akiket kitűnő zenei hallásuk alapján választott ki).
Az ő feladatuk az volt, hogy a vonaton utazó zenészek által játszott hang magasságát jegyezzék le, amikor a vonat közeledik és amikor tőlük távolodik. A lejegyzett hangok kicsit magasabbak voltak, amikor a vonat közeledett, és alacsonyabbak, amikor a vonat távolodott, annál a tényleges hangnál, amit a vonaton ülők játszottak. A kísérletet többször megismételték, különböző, de minden alkalommal állandó hangmagasságokkal.
A kísérletet úgy is elvégezték, hogy a vonaton és az állomáson is hangszeres zenészek ültek, és ugyanazt a hangot játszották. Az állomáson lévő megfigyelők számára világos volt, hogy a két hang magassága eltér, és egy szabályos lüktetés is észlelhető volt (ez a két hangmagasság különbségéből keletkezik, a jelenség „lebegés" néven ismert - ez a hangszerek összehangolásakor is jelentkezik, a zenészek számára jól ismert dolog).
Ezzel "bizonyítást nyert" az elmélet, amit Doppler-eltolódásnak neveztek el.
A szirénahang frekvenciája aszerint tolódik el, hogy a mentőautó sebességének mekkora a megfigyelő felé mutató összetevője
A francia Hippolyte Fizeau Dopplertől függetlenül felfedezte a jelenséget elektromágneses hullámoknál 1848-ban (néha emiatt „effet Doppler-Fizeau" néven hívják Franciaországban).
Fontos észrevenni, hogy valójában nem változik meg a forrás által kibocsátott hang frekvenciája, csak az észlelő érzékeli így. Hogy megértsük, mi történik valójában, egy hasonlatot írunk le. Valaki egy labdát dob felénk minden másodpercben, mindegyik labda állandó sebességgel közeledik hozzánk. Ha a dobó egy helyben van, akkor másodpercenként kapok egy labdát. Ha viszont mozog felém, akkor gyakrabban, mert egyre közelebbről jönnek a labdák.
Ha a mozgó forrás f_0 frekvenciájú hullámot bocsát ki, akkor a közeghez képest álló megfigyelő az alábbi módon meghatározható f frekvenciát észlel:

$$f = f_0 \frac{c}{c-v}$$

ahol c a hullám sebessége a közegben és v a hullámforrás (radiális) sebessége a közeghez képest (pozitív=közeledő, negatív=távolodó).
Megjegyzés: említsük meg, hogy a forrás mozgása nem változtatja meg a mért hullámsebességet, de a hullámhosszat igen:

$$\lambda = \lambda_0 \frac{c-v}{c}$$

Hasonló elemzés a mozgó megfigyelőre és álló forrásra a következőt kapjuk (a megfigyelő sebessége a v):

$$f = f_0 \frac{c+v}{c} = f_0 \left(1 + \frac{v}{c}\right)$$

Kiegészítésként említsük meg, hogy a mért hullámhossz nem függ a megfigyelő sebességétől, de a hullámsebesség igen: $c_{mert} = c + v$):
Általánosan nézve az egydimenziós esetet, legyen a közeghez rögzített koordináta-rendszerben a forrás sebessége v_f, a megfigyelőé v_m, továbbá legyen $n = 1$ ha a hullámok 'balról' (azaz negatív irányból) érkeznek a megfigyelőhöz és $n = -1$, ha 'jobbról' (azaz pozitív irányból). Ekkor a megfigyelő által észlelt frekvencia:

$$f = f_0 \frac{|c - nv_m|}{|c - nv_f|}$$

Különösen érdekes a vf>c, f>m (vagy vf<-c, f<m) eset, ekkor a megfigyelő egyszerre két hullámot érzékel, két különböző frekvenciával:

$$f_{1,2} = f_0 \frac{|c \pm v_m|}{|c \pm v_f|}$$

A többdimenziós eset vizsgálatánál jelölje f a forrás és m a megfigyelő helyvektorát (továbbra is feltesszük hogy a forrás és a megfigyelő egyenesvonalú egyenletes mozgást végez, és hogy a forrás frekvenciája állandó). Először oldjuk meg t-re az alábbi egyenletet:

$$|\mathbf{m} - (\mathbf{f} - t\mathbf{v}_f)| = ct$$

Ha található egy (esetleg két) megfelelő t érték, akkor jelölje n a kapott vektor irányába mutató egységvektort:

$$\mathbf{n} := \frac{\mathbf{m} - (\mathbf{f} - t\mathbf{v}_f)}{|\mathbf{m} - (\mathbf{f} - t\mathbf{v}_f)|}$$

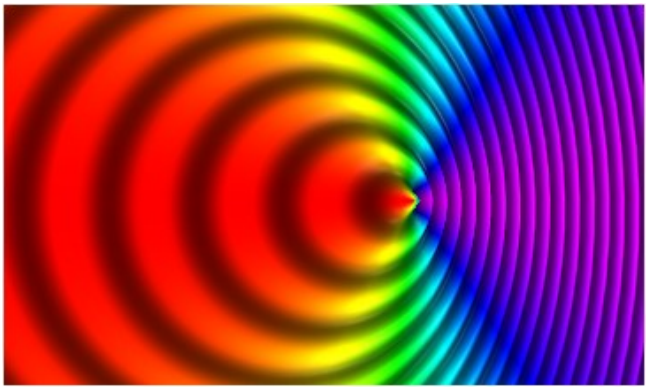
Az n vektort felhasználva az alábbi képlettel számíthatjuk ki a megfigyelő által észlelt frekvenciát:

$$f = f_0 \frac{|c - \mathbf{n}\mathbf{v}_m|}{|c - \mathbf{n}\mathbf{v}_f|}$$

Az első kísérlet, hogy Doppler elképzelését fényre kiterjesszük, nemsokára megszületett Fizeau-tól. Valójában a fénynek nincs szüksége közegre, hogy terjedjen, és a Doppler-effektus értelmezéséhez fény esetén a speciális relativitáselmélet használata szükséges.

8.6.2. Relativisztikus Doppler-effektus(csak érdekességképpen)

A relativisztikus Doppler-effektus kiszámítása a klasszikus Doppler-effektushoz hasonlóan történik, azzal a különbséggel, hogy a Galilei-transzformáció helyett a Lorentz-transzformációt alkalmazzuk a forrás és a közeg, illetve a közeg és a megfigyelő közötti váltásoknál. Szorítkozzunk most csak 1 dimenzióra:



8.5 ábra A relativisztikus Doppler-effektus szemléltetése

Legyen a közeghez rögzített koordináta-rendszerben c, w, f, v_f, m, v_m rendre a fénysebesség, a hullámsebesség, a forrás helye, sebessége, a megfigyelő helye és sebessége. Legyen továbbá n=1, ha a hullámok balról (negatív irányból) érik a megfigyelőt, és n=-1, ha jobbról (pozitív irányból).
Ha a forrás mozog és a megfigyelő áll, a tapasztalt frekvencia:

$$f = f_0\sqrt{1-\frac{v_f^2}{c^2}}\frac{w}{|w-nv_f|}$$

Ha a megfigyelő mozog és a forrás áll, a képlet a következő:

$$f = f_0\frac{1}{\sqrt{1-\frac{v_m^2}{c^2}}}\frac{|w-nv_m|}{w}$$

Az általános esetben (a forrás és a megfigyelő is mozog):

$$f = f_0\frac{\sqrt{1-\frac{v_f^2}{c^2}}}{\sqrt{1-\frac{v_m^2}{c^2}}}\frac{|w-nv_m|}{|w-nv_f|} = f_0\frac{\sqrt{c^2-v_f^2}}{\sqrt{c^2-v_m^2}}\frac{|w-nv_m|}{|w-nv_f|}$$

Abban a speciális esetben ha w=c, a képletek a következőképpen egyszerűsödnek (az előbbivel azonos sorrendben felírva):

$$f = f_0\sqrt{\frac{c+nv_f}{c-nv_f}}$$

$$f = f_0\sqrt{\frac{c-nv_m}{c+nv_m}}$$

$$f = f_0\sqrt{\frac{c+nv_f}{c-nv_f}}\sqrt{\frac{c-nv_m}{c+nv_m}}$$

Legyen v_r a megfigyelő forráshoz viszonyított sebessége (a relativisztikus sebesség-összeadás szabályai szerint):

$$v_r = \frac{v_m - v_f}{1-\frac{v_m v_f}{c^2}}$$

Ekkor a képletek a v_r felhasználásával a következő alakban foglalhatók össze:

$$f = f_0\sqrt{\frac{c-nv_r}{c+nv_r}}$$

Ebből a formából látható, hogy fénysebességű hullámok esetében a közeghez viszonyított sebességnek nincs jelentősége, csak a forrás és a megfigyelő egymáshoz viszonyt sebessége befolyásolja a mérhető frekvenciát.

8.7. Retardált potenciálok, dipólsugárzás, fényszórás

Térjünk vissza ismét a Maxwell-egyenletekhez:

$$c^2 rot\mathbf{B} = \partial_t \mathbf{E} + \frac{\mathbf{j}}{\varepsilon_0} \qquad div\mathbf{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0} \qquad rot\mathbf{E} = -\partial_t \mathbf{B} \qquad div\mathbf{B} = 0$$

A korábbiakban már bevezettük a skalár- és vektorpotenciálokat (lásd Elektrodinamika), most ezeket fogjuk használni.
Mivel $div\mathbf{B} = 0$, ezért bevezethető a vektorpotenciál $\mathbf{B} = rot\mathbf{A}$. Beírva ezt a harmadik egyenletbe az adódik, hogy

$$rot\left(\mathbf{E} + \partial_t \mathbf{A}\right) = 0$$

ezért az $\mathbf{E} + \partial_t \mathbf{A}$ vektor írható fel gradiensként:

$$\mathbf{E} + \partial_t \mathbf{A} = -grad\Phi$$

$\mathbf{A}^{'} = \mathbf{A} + \mathbf{grad}\chi$ és $\Phi^{'} = \Phi - \partial_t \chi$ ugyanazt az $\mathbf{E}, \mathbf{B}$-t határozza meg, mint $\mathbf{A}$ ás χ, most is igaz, hogy a potenciálok csak egy mértéktranszformáció erejéig meghatározottak, kiróható egy mellékfeltétel, ami egyszerűsítheti az egyenleteket. Azt írjuk elő, hogy $div\mathbf{A} + \frac{1}{c^2}\partial_t \Phi = 0$ teljesüljön, azaz Lorentz-mértékben fogunk dolgozni. A potenciálokra így a következő egyenleteket kapjuk:

$$\Delta\Phi - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} = -\frac{\rho}{\varepsilon_0} \qquad \Delta\mathbf{A} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = -\frac{\mathbf{j}}{\varepsilon_0 c^2}$$

ezek az inhomogén hullámegyenletek. Megmutatható, hogy az alábbi megoldások az egyenletek mellett a Lorentz-feltételt is kielégítik:

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int \frac{\rho(\mathbf{r}^{'}, t^{'})}{|\mathbf{r}^{'} - \mathbf{r}|} dV^{'} \qquad \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0 c^2}\int \frac{\mathbf{j}(\mathbf{r}^{'}, t^{'})}{|\mathbf{r}^{'} - \mathbf{r}|} dV^{'} \qquad t^{'} = t - \frac{|\mathbf{r}^{'} - \mathbf{r}|}{c}$$

Ezek a retardált potenciálok, a retardálás időbeli késés az idő szerinti második derivált hatása.
Fizikai jelentésük nagyon természetesnek tűnhet. A hatás nem pillanatszerű, c sebességgel terjed, így a $\frac{|\mathbf{r}^{'} - \mathbf{r}|}{c}$ idővel korábbi töltés-ill. árameloszlás határozza meg a skalár illetve vektorpotenciált. Éppen ennyi időre van szükség ahhoz, hogy a hatás elérjen az $\mathbf{r}^{'}$-vel jelölt helyvektorú pontból az $\mathbf{r}$ helyvektorú pontban.
Érdemes megjegyezni, hogy az inhomogén hullámegyenletek megoldásai lehetnek az ún. *avanzsált-potenciálok* is, amelyekben $t^{'} = t + \frac{|\mathbf{r}^{'} - \mathbf{r}|}{c}$. Ez azt jelentené, hogy az $\frac{|\mathbf{r}^{'} - \mathbf{r}|}{c}$ idővel későbbi töltés és árameloszlás határozza meg a potenciálokat, ami ellentmond a kauzalitás elvének, így fizikai jelentőséget nem tulajdonítunk neki.
A megoldás szemléletes magyarázatához Feynmanhoz fordulunk segítségért:
Legyen kezdetben, csak a kezdőpontban egy pontszerű töltés, ekkor a megoldása az egyenleteknek a

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{r} f(t - t^{'}) \qquad t^{'} = \frac{r}{c}$$

kifutó gömbhullám, amit maga a töltés hoz létre. Kis r esetén $\Phi \approxeq \frac{f(t)}{r}$ mert r/c elég nagy t mellett kicsi. Ez a kezdőpontban lévő változó nagyságú töltés Coulomb-potenciálja, tehát $\Phi = \frac{Q(t)}{4\pi\varepsilon_0}$ ami megoldása a

$$\Delta\Phi = -\frac{\rho}{\varepsilon_0}$$

Poisson-egyenletnek, $Q = \int \rho dV$.
A hullámegyenlet megoldása így:

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \frac{Q(t - t^{'})}{4\pi\varepsilon_0 r} \qquad t^{'} = r/c$$

8.7.1. Dipólus-antenna

Alkalmazásként megnézzük hogyan viselkedik egy nagyon kicsi, szinte pontszerű rezgő elektromos dipólus antenna elektromágneses tere.
Az $\mathbf{r_0}$ helyvektorú pontban lévő $\mathbf{p}(t)$ dipólmomentumú antenna sűrűségvektora, a polarizációs vektor $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)$ így

$$\mathbf{P}(t) = \int \mathbf{p}(\mathbf{r}, t) dV$$

A pontszerű töltés töltéssűrűségéhez hasonlóan most is $\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r_0})$ Dirac-delta segítségével fejezzük ki a dipólmomentum sűrűséget:

$$\mathbf{P}(\mathbf{r},t)=\mathbf{p}(t)\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r_0})$$

Még régebben tárgyaltuk (Elektrosztatika ill. Gálfi jegyzet, Dielektrikumok) a dielektrikumoknál, hogy a $\mathbf{P}$ dipóluseloszlás skalárpotenciálja $\rho_{pol}=-div\mathbf{P}$ töltéssűrűségével, vektorpotenciálja $\mathbf{j_{pol}}=\partial_t\mathbf{P}$ áramsűrűségével egyenlő. Így:

$$\Delta\Phi-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\Phi}{\partial t^2}=\frac{div\mathbf{P}}{\varepsilon_0}\qquad \Delta\mathbf{A}-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\mathbf{A}}{\partial t^2}=-\frac{1}{\varepsilon_0c^2}\partial_t\mathbf{P}$$

hullámegyenleteket kell megoldanunk, a megoldás a két retardált potenciál:

$$\Phi(\mathbf{r},t)=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int\frac{div'\mathbf{P}(\mathbf{r}',t')}{|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|}dV'\qquad \mathbf{A}(\mathbf{r},t)=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0c^2}\int\frac{\partial_t\mathbf{P}(\mathbf{r}',t')}{|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|}dV'\qquad t'=t-\frac{|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|}{c}$$

a div' azt jelenti, hogy állandó t' mellett kell deriválni. Az integrálások a $\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r_0})$ általánosított függvény segítségével elvégezhető, az eredmény a következő:

$$\Phi(\mathbf{r},t)=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0c}\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r_0}|^2}\dot{\mathbf{p}}\left(t-\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r_0}|}{c}\right)(\mathbf{r}-\mathbf{r_0})+\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\mathbf{r}-\mathbf{r_0}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r_0}|^3}\mathbf{p}\left(t-\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r_0}|}{c}\right)$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},t)=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0c^2}\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r_0}|}\dot{\mathbf{p}}\left(t-\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r_0}|}{c}\right)$$

Tudjuk, hogy $\mathbf{E}=grad\Phi-\partial_t\mathbf{A}\qquad \mathbf{B}=rot\mathbf{A}$. A számolást az olvasóra bízom, most csak a végeredményt írom fel (esetleg beírhatom a függelékbe):

$$\begin{aligned}\mathbf{E}=&\frac{3}{4\pi\varepsilon_0|\mathbf{r}-\mathbf{r_0}|^5}(\mathbf{p}(\mathbf{r}-\mathbf{r_0}))(\mathbf{r}-\mathbf{r_0})-\frac{\mathbf{p}}{4\pi\varepsilon_0|\mathbf{r}-\mathbf{r_0}|^3}+\\&+\frac{3}{4\pi\varepsilon_0c|\mathbf{r}-\mathbf{r_0}|^4}(\dot{\mathbf{p}}(\mathbf{r}-\mathbf{r_0}))(\mathbf{r}-\mathbf{r_0})-\frac{\dot{\mathbf{p}}}{4\pi\varepsilon_0c|\mathbf{r}-\mathbf{r_0}|^2}+\\&+\frac{1}{4\pi\varepsilon_0c^2|\mathbf{r}-\mathbf{r_0}|^3}(\ddot{\mathbf{p}}(\mathbf{r}-\mathbf{r_0}))(\mathbf{r}-\mathbf{r_0})-\frac{\ddot{\mathbf{p}}}{4\pi\varepsilon_0c^2|\mathbf{r}-\mathbf{r_0}|}\end{aligned}$$

$$\mathbf{B}=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0c^2|\mathbf{r}-\mathbf{r_0}|^3}(\dot{\mathbf{p}}\times(\mathbf{r}-\mathbf{r_0}))+\frac{1}{4\pi\varepsilon_0c^3|\mathbf{r}-\mathbf{r_0}|^2}(\ddot{\mathbf{p}}\times(\mathbf{r}-\mathbf{r_0}))$$

$\mathbf{p},\dot{\mathbf{p}},\ddot{\mathbf{p}}$ argumentuma mindenhol a $t'=t-\frac{|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|}{c}$ retardált idő.

8.7.2. Fényszórás

A megoldásban jól elkülöníthető három rész.
E első két tagja (első sor) a dipólus statikus elektromos tere. Ha **p** időfüggetlen, akkor csak ez a tag van, **B** = 0 egy statikus dipólusnak nincs mágneses tere. **E** második két tagja (második sor) és **B** első tagja a polarizációs áram elektromágneses tere. **E** utolsó két tagja és **B** második tagja a gyorsuló dipólus által kisugárzott elektromágneses hullám. Legyen $\mathbf{p}(t) = \mathbf{p_0} exp(i\omega t)$, $\mathbf{p_0} = (0, 0, p_0)$, $\mathbf{r_0} = (0, 0, 0)$. Összehasonlítjuk az előbb felsorolt három rész nagyságrendjét:

$$\mathbf{E} \Longrightarrow \frac{p_0}{r^3} : \frac{p_0\omega}{cr^2} : \frac{p_0\omega^2}{c^2 r}$$

$$\mathbf{B} \Longrightarrow \qquad \frac{p_0\omega}{c^2r^2} : \frac{p_0\omega^2}{c^3 r}$$

Az egymás melletti értékek hányadosa $2\pi\frac{r}{\lambda}$, $\lambda = 500m, r = 50km$ esetén pl. a $2\pi\frac{r}{\lambda} \approxeq 600$. A dipólushoz közel a statikus zónában az elektrosztatikus tér a domináns, a távoli hullámzónában az elektromágneses sugárzás. Utóbbiban (gömbi koordinátákban):

$$E_\theta = \frac{\omega^2 p_0}{4\pi\varepsilon_0 c^2 r} sin\theta exp\left(iw(t - \frac{r}{c})\right) \qquad E_r = E_\phi = 0$$

$$B_\phi = \frac{\omega^2 p_0}{4\pi\varepsilon_0 c^3 r} sin\theta exp\left(iw(t - \frac{r}{c})\right) \qquad B_r = B_\theta = 0$$

Látszik, hogy a kifutó gömbhullámra jellemző r-függés. $\mathbf{E}, \mathbf{B}$ egymásra és **r**-re merőleges.
Az **S** energia-áramsűrűség vektor sugár irányú:

$$|\mathbf{S}| = \frac{\omega^4 p_0^2}{(4\pi)^2 \varepsilon_0 c^3 r^2} sin^2\theta cos^2\omega\left(t - \frac{r}{c}\right)$$

Az energiaszállítás nem izotróp, θ-függő. A dipólmomentum irányában ($\theta = 0$) nincs energiasugárzás, az "egyenlítő" síkjában ($\theta = \pi/2$) maximális. Egy r sugarú gömb felszínén időegység alatt áthaladó energia átlagos (egy periódusra átlagolt) értéke:

$$U_{sec} = \frac{1}{T}\iiint_{0,0,0}^{\pi,2\pi,T} |\mathbf{S}| dt r^2 sin\theta d\theta d\phi = \frac{\omega^4 p_0^2}{(4\pi)^2\varepsilon_0 c^3}\iint_{0,0}^{\pi,2\pi} sin^3\theta d\theta d\phi \frac{1}{T}\int_0^T cos^2\omega\left(t - \frac{r}{c}\right) dt = \frac{\omega^4 p_0^2}{(12\pi)^2\varepsilon_0 c^3}$$

A fényszórás olyan folyamat, amelynek során a porszemekre, vízcseppekre érkező elektromágneses hullám megrezgeti az ott lévő töltéseket, a rezgő töltések pedig újabb elektromágneses hullámokat sugároznak ki. Legyen $\mathbf{S_{be}}$ a bejövő hullám Poynting-vektora, dU_{sec} a töltésrendszer által a $d\Omega$ térszögbe 1 sec alatt kisugárzott energia.
A szórás $d\Omega$ térszögre eső differenciális hatáskeresztmetszet:

$$d\sigma = \frac{d\bar{U}_{sec}}{|\bar{\mathbf{S}}_{be}|}$$

a felülvonás időre (egy periódusra) való átlagolást jelent. A teljes hatáskeresztmetszet $\sigma = \int d\sigma$ a térszög szerint kell integrálni.
Először egyetlen szabad töltésen történő szórást vizsgálunk a következő egyszerűsítő feltevések mellett:

(a) a bejövő hullám mozgásba hozza a töltést, ennek sebessége v«c (a töltés valamekkora tömegen, pl. felhőben kondenzálódott cseppen ül), ekkor a Lorentz-erő a Coulomb-erő mellett elhanyagolható, mert pl. síkjullámban $|\mathbf{B}| = \frac{|\mathbf{E}|}{c}$.

(b) a töltés az origó körül rezeg, de mindig a térerősség origóbeli értékével számolunk.

Legyen $\mathbf{E_{be}} = \mathbf{E_0} cos(wt - \mathbf{kr})$ lineárisan poláros síkhullám. A töltés mozgásegyenlete:

$$m\ddot{\mathbf{r}} = q\mathbf{E_{be}}$$

dipólmomentuma $\mathbf{p} = q\mathbf{r}$ és $\ddot{\mathbf{p}} = q\ddot{\mathbf{r}} = \frac{q^2}{m}\mathbf{E_{be}}$. A rezgő töltés által keltett elektromágneses tér kifutó gömbhullám része:

$$\mathbf{E_{ki}} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0 c^2}\left[\frac{(\ddot{\mathbf{p}}\mathbf{r})\mathbf{r}}{r^3} - \frac{\ddot{\mathbf{p}}}{r}\right] = \frac{(\ddot{\mathbf{p}} \times \mathbf{r}) \times \mathbf{r}}{4\pi\varepsilon_0 c^2 r^3} \qquad \mathbf{B_{ki}} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0 c^3}\frac{\ddot{\mathbf{p}} \times \mathbf{r}}{r^2}$$

8.6 ábra A fényszórás jelensége

$\ddot{\mathbf{p}}$ argumentuma itt is a retardált idő. A kifutó energia-áramsűrűség vektor nagysága:

$$|\mathbf{S_{ki}}| = \varepsilon_0 c^2 |\mathbf{E_{ki}} \times \mathbf{B_{ki}}| = \frac{(\ddot{\mathbf{p}} \times \mathbf{r})^2}{(4\pi)^2 \varepsilon_0 c^3 r^4} = \frac{1}{(4\pi)^2 \varepsilon_0 c^3 r^2} \frac{q^4}{m^2} |\mathbf{E_{be}}|^2 sin^2\theta$$

θ az $\mathbf{r}, \mathbf{E_{be}}$ vektorok által bezárt szög. A $d\Omega$ térszögbe 1 sec alatt kisugárzott, átlagos energia:

$$d\bar{U}_{sec} = r^2 d\Omega \frac{1}{T} \int_0^T |\mathbf{S_{ki}}| dt = \frac{E_0^2}{(4\pi)^2 \varepsilon_0 c^3} \frac{q^4}{m^2} sin^2\theta d\Omega$$

Az egy periódusra átlagolt bejövő energia-áramsűrűség vektor:

$$|\bar{\mathbf{S}}_{\mathbf{be}}| = \varepsilon_0 c^2 \frac{1}{T} \int_0^T |\mathbf{E_{be}} \times \mathbf{B_{be}}| dt = \varepsilon_0 c \frac{E_0^2}{2}$$

A differenciális hatáskeresztmetszet:

$$d\sigma = \frac{d\bar{U}_{sec}}{|\bar{\mathbf{S}}_{be}|} = \frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2} \left(\frac{q^2}{mc^2}\right)^2 sin^2\theta d\Omega$$

és a teljes hatáskeresztmetszet:

$$\sigma = \frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2} \left(\frac{q^2}{mc^2}\right)^2 \int sin^3\theta d\theta d\phi = \frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2} \frac{8\pi}{3} \left(\frac{q^2}{mc^2}\right)^2$$

ez a Thompson-hatáskeresztmetszet. A $\frac{q^2}{mc^2}$ kifejezés neve klasszikus elektronsugár, de vigyázat, ez csak Gauss-mértékegységrendszerben távolságdimenziójú mennyiség. Ha a bejövő elektromágneses hullám kis (α sugarú, ε_r relatív dielektromos állandójú) gömbön szóródik, akkor a dielektrikumoknál tárgyaltak szerint $\mathbf{p} \approx \mathbf{E_{be}}$ (pontosabban $\mathbf{p} = 4\pi\varepsilon_0 \frac{\varepsilon_r - 1}{\varepsilon_r + 2} a^3 \mathbf{E_{be}}$) ezért $\ddot{\mathbf{p}}$-ban ω^2 szorzótényező jelenik meg, és a teljes hatáskeresztmetszet:

$$\sigma \approx \frac{\omega^4}{c^4} = \frac{1}{\lambda^4}$$

Bővebben a miért kék az ég, és miért vörös a naplemente témakörből:
`http://chemonet.hu/hun/olvaso/feny/fenyszor.html`

8.8. Hullámvezetők, üregrezonátorok, antennák

A hullámvezető egy ideális vezetők által határolt cső, melyben elektromágneses hullámok tudnak terjedni. Itt most az egyszerűség kedvéért, vegyünk téglalap keresztmetszetű egyenes csövet. A rendszer koordinátázásához válasszuk a koordinátarendszer z irányát a cső irányának. A cső mérete $\mathbf{a} \times \mathbf{b}$. Ekkor a határfeltételek (tekintve, hogy ideális vezetőkkel határolt térrész ideális diamágnesnek számít ,így az anyagon belül sem $\mathbf{E}$ sem $\mathbf{B}$ nem létezhet) :

$$E_x(x,0,z,t) = E_z(x,0,z,t) = E_x(x,b,z,t) = E_z(x,b,z,t) =$$
$$= E_y(0,y,z,t) = E_z(0,y,z,t) = E_y(a,y,z,t) = E_z(a,y,z,t) = 0$$
$$= B_y(x,0,z,t) = B_y(x,b,z,t) = B_x(0,y,z,t) = B_x(a,y,z,t) = 0$$

Érdemes az általános konfigurációkat, ahol E_z, B_z nem nulla, két hullám szuperpozíciójaként kezelni, ahol $E_z = 0$(transzverzális TE módus) és $B_z = 0$ (transzverzális mágneses TM módus).

8.8.1. TE eset

Itt az elektromos teret érdemes felírni, hiszen egy komponensét már tudjuk. A megoldás síkhullámok összege kell legyen, az idő és a z-függésre valóban síkhullámszerű alakot kaphatunk. A transzverzális irányban azonban a határfeltételek miatt állóhullámok kialakulására kell számítanunk. Mivel az $E_x|_{y=0} = 0$, valamint $E_y|_{x=0} = 0$, ezért várhatóan az egyik $sin(k_y y)$-nal, a másik $sin(k_x x)$-szel kell arányos legyen. Nézzük a következő Ansatz-oz:

$$\mathbf{E}(x,y,z,t) = exp(-iwt + ik_z z)\begin{pmatrix} E_{0x}cos(k_x x)sin(k_y y) \\ E_{0y}sin(k_x x)cos(k_y y) \\ 0 \end{pmatrix}$$

A síkhullám összetevőkre igaz $\omega = kc$ azaz $\omega^2 c^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$ kell teljesüljön. Az $E_x|_{y=0} = 0$ miatt $k_y = \frac{m\pi}{b}$, az $E_y|_{x=0} = 0$ miatt $k_x = \frac{n\pi}{a}$ ahol n,m egész számok. A $div\mathbf{E} = 0$ feltétel alakja:

$$exp(-iwt + ik_z z)sin(k_x x)sin(k_y y)(E_{0x}k_x + E_{0y}k_y) = 0$$

Ez szerencsére teljesíthető minden x,y-ra (az Anzats-unknak köszönhetően), amit kapunk:

$$E_{0x}k_x + E_{0y}k_y = 0$$

A mágneses indukciót a $rot\mathbf{E} = -\partial_t \mathbf{B} = i\omega\mathbf{B}$ képlet segítségével határozzuk meg:

$$\mathbf{B}(x,y,z,t) = -\frac{i}{\omega}rot\mathbf{E}(xyzt) = exp(-iwt + ik_z z)\begin{pmatrix} -\frac{k_z}{\omega}E_{0y}sin(k_x x)cos(k_y y) \\ \frac{k_z}{\omega}E_{0x}cos(k_x x)sin(k_y y) \\ -\frac{i}{\omega}(k_x E_{0y} - k_y E_{0x})cos(k_x x)cos(k_y y) \end{pmatrix}$$

A $div\mathbf{B} = 0$ és $rot\mathbf{B} = 1/c^2\partial_t\mathbf{E}$ automatikusan teljesülnek. Ha $B_z = 0$ lenne, az azt jelentené, hogy $k_x E_{0x} = k_y E_{0y}$, ami $E_{0x}k_x + E_{0y}k_y = 0$ egyenlettel együtt csak $\mathbf{E} = 0$ esetben teljesülhet. Emiatt nem lehet egyszerre TE és TM egy megoldás (csak bonyolultabb geometria esetén).
Fizikailag a megoldás a cső keresztmetszetén állóhullámokat jelent, n-1 illetve m-1 csomóponttal az x illetve y irányban. A cső mentén k_z hullámszámmal és ω frekvenciával terjedő hullámot kapunk. A z irányú terjedés fázissebessége:

$$v_f = \frac{\omega}{k_z} = c\sqrt{1 + \left(\frac{n\pi}{k_z a}\right)^2 + \left(\frac{m\pi}{k_z b}\right)^2} > c$$

mindig nagyobb mint a fénysebesség, azonban a csoportsebesség:

$$v_{cs} = \frac{d\omega}{dk_z} = \frac{c}{\sqrt{1 + \left(\frac{n\pi}{k_z a}\right)^2 + \left(\frac{m\pi}{k_z b}\right)^2}} < c$$

mindig kisebb. Bevezethetjük a törésmutatót a z irányú hullámterjedésre:

$$n = \frac{|k_z|c}{\omega} = \sqrt{1 - \frac{c^2 k_\perp^2}{\omega^2}}$$

ahol $k_\perp^2 = k_x^2 + k_y^2$. Ez pontosan olyan alak, mint a szabad elektrongáznál (lásd Jakovác Antal Elektrodinamika jegyzet 6.51). Itt a plazmafrekvencia:

$$\omega_p = ck_\perp$$

ω_p alatti hullámok nem tudnak terjedni a csőben, ez a hullámvezető levágási frekvenciája. Mivel k_x, k_y közül legalább az egyik nem nulla (különben a megoldás maga is azonosan nulla lenne) ezért $qomega_p$ sosem zérus. Ha a>b akkor n=1, m=0, azaz $k_x = \pi/a$, $k_y = 0$ választással, akkor

$$\omega_{p,min} = \frac{c\pi}{a}$$

Ha ennél kisebb frekvenciájú hullámot bocsátunk a hullámvezetőre, akkor k_z tisztán imaginárius lesz, azaz exponenciálisan elhalnak a terek. Másrészt kis k_z-re v_{cs} n, azaz egyre lassabban terjednek a hullámok.
Az energiaáramláshoz kiszámítjuk a Poynting-vektort $\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}$ képlettel. Figyelnünk kell, hogy itt már komplex kifejezések valós részeit kell beírnunk. Az x és y komponens:

$$S_x = \frac{1}{\mu}(E_y H_z - E_z H_y) = \frac{k_y^2 - k_x^2}{4\mu k_x}E_{0y}^2 sin(2\omega t - 2k_z z)sin(2k_x x)cos^2(k_y y)$$

$$S_y = \frac{1}{\mu}(E_z H_x - E_x H_z) = \frac{k_y^2 - k_x^2}{4\mu k_y}E_{0x}^2 sin(2\omega t - 2k_z z)cos^2(k_x x)sin(2k_y y)$$

Ezek egy periódusra vett átlaga nulla. A z komponens kiszámítása:

$$S_z = \frac{1}{\mu}(E_x B_y - E_y B_x) = \frac{k_z}{\mu\omega}(E_x^2 + E_y^2) = \frac{k_z}{\mu\omega} sin^2(\omega t - k_z z)[E_{0x}^2 cos^2(k_x x) sin^2(k_y y) + E_{0y}^2 sin^2(k_x x) cos^2(k_y y)]$$

Egy periódusra, valamint a felületre átlagolva:

$$\langle S_z \rangle = \frac{k_z}{8\mu\omega}(E_{0x}^2 + E_{0y}^2)$$

Az energiasűrűség kifejezése, rögtön beírva az egy periódusra, valamint a felületre vett átlagolást:

$$\langle \omega \rangle = \frac{1}{8}\left(\frac{\varepsilon}{2}(E_{0x}^2 + E_{0y}^2) + \frac{1}{2\mu\omega^2}(k_z^2 E_{0x}^2 + k_z^2 E_{0y}^2 + (k_x E_{0x} - k_y E_{0y})^2)\right) =$$

$$= \frac{1}{16\mu\omega^2}\left(\frac{\omega^2}{c^2} + k_z^2 + k_x^2 + k_y^2\right)(E_{0x}^2 + E_{0y}^2) - \frac{1}{16\mu\omega^2}(k_x E_{0x} + k_y E_{0y})^2$$

Az utolsó tag $E_{0x}k_x + E_{0y}k_y = 0$ miatt zérus. Emiatt:

$$\langle \omega \rangle = \frac{1}{8\mu c^2}(E_{0x}^2 k_x + E_{0y}^2 k_y) = \frac{\langle S_z \rangle}{v_{cs}}$$

Csakúgy, mint korábban a síkhullámok esetén, most is egy részecskeszerű energia-áramsűrűséget kaptunk, ahol a helyettesítő részecskék sebessége v_{cs} csoportsebesség.

8.8.2. TM eset

Az előző esetekhez hasonlóan tárgyalható, de most a mágneses indukciót érdemes felírni. Ezért ismét legyen a z irányú terjedő hullámunk, az x-y síkban állóhullámokkal. A határfeltételeket kielégítő megoldás:

$$\mathbf{B}(x,y,z,t) = exp(-iwt + ik_z z)\begin{pmatrix} B_{0x} sin(k_x x) cos(k_y y) \\ B_{0y} cos(k_x x) sin(k_y y) \\ 0 \end{pmatrix}$$

ahol a Maxwell-egyenletek alapján igaz $\omega = kc$ azaz $\omega^2 c^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$, $k_y = \frac{m\pi}{b}$ és $k_x = \frac{n\pi}{a}$ ahol n,m egész számok a határfeltételek értelmében. A $div\mathbf{B} = 0$ értelmében:

$$B_{0x}k_x + B_{0y}k_y = 0$$

Az elektromos tér a $rot\mathbf{B} = 1/c^2 \partial_t \mathbf{E} = -i\omega/c^2 \mathbf{E}$ egyenletből következik:

$$\mathbf{E}(x,y,z,t) = \frac{ic^2}{\omega} rot\mathbf{B}(xyzt) = exp(-iwt + ik_z z)\begin{pmatrix} \frac{k_z c^2}{\omega} B_{0y} cos(k_x x) sin(k_y y) \\ -\frac{k_z c^2}{\omega} B_{0x} sin(k_x x) cos(k_y y) \\ \frac{ic^2}{\omega}(k_y B_{0x} - k_x B_{0y}) sin(k_x x) sin(k_y y) \end{pmatrix}$$

A $div\mathbf{E} = 0$ és $rot\mathbf{E} = -\partial_t \mathbf{B}$ egyenletek automatikusan teljesülnek. Ebben a csatornában a minimális frekvencia nem jöhet az n=1, m=0 választásból, mert ekkor $ky = 0$, azaz $B_{0x}k_x + B_{0y}k_y = 0$ miatt $B_{0x} = 0$ és $\mathbf{B} = 0$ lenne. A minimális frekvenciához n=m=1 tartozik:

$$\omega_{min} = c\pi\sqrt{\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2}}$$

8.8.3. Üregrezonátorok

Ha a z irányt is lezárjuk c távolságban, akkor a határfeltételekhez hozzájön még

$$E_x(x,y,0,t) = E_y(x,y,0,t) = E_x(x,y,c,t) = E_y(x,y,c,t) = 0$$

$$B_z(x,y,0,t) = B_z(x,y,c,t) = 0$$

Ekkor a z irányban is állóhullámok alakulnak ki.
A TE esetben:

$$\mathbf{E}(x,y,z,t) = exp(-iwt)\begin{pmatrix} E_{0x} cos(k_x x) sin(k_y y) \\ E_{0y} sin(k_x x) cos(k_y y) \\ 0 \end{pmatrix}$$

ahol minden paraméter ugyanaz mint eddig kivéve $k_z = \frac{l\pi}{c}$ szintén a határfeltételekből.
A TM eset:

$$\mathbf{B}(x,y,z,t) = exp(-iwt)\begin{pmatrix} B_{0x}sin(k_x x)cos(k_y y) \\ B_{0y}cos(k_x x)sin(k_y y) \\ 0 \end{pmatrix}$$

Innen:

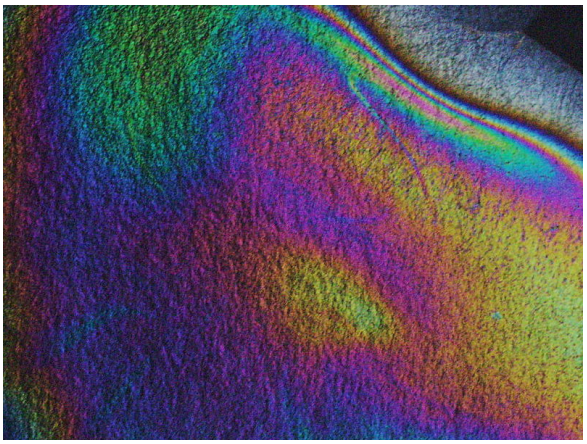
$$\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} = \frac{ic^2}{\omega}exp(-iwt)\begin{pmatrix} B_{0y}k_z cos(k_x x)sin(k_y y)sin(k_z z) \\ B_{0x}k_z sin(k_x x)cos(k_y y)sin(k_z z) \\ (B_{0x}k_y - k_x B_{0y})sin(k_x x)sin(k_y y)cos(k_z z) \end{pmatrix}$$

Az üregben csak bizonyos frekvenciák képesek csillapodás nélkül megmaradni, ezek az üreg sajátfrekvenciái.

8.9. Interferencia, polarizáció, Fresnel-formulák, diffrakció, nemlineáris optika

8.9.1. Interferencia

Az interferencia egy fizikai jelenség, akkor következik be, ha két különböző forrású, koherens hullám találkozik, azaz olyan hullámok, amelyek fáziskülönbsége állandó. Ami nem azonos a fáziseltolódással. Ekkor létrejönnek olyan pontok a térben, ahol a hullámok maximálisan erősítik, illetve olyanok, ahol maximálisan gyengítik egymást (annak függvényében, hogy az egyes pontokba a két hullám milyen fáziskülönbséggel érkezik). Ha két



8.7 ábra Interferencia lakkrétegen

forrásból monokromatikus fényt bocsátunk ki, a keletkezett jelenséget egy sík ernyőn felfogva, megállapíthatjuk, hogy az ernyőn lesznek sötét (kioltás helye) és világos vonalak (maximális erősítés helye). Tekintve, hogy a monokromatikus fény semmilyen körülmény esetén sem bomlik alkotókra, színszóródás jelensége nem figyelhető meg. Két nem-monokromatikus hullám csak akkor lehet teljesen koherens, ha mindkettő azonos hullámhosszt-tartományt fed le, és az azonos hullámhosszhoz tartozó hullámok azonos fázisban vannak. Elvileg bármilyen fényforrásból származó fény képes interferencia mintázat létrehozására, lásd a napfény okozta Newton-gyűrűk jelenséget. Ennek ellenére, általában a fehér fény kevéssé alkalmas interferencia mintázatok létrehozására, mivel a fehér fény a teljes spektrum keverékéből áll össze, ezért a létrehozott interferencia területek más-más helyen jönnek létre. A nátrium fény közel monokromatikus és alkalmas arra, hogy interferencia mintázatokat hozzanak vele létre. A lézerfény még alkalmasabb erre a célra, mivel az szinte teljesen monokromatikus. Azonban a mindennapi életben sokszor nem beszélhetünk interferencia jelenségről, miközben fényhullámok indulnak ki két különböző fényforrásból. A jelenség magyarázata kettős. Az atomok általában egymástól függetlenül, rövid ideig sugároznak, és habár sok atom együtt erős fényt tud kibocsátani, a fény rendszertelenül, különböző fázissal érkezik, így nem teljesíti a koherencia feltételt. Továbbá az emberi szem csak kb. egytized másodpercenkénti átlagos megvilágítottságot érzékel, így ha pillanatnyilag is létrejön interferencia jelenség a szem nem képes annak észlelésére. Csak akkor van lehetőség interferencia-jelenség észlelésére, ha az abban részt vevő fényhullámok a megvilágított felület pontjaira azonos fáziskülönbséggel érkeznek, azaz a fényhullámok koherensek. Fényinterferencia könnyen létrejön vékony rétegeken, így például a szappanbuborékok és olajfoltok színességének is ez a jelenség az oka. De a rendkívül kis szélességű réseken sötét térbe való beszűrődés során észlelhető színszóródás oka a diffrakció (elhajlás) jelensége, az eredmény az interferenciához csak hasonló, sokszor vele együtt jelentkezik.

8.9.2. Elektromágneses hullámok polarizációja

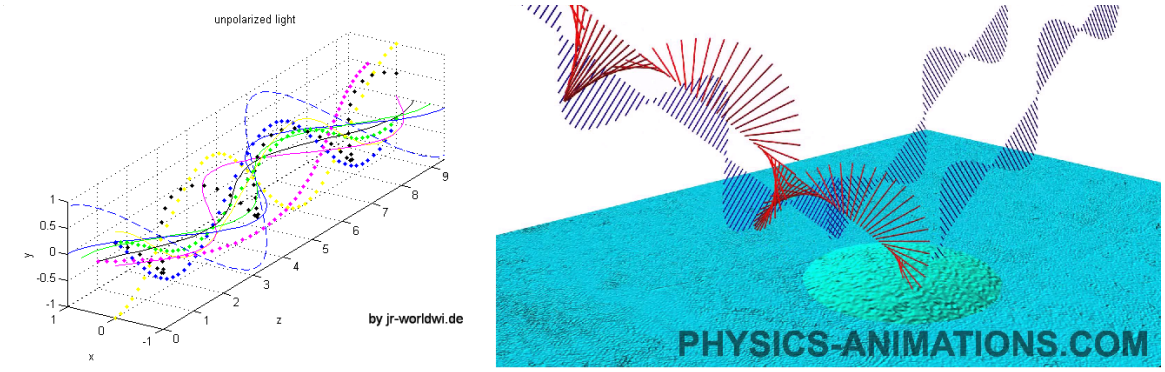
A szabad hullámegyenletek periodikus síkhullám megoldása komplex alakban:$\mathbf{E} = \mathbf{E_0} exp(i(wt - \mathbf{kr}))$.A térmennyiségek valós függvényekkel leírhatók, a komplex írásmódot csak technikai egyszerűsítés céljából vezettük be. Minden kifejezés, egyenlet felbontható valós és képzetes részre, fizikai jelentést a valós résznek tulajdonítunk. Komplex írásmódban az $\mathbf{E_0}$ amplitúdó is lehet komplex. Legyen a hullám terjedési iránya a z-tengely, $\mathbf{k} = (0, 0, k)$, $(wt - kz)$-t jelöljük τ-val. A síkhullám általános alakja valós írásmódban:

$$\mathbf{E} = (a_1 cos\tau, a_2 cos(\tau + \alpha), 0)$$

az α fáziseltolódás onnan származik, hogy $\mathbf{E_0}$ is lehet komplex. Az $E_x = a_1 cos\tau \qquad E_y = a_2 cos(\tau + \alpha)$ egyenletpár valamilyen görbe paraméteres egyenlete az (E_x, E_y) síkon. Négyzetre emeléssel és összeadással a következő egyenletre juthatunk:

$$\frac{E_x^2}{a_1^2} + \frac{E_y^2}{a_2^2} - \frac{2E_xE_y}{a_1a_2} cos\alpha = sin^2\alpha$$

ez egy kúpszelet egyenlete, mely kvadratikus alak determinánsa $\frac{1}{a_1^2a_2^2}(1 - cos^2\alpha) \geqq 0$ tehát a kúpszelet egyenlete ellipszis ($\alpha = 0$ esetén egyenespár). Azt mondjuk, hogy az elektromágneses síkhullám általában elliptikusan polarizált. (Vigyázat! kísérleti fizikai kollokviumon megkérdezhetik, hogyan állítható elő elliptikusan polarizált fénysugár. Erre nem szabad azt felelni, hogy nem kell semmit csinálni, mert az magától elliptikusan polarizált. A fénysugár ugyanis véges hullámvonulatokból áll, az állítás az ilyen hullámvonulatokra érvényes. Az egymás utáni hullámvonulatokban a térerősség általában különböző ellipsziseken fut körbe, erre azt mondjuk, hogy a fénysugár polarizálatlan.) Két speciális eset érdemel figyelmet:



8.8 ábra Jobbra: Polarizálatlan fénysugár Balra: polarizálatlan fénysugár polarizációja szóródással

(a) $\alpha = l\pi$ ahol l egész szám. Ekkor $sin\alpha = 0, cos\alpha = (-1)^l$ és így $\left(\frac{E_x}{a_1} \pm \frac{E_y}{a_2}\right)^2 = 0$ azaz $\frac{E_x}{E_y} = (-1)^l \frac{a_1}{a_2}$ ami egy egyenespár egyenlete, ez a lineáris polarizáció.

(b) $\alpha = (2l + 1)\frac{\pi}{2}$ ahol l egész szám, és $a_1 = a_2 = a$. Ekkor $cos\alpha = 0, sin^2\alpha = 1$ és így $E_x^2 + E_y^2 = a^2$ ami egy kör egyenlete, ez a cirkuláris polarizáció.

Az $\mathbf{E} = \mathbf{E_0} exp(i(\omega t - \mathbf{kr}))$ síkhullám felírható $\mathbf{E} = \mathbf{e} E_0 exp(i(\omega t - \mathbf{kr}))$ alakban , $\mathbf{e}$ a $\mathbf{k}$-ra, a terjedési irányra merőleges egységvektor, a polarizációvektor, E_0 komplex szám ("komplex amplitúdó"). Ha $\mathbf{e}$ állandó, akkor a térerősség mindig állandó irányba mutat, az ilyen síkhullám lineárisan polarizált. Legyen $\mathbf{e_1}$ és $\mathbf{e_2}$ $\mathbf{k}$-ra és egymásra is merőleges két egységvektor. A $\mathbf{k}$ irányban terjedő legáltalánosabb síkhullám

$$\mathbf{E} = (\mathbf{e_1} E_1 + \mathbf{e_2} E_2) exp(i(\omega t - \mathbf{kr}))$$

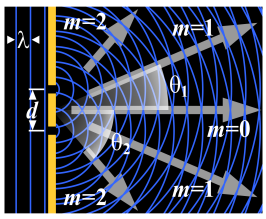
alakban írható fel, E_1, E_2 még mindig komplex számok.
Ha fázisuk megegyezik, akkor a síkhullám lineárisan polarizált, polarizációvektora $\phi = arctg(E_2/E_1)$ szöget zár be $\mathbf{e_1}$-el a térerősség nagysága pedig $\sqrt{E_1^2 + E_2^2}$. Ha a fázisok különbözőek, akkor a síkhullám elliptikusan polarizált lesz.
Ha E_1 és E_2 nagysága megegyezik, fázisuk különbsége 90^om akkor a polarizáció cirkuláris, a térerősség:

$$\mathbf{E} = E_0(\mathbf{e_1} \pm i\mathbf{e_2}) exp(i(\omega t - \mathbf{kr}))$$

alakú, E_0 valós. Az x,y,z koordináta rendszert feszítse ki nekünk most $\mathbf{e_1}, \mathbf{e_2}, \mathbf{k}$, ekkor $E_x = E_0 cos(\omega t - \mathbf{kz})$, $E_y = \pm E_0 cos(\omega t - \mathbf{kz})$. Látható, hogy adott pontban az állandó nagyságú térerősség ω körfrekvenciával forgó, jobbra illetve balra cirkulárisan polarizált síkhullámról beszélünk. E kétféle módon cirkulárisan polarizált hullám szuperpozíciójaként is leírhatjuk a $\mathbf{k}$ irányba terjedő legáltalánosabb síkhullámot.

8.9.3. Diffrakció

A diffrakció egy fizikai jelenség, mely főleg a hullámoptikában fordul elő; lényegében a hullámok elhajlását értjük alatta.
A Huygens-elv értelmében egy hullámfelület minden pontja elemi hullámok kiindulópontja is egyben. Ugyanakkor a Huygens–Fresnel-elv kimondja, hogy a hullámtérben megfigyelhető hatást az adott hullámfelületből kiinduló koherens elemi hullámok interferenciája határozza meg. Ha a hullámok útjába a hullámhosszhoz képest viszonylag nagy méretű réssel ellátott akadályt teszünk, akkor a nyíláson áthaladó hullámok közelítőleg egyenesen haladnak tovább. Ha azonban a rést elegendően kicsire szűkítjük, a hullámok behatolnak abba a térbe is, ami eredetileg az akadály által árnyékolva van – ilyenkor tapasztalható az elhajlás, azaz a diffrakció.
Ha egy elegendően keskeny rést a fentiekhez hasonlóan megvilágítunk, a rés mögötti ernyőn interferenciaképet kapunk, aminek magyarázata a Huygens–Fresnel-elv értelmében, hogy a résből kiinduló hullámok az ernyő síkjában interferálnak egymással.
Ahol az ernyőn sötétebb rész látszik, ott az érkező hullámok kioltották egymást, míg a fényes részeken épp ellenkezőleg: egymást erősítették az interferáló hullámok. Mindenképp marad olyan, az adott irányba tartó hullám, amelyikkel ellentétes fázisban érkező másik hullám nem lépett át a résen. Mivel az ernyő réssel szemközti pontjába érkező fénysugarak közötti úthosszkülönbség 0, ebben a pontban biztosan erősítést tapasztalunk – ez a nulladrendű erősítés. A beeső fénysugár irányának megváltoztatásakor, ha a rés szélein beeső hullámok közötti úthosszkülönbség még nem éri el a hullámhossz felét $\frac{\lambda}{2}$, akkor a köztük lévő fénysugarak is mind erősíteni fogják egymást. Ha a két legszélső hullám között már legalább $\frac{\lambda}{2}$ az úthosszkülönbség, akkor a köztük lévő sugarak úthosszkülönbsége ennél még mindig kisebb, tehát nem lép fel kioltás. Ha azonban tovább növeljük a szöget, egyre több olyan fénysugárpárt találunk, amelyek már kioltják egymást, tehát az ernyőn keletkező középső fényfolt a széle felé egyre halványabb lesz. A szög növelésével előbb-utóbb elérjük azt a határt, ahol az úthosszkülönbség már egyenlő lesz a hullámhosszal. Ekkor elfelezve a nyalábot, az egyik felében található minden fénysugárhoz találhatunk egy olyat, amellyel ellentétes fázisban ér az ernyő adott pontjába, tehát kioltást tapasztalunk.



8.9 ábra Diffrakciós 0. 1. 2. stb... rendű hullámfrontok

A kioltási, illetve erősítési helyekre felírható az alábbi két összefüggés:

$$x_k = 2n\lambda \frac{1}{2d}$$

illetve

$$x_e = (2n+1)\,\lambda \frac{1}{2d}$$

8.9.4. Fresnel-formulák

Fresnel-egyenletek megadják, hogy a beeső fény intenzitásának hányad része verődik vissza, illetve hányad része lép be a másik közegbe, amikor egy fénynyaláb két különböző közeg határfelületéhez érkezik. Az összefüggéseket

az éterelméletből levezetve Augustin-Jean Fresnel írta fel először, ezért róla kapták nevüket. Fizikailag helyes megalapozást azonban csak később a Maxwell-egyenletek megszületése után nyertek.
Ahhoz hogy a problémát leírhassuk, emlékezzünk vissza a már az Elektrodinamika fejezetnél tárgyalt határfeltételekre (**E** és **H** terek felület menti azaz tangenciális komponensei folytonosak a határon). A polarizációt a beesés síkjához viszonyítjuk, továbbá a jelölések: **E** a papír síkjában, $\mathbf{E}_\perp$ merőleges.
Dielektrikumokban $\mu_r = 1 \Longrightarrow n = \sqrt{\mu_r \varepsilon_r} = \sqrt{\varepsilon_r}$ így $\mathbf{H} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} E = n\sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} E \approx nE$
További jelöléseink még: $\mathbf{r}, \mathbf{t}$ a reflektált és transzmittált amplitúdók.
Legyen a beeső hullám:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E_0} exp(i\omega t - i\mathbf{kr}) \qquad \mathbf{B} = \frac{1}{\omega}\mathbf{k} \times \mathbf{E}$$

a visszavert hullám

$$\mathbf{E}' = \mathbf{E_0}' exp(i\omega' t - i\mathbf{k}'\mathbf{r}) \qquad \mathbf{B}' = \frac{1}{\omega}\mathbf{k}' \times \mathbf{E}'$$

a megtört hullám

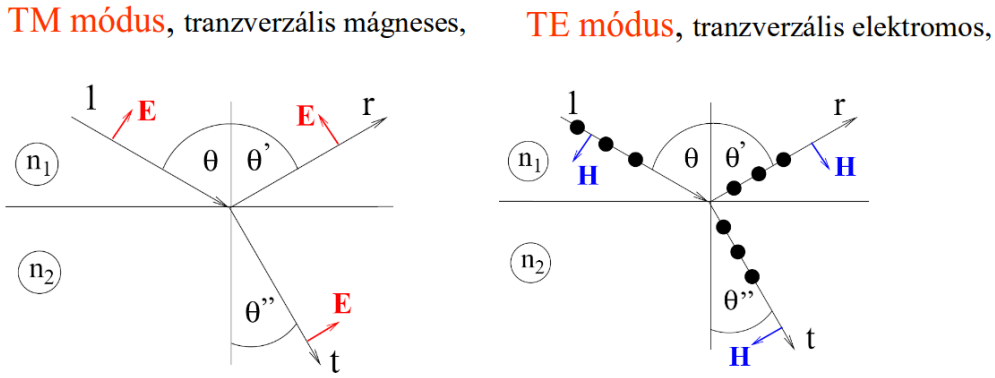
$$\mathbf{E}'' = \mathbf{E_0}'' exp(i\omega'' t - i\mathbf{k}''\mathbf{r}) \qquad \mathbf{B}'' = \frac{1}{\omega}\mathbf{k}'' \times \mathbf{E}''$$

A terjedés irányába mutató egységvektorok az ábra szerinti koordináta rendszerben(8.10 ábra):

$$\mathbf{e} = \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|} = (sin\theta, 0, cos\theta)$$

$$\mathbf{e}' = \frac{\mathbf{k}'}{|\mathbf{k}'|} = (sin\theta' cos\phi', sin\theta' cos\phi', -cos\theta')$$

$$\mathbf{e}'' = \frac{\mathbf{k}''}{|\mathbf{k}''|} = (sin\theta'' cos\phi'', sin\theta'' cos\phi'', cos\theta'')$$



8.10 ábra Beeső elektromágneses hullám TE és TM módusainak reflexiója és transzmissziója

A határfeltételek feltéve hogy nincsenek valódi töltések és áramok: $\mathbf{E_{t1}} = \mathbf{E_{t2}}$, $\mathbf{H_{t1}} = \mathbf{H_{t2}}$, $B_{n1} = B_{n2}$, $D_{n1} = D_{n2}$) Esetünkben az első egyenlet $\mathbf{E_{t1}} + \mathbf{E'_{t2}} = \mathbf{E_t}$" alakú, ehhez jön még továbbá három egyenlet. Ezek a határfeltételekre a felület végtelen sok pontjában és végtelen sok időpontjában teljesülnek, ami csak úgy lehetséges ,ha $\mathbf{E}, \mathbf{E}', \mathbf{E}''$ térbeli és időbeli változása z=0-ban azonos, a fázistényezők megegyeznek:

$$(\omega t - \mathbf{kr})_{z=0} = (\omega' t - \mathbf{k}'\mathbf{r})_{z=0} = (\omega'' t - \mathbf{k}''\mathbf{r})_{z=0}$$

Ezekből az egyenlőségekből kapjuk a törés és visszaverődés kinematikai törvényeit:
$\omega = \omega' = \omega''$ körfrekvenciák megegyeznek, a beeső és visszavert sugár ugyanabban a közegben terjed, ezért $k = k'$
A $\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}''$ hullámszám vektorok egy síkban vannak (x=0 választás : $\phi' = \phi''$)
$ksin\theta = k' sin\theta' k'' sin\theta''$, mivel $k = k'$ ezért $\theta = \theta'$ a beesési és visszaverődési szög így megegyezik. A második egyenletből:

$$\frac{sin\theta}{sin\theta''} = \frac{k''}{k} = \sqrt{\frac{\varepsilon''\mu''}{\varepsilon\mu}} = \frac{n''}{n} = n_{12}$$

Ez a Snellius-Descartes törvény. Feltételezve, hogy lineáris, izotróp anyagban vagyunk, igaz:

$$\mathbf{D} = \varepsilon\mathbf{E}, \qquad \mathbf{B} = \mu\mathbf{H}$$

anyagi egyenletek, mind a négy határfeltétel kifejthető az elektromos térerősségekkel , $\mathbf{n}$ a határfelület normális egységvektora:

$$\mathbf{E_{t1}} = \mathbf{E_{t2}} \qquad \Longrightarrow \qquad \mathbf{n} \times (\mathbf{E_0} + \mathbf{E_0^{'}} - \mathbf{E_0^{''}}) = 0$$

$$B_{n1} = B_{n2} \quad \Longrightarrow \qquad \mathbf{n}(\mathbf{k} \times \mathbf{E_0} + \mathbf{k}^{'} \times \mathbf{E_0^{'}} - \mathbf{k}^{''} \times \mathbf{E_0^{''}}) = 0$$

$$D_{n1} = D_{n2} \quad \Longrightarrow \qquad \mathbf{n}(\varepsilon E_0 + \varepsilon E_0^{'} - \varepsilon E_0^{''}) = 0$$

$$\mathbf{H_{t1}} = \mathbf{H_{t2}} \qquad \Longrightarrow \qquad \mathbf{n} \times \left(\frac{\mathbf{1}}{\mu}(\mathbf{k} \times \mathbf{E_0} + \mathbf{k}^{'} \times \mathbf{E_0^{'}}) - \frac{\mathbf{1}}{\mu^{''}}(\mathbf{k}^{''} \times \mathbf{E_0^{''}}) \right) = 0$$

Tetszőleges polarizációjú síkhullám előállítható két, egymásra merőleges lineárisan polarizált síkhullám megfelelő lineáris kombinációjaként. Legyen most az egyik olyan, amelynek polarizációvektora merőleges $\mathbf{k}, \mathbf{n}$ vektorok által kifeszített beesési síkra, a másik olyan, amelynek polarizációvektora párhuzamos ezzel a síkkal.
Tekintsük először az első esetet, ekkor az első és negyedik feltétel szerint:

$$E_0 + E_0^{'} = E_0^{''}, \qquad \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}}(E_0 - E_0^{'})cos\theta = \sqrt{\frac{\varepsilon^{''}}{\mu^{''}}} E_0^{''} cos\theta^{''}$$

A harmadik határfeltétel automatikusan teljesül, a második a Snellius-Descartes törvény felhasználásával beláthatóan ugyanazt adja, mint az első. A két egyenlet megoldása a következő:

$$\frac{E_0^{'}}{E_0} = \frac{\sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}}cos\theta - \sqrt{\frac{\varepsilon^{''}}{\mu^{''}}}cos\theta}{\sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}}cos\theta + \sqrt{\frac{\varepsilon^{''}}{\mu^{''}}}cos\theta^{''}} \qquad \frac{E_0^{''}}{E_0} = \frac{2\sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}}cos\theta}{\sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}}cos\theta + \sqrt{\frac{\varepsilon^{''}}{\mu^{''}}}cos\theta^{''}}$$

A második esetben hasonló gondolatmenet alapján a következőre juthatunk:

$$\frac{E_0^{'}}{E_0} = \frac{\sqrt{\frac{\varepsilon^{''}}{\mu^{''}}}cos\theta - \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}}cos\theta^{''}}{\sqrt{\frac{\varepsilon^{''}}{\mu^{''}}}cos\theta + \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}}cos\theta^{''}} \qquad \frac{E_0^{''}}{E_0} = \frac{2\sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}}cos\theta}{\sqrt{\frac{\varepsilon^{''}}{\mu^{''}}}cos\theta + \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}}cos\theta^{''}}$$

Az első egyenlőségből következik, hogy a beesési síkkal párhuzamos polarizáció esetén a θ beesési szögnek van egy olyan értéke, amelynél nincs visszavert hullám, ez az ún. *Brewster-szög*.Speciálisan a $\mu = \mu^{''}$ esetén $tg\theta_B = \frac{n^{''}}{n}$.
A Snellius-Descartes törvényt felhasználva megmutatható, hogy ekkor $\theta_B + \theta^{''} = \pi/2$.
Speciális esetben, merőleges beesésnél ($\theta = 0$), olyan közegeknél, amelyekre $\mu = 1$

$$\frac{E_0^{'}}{E_0} = \frac{1 - n_{12}}{1 + n_{12}}, \qquad \frac{E_0^{''}}{E_0} = \frac{2}{1 + n_{12}}$$

Az időre (egy periódusra) átlagolt áramsűrűségvektor nagysága:

$$|\bar{\mathbf{S}}| = \varepsilon_0 c^2 \frac{1}{2}|(\mathbf{E_0} \times \mathbf{B_0})| = \frac{\varepsilon_0 c^2}{2}\sqrt{\varepsilon}E_0^2$$

$$|\bar{\mathbf{S}}^{'}| = \varepsilon_0 c^2 \frac{1}{2}|(\mathbf{E_0^{'}} \times \mathbf{B_0^{'}})| = \frac{\varepsilon_0 c^2}{2}\sqrt{\varepsilon}E_0^{'2}$$

$$|\bar{\mathbf{S}}^{''}| = \varepsilon_0 c^2 \frac{1}{2}|(\mathbf{E_0^{''}} \times \mathbf{B_0^{''}})| = \frac{\varepsilon_0 c^2}{2}\sqrt{\varepsilon}E_0^{''2}$$

az $\frac{1}{2}$ szorzótényező az időátlagolás következménye. Definiáljuk az r visszaverődési (reflexiós) és a t áteresztési (transzmissziós) együtthatókat:

$$r \equiv \frac{|\bar{\mathbf{S}}^{'}|}{|\bar{\mathbf{S}}|} = \left(\frac{1 - n_{12}}{1 + n_{12}}\right)^2, \qquad t \equiv \frac{|\bar{\mathbf{S}}^{''}|}{|\bar{\mathbf{S}}|} = \frac{4n_{12}}{(1 + n_{12})^2}, \qquad r + t = 1$$

ezek az ún *Fresnel-formulák*. Mi történik, ha a két síkhullám találkozik? Létrejöhet az interferencia. Az $\mathbf{E} = \mathbf{E_1} + \mathbf{E_2}, \qquad \mathbf{B} = \mathbf{B_1} + \mathbf{B_2}$ szuperpozíciók megoldásai a Maxwell-egyenleteknek, de az intenzitásmérő adatok, az u energiasűrűség és az $\mathbf{S}$ energia-áramsűrűség, nem adódnak össze. Ezeket összefoglalóan I-vel jelölve $I = I_1 + I_2 + I^{'}$ ahol $I_1 \approxeq \mathbf{E_1^2}, I_2 \approxeq \mathbf{E_2^2} I^{'} \approxeq \mathbf{E_1 E_2}$, ez utóbbi az interferencia-tag (felhasználtuk, hogy a síkhullámban $\mathbf{B}$ tér kifejezhető $\mathbf{E}$-vel). Pillanatnyi interferencia általában van, de nem észleljük, mert $I^{'}$ nagyon gyorsan változik. Észlelhető, tartós interferencia akkor jön létre, ha $\bar{I}^{'}$, az interferencia-tag időátlaga különbözik 0-tól. Ennek három feltétele van:

(a) A síkhullámok frekvenciája, meg kell egyezzen : $\omega = \omega_1 = \omega_2$. A periodikus síkhullámok időfüggése: $\mathbf{E_1} = \mathbf{A_1} cos\omega_1 t$, $\mathbf{E_2} = \mathbf{A_2} cos\omega_2 t$. A $cos\omega_1 cos\omega_2$ szorzat gyorsan változik, nagyon sűrűn 0, időátlaga annál kisebb, minél nagyobb időtartamra átlagolunk.
Ha viszont $\omega = \omega_1 = \omega_2$, akkor $I^{'} \approxeq cos^2 t$ aminek időátlaga $\frac{1}{2}$

(b) A második feltétel geometriai jellegű. Az interferencia tag $I^{'} \approxeq \mathbf{E_1}\mathbf{E_2}$, így ha a két térerősség minden pillanatban merőleges egymásra, akkor sem tartós, sem pillanatnyi interferencia sem lesz. Példának okáért egy irányban terjedő, egymásra merőlegesen lineárisan polarizált hullámok nem interferálhatnak.

(c) A harmadik az ún.*koherencia-feltétel.* A komplex írásmódban felírt térerősség tartalmaz egy $exp(i\phi)$ tényezőt. A fényforrások általában véges hullámvonulatokat bocsájtanak ki, ezek ϕ fázisállandója rendszertelenül ingadozik. Ha a találkozó síkhullámok fázisállandóinak különbsége nem állandó, akkor az időátlagolás 0-t eredményez, nincs tartós interferencia. Ha egy fényforrás által kibocsájtott hullámot szétválasztunk, majd újra egyesítünk, akkor ez a probléma nem lép fel. Azt mondjuk, hogy az ilyen hullámok koherensek.
Vannak olyan fényforrások (lézer, mézer), amelyek szintén koherens hullámokat bocsájtanak ki, így létrejöhet tartós interferencia.

9. A geometriai optika és alkalmazásai(Grajzel Dániel)

9.1. Eikonál

Az optikának azt a fejezetét, amely a $\lambda \to 0$ határesetet vizsgálja, geometriai optikának nevezzük. A hullámoptikában használt hullámegyenlet:

$$c^2 \triangle \Psi(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2}(\mathbf{r}, t) = 0$$

Az egyszerűség kedvéért tegyük fel, hogy az elektromágneses tér csak a z tengely mentén változik, ekkor a következő alakot kapjuk:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2}(\mathbf{z}, t) - \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2}(\mathbf{z}, t) = 0$$

A megoldást keressük időben tiszta periodikus alakban:

$$\Psi(z, t) = \psi(z) e^{-i\omega t}$$

Így az amplitúdó egyenlet:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} - \frac{\omega}{c^2}\psi = 0$$

Ez a közönséges differenciálegyenlet, a harmonikus rezgőmozgás differenciálegyenlete, ez alapján a hullámegyenlet általános megoldása:

$$\Psi(z, t) = \psi_0 e^{-i\omega\left(t \mp \frac{z}{c}\right) + i\alpha}$$

A zárójelben lévő kifejezés a hullám fázisa, α egy fázisállandó és ψ_0 a hullám amplitúdójának a maximumát határozza meg.
Legyen ν az elektromágnese hullám frekvenciája, $\lambda = \frac{c}{\nu}$ a vákuumbeli hullámhossza, ekkor célszerű bevezetni a

$$k = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi\nu}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}$$

hullámszámot, amely megadja vákuumban a 2π hosszúságra eső hullámok számát. Ekkor értelmezhető a

$$\mathbf{k} = \frac{\omega}{c}\mathbf{s} = \frac{2\pi}{\lambda}\mathbf{s}$$

hullámszámvektor, melynek abszolút értéke megegyezik a hullámszámmal és iránya a hullám terjedésének irányába mutat. Belátható, hogy a hullámegyenlet ugyanilyen típusú általános megoldása:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0 e^{-i\omega\left(t \mp \frac{\mathbf{rs}}{v}\right) + i\alpha}$$

ahol $\mathbf{s}$ az

$$\mathbf{s} \cdot \mathbf{r} = \pm vt + konst$$

sík normális egységvektora. Tekintettel arra, hogy eme hullámok hullámfelületi síkok, elektormágneses síkoknak nevezzük őket.
Legyen a közegünk inhomogén, ekkor a hullámegyenlet az alábbi módon módosul:

$$c^2(\mathbf{r}) \triangle \Psi(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2}(\mathbf{r}, t) = 0$$

Két eset lehetséges, a közeg lassan vagy gyorsan változik. Legyen L a változás karakterisztikus hossza:

$$L \sim \frac{1}{|\Delta n|}$$

Gyorsan változó közegnél, azaz ha az L összemérhető λ-val akkor nincs értelme hullámról beszélni.
Lassan változó közegnél azaz, ha L $\gg \lambda$, akkor a megoldás:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}, t) e^{i\phi(\mathbf{r}, t)}$$

Ez egy lokális síkhullám megoldás. A ψ amplitúdó lassan változik, a ϕ fázis gyorsan változik, λ távolságon 2π-t. A fázis hordozza az információt. Ez az eikonál közelítés, matematikailag:

$$|\boldsymbol{\nabla}\psi| \ll |\boldsymbol{\nabla}\phi|$$

Helyettesítsünk be és végezzük el a deriválásokat:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} + i\psi \frac{\partial \phi}{\partial t} \right) e^{i\phi}$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = \left[\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} + 2i \frac{\partial \psi}{\partial t} \frac{\partial \phi}{\partial t} + i\psi \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - \psi \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^2 \right] e^{i\phi} \approx -\psi \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^2 e^{i\phi}$$

$$\triangle \Psi = \left[\triangle \psi + 2i \left(\boldsymbol{\nabla} \psi \boldsymbol{\nabla} \phi \right) + i\psi \triangle \phi - \psi \left(\boldsymbol{\nabla} \phi \right)^2 \right] e^{i\phi} \approx -\psi \left(\boldsymbol{\nabla} \phi \right)^2 e^{i\phi}$$

Beírva ezeket a hullámegyenletbe megkapjuk az eikonál-egyenletet:

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^2 = c^2 \left(\mathbf{r} \right) \left(\boldsymbol{\nabla} \phi \right)^2$$

ahol $c\left(\mathbf{r}\right) = \frac{c_0}{n(\mathbf{r})}$
Fejtsük sorba a fázist:

$$\phi \left(\mathbf{r}, t \right) = \phi_0 + \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{r} + \frac{\partial \phi}{\partial t} \cdot t + ...$$

Ez alapján a hullámfüggvény:

$$\Psi \left(\mathbf{r}, t \right) = \psi e^{i\phi} = \psi e^{i\phi_0} e^{i\left(\boldsymbol{\nabla} \phi \mathbf{r} + \frac{\partial \phi}{\partial t} t \right)}$$

Vezessük be a következő mennyiségeket; $\boldsymbol{\nabla} \phi \left(\mathbf{r}, t \right) = k \left(\mathbf{r}, t \right)$ és $\omega \left(\mathbf{r}, t \right) = -\frac{\partial \phi}{\partial t}$
A Young-tételt felhasználva belátható, hogy a hullámszámvektor időszerinti és az ω helyszerinti deriváltja megegyezik, hiszen ezek magának a fázisnak a kétszeres deriváltjai:

$$\frac{\partial k_l}{\partial t} = -\frac{\partial \omega}{\partial x_l}$$

Amiből következik, hogy $\boldsymbol{\nabla} \times k \left(\mathbf{r} \right) = 0$. Ekkor a Stokes-tétel miatt a következőt állíthatjuk:

$$\oint k(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int \boldsymbol{\nabla} \times k(\mathbf{r}) d\mathbf{F} = 0$$

$$0 = \oint k(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int k_x^{(1)} dx + \int k_x^{(2)} \left(-dx \right)$$

Amiből az következik, hogy $k_x^{(1)} = k_x^{(2)}$ azaz :

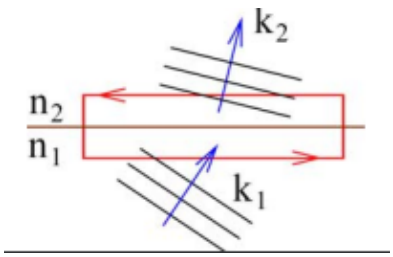
$$\frac{\omega}{c_1} sin \left(\alpha \right) = \frac{\omega}{c_2} sin \left(\beta \right)$$

Ezt az összefüggést lokális Snellius-törvénynek hívjuk.
Az $\omega = const.$ feltételezést felhasználva a rövidített vagy egyszerűsített eioknál-egyenlethez juthatunk.

$$\phi \left(\mathbf{r}, t \right) = -\omega t + \Phi \left(\mathbf{r} \right)$$

Nézzük meg az egyszeres deriváltakat, $\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\omega$ és $\boldsymbol{\nabla} \phi = \boldsymbol{\nabla} \Phi$. Ez alapján:

$$\omega^2 = \left(\frac{c_0}{n \left(\mathbf{r} \right)} \right)^2 \cdot \boldsymbol{\nabla} \Phi^2 = \left(\frac{c_0}{n \left(\mathbf{r} \right)} \right)^2 \cdot k^2 \left(\mathbf{r} \right)$$



9.1 ábra: Hullámszámok a felületeken

A fénysugarak irányába mutató $\mathbf{s}$ egységvektor, a fénysugarak definíciójából következően, a hullámfelületek normálisának irányába mutat.

$$n\mathbf{s} = \boldsymbol{\nabla}\phi$$

illetve

$$|\boldsymbol{\nabla}\phi| = \frac{d\phi}{ds'} = n$$

ahol s' a fénysugár mentén bevezetett ívhosszúság-paraméter. Jelölje $n(s')$ az $n = n(\mathbf{r})$ törésmutatónak a fénysugár s' paraméterértékéhez tartozó értéket, akkor az $n(s')\,ds'$-nek a fénysugár mentén vett:

$$\int_{P_0}^{P} n(s')ds'$$

vonalmenti integrálját optikai útnak nevezzük. Ez vákuumban a fénysugár P_0 és P pontok közti szakaszának a geometriai értelemben vett hossza, általában pedig $(n > 1)$ megfelel annak az úthossznak, melyet a fény vákuumban ugyanannyi idő alatt megtenne.
Mivel $nds' = d\phi$ ezért:

$$\int_{P_0}^{P} nds' = \int_{P_0}^{P} d\phi = \phi(P) - \phi(P_0)$$

ezáltal a

$$\phi(\mathbf{r}) = \int_{P_0}^{P(\mathbf{r})} n(s')ds'$$

függvényt magát is optikai útnak, illetve eikonálnak nevezzük. Ez úgy értendő, hogy a $\phi(\mathbf{r})$ megadja a $P(\mathbf{r})$ pontnak valamely P_0 ponttól számított optikai távolságát.

9.2. Fermat-elv és kapcsolat a klasszikus mechanikával

1665-ben Pierre Fermat a legrövidebb út elvét akarta felhasználni a fénytörési törvények levezetéséhez, azonban rájött,hogy ezt módosítani kell, ugyanis így a beeső és a megtört fénysugár egy egyenesbe esne. Ezért Fermat bevezette a legrövidebb idő elvét, amely azt mondja ki, hogy a fény mindig olyan úton halad, amely megtételéhez a lehető legkevesebb időre van szüksége. Azaz:

$$\int_{A}^{B} dt = min$$

Célszerű az integrált megszorozni a fénysebességgel (c) ez a beszorzás nem folyásolja be a minimum-tulajdonságot.
A fény sebessége abban a közegben, ahol éppen halad:

$$v = \frac{ds}{dt}$$

A közeg törésmutatója:

$$\frac{c}{v}$$

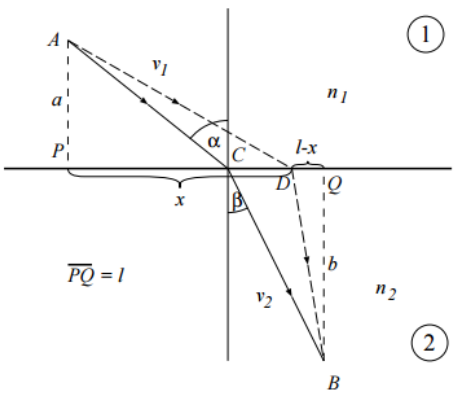
Ezeket felhasználva rendezzük át kicsit az integrált:

$$c\int_{A}^{B} \frac{dt}{ds}ds = \int_{A}^{B} \frac{c}{v}ds = \int_{A}^{B} nds = min$$

Homogén közegben a törésmutató mindenhol ugyan az a konstans érték. Ekkor a

$$n\int_{A}^{B} ds = min$$

funkcionált kell minimalizálnunk. A megoldása az A és B pontokat összekötő legrövidebb út azaz egyenes. Homogén közegben tehát a fény mindig egyenes mentén terjed.
Vegyünk két egymással érintkező különböző törésmutatójú homogén közeget. Amikor a fény a közeghatárhoz ér, megtörik.



9.2 ábra: Fény törése közeghatáron

Az ábra jelöléseit használva a Fermat-elv:

$$n_1\sqrt{a^2+x^2}+n_2\sqrt{b^2+(l-x)^2}=min$$

Legyen a fény sebessége az n_1 törésmutatójú közegben v_1, az n_2-es közegben pedig v_2. Keressük a C pont helyé, amelyen áthaladva a fénysugár, a legrövidebb idő alatt ér B-be. A felírt összefüggés szélsőértékét egyszerű x szerinti deriválással határozhatjuk meg:

$$n_1\frac{x}{\sqrt{a^2+x^2}}-n_2\frac{l-x}{b^2+(l-x)^2}=0$$

Trigonometrikus összefüggéseket felhasználva:

$$n_1 sin\left(\alpha\right)=n_2 sin\left(\beta\right)$$

Amiből következik, hogy

$$\frac{n_2}{n_1}=\frac{sin\left(\alpha\right)}{sin\left(\beta\right)}$$

Ez pedig a Snellius-Descartes-féle törési törvény.
A Fermat-elv alapján, egyetlen mennyiség extremálissá válása meghatározza a fény útját. A fizikusok szerettek volna a fizika más területein is hasonló elveket találni, azaz egy adott mennyiség extremálissá, zérussá, végtelenné válása vagy akár változatlansága kitünteti a környező világ egyes állapotai. Louis Maupertuis 1744-ben jelentett be a párizsi Akadémia ülésén,hogy talált egy mennyiséget, ami a mechanikában minimális valóságos mozgások esetén. A hatás nevet adta neki.

$$S=\int mvds$$

Itt m a test tömege, v pedig a sebessége. Euler és Lagrange érdeme,hogy Maupertuis-elvét jól használható matematikai formába öntötték. Módosították a hatásdefiníciót úgy, hogy a független változónak az időt vették.

$$S=\int Ldt$$

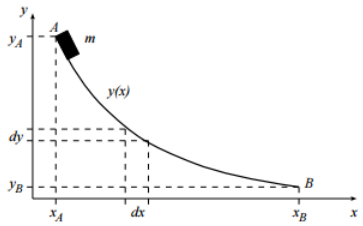
Az itt szereplő L Lagrange-függvény függ az általános koordinátáktól, sebességektől és függhet az időtől is. Ez alapján:

$$S=\int_{t_1}^{t_2} L\left(q_i,\dot{q}_i\right)dt$$

Ez a kifejezés a valóságban megvalósuló mozgás során szélsőértéket vesz fel. A mozgás kezdeti és végső helyzete között kell elvégezni az integrálást. A függvénynek annál a q_i-nál lesz szélső értéke, amely kielégíti a

$$\frac{\partial L}{\partial q_j}-\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}=0$$

Ahol j=1,...,n. Ez egyben a mozgásegyenlete is a mechanikai rendszernek. Az általános megoldás 2n darab tetszőleges állandót tartalmaz, amelyek a kezdőfeltételekből számolhatók.
1696-ban Bernoulli felvetette a brachisztochron- vagy legrövidebb idő-problémát. Ez megoldható az előbb bevezetésre került ún. Hamilton-elv segítségével.



9.3 ábra: Brachisztochron-probléma

A probléma a következő: felveszünk a függőleges síkon két pontot, melyek nem ugyanazon függőleges egyenes mentén helyezkednek el. Milyen alakú lesz az a pálya, amelyen egy kezdősebesség nélküli test a gravitációs mező hatására, súrlódás nélkül csúszva a legrövidebb idő alatt jut el A-ból B-be?
A test csúszás közben dt idő alatt ds utat tesz meg, miközben sebessége v nagyságú. A sebesség definíciójából adódik, hogy

$$dt = \frac{ds}{v}$$

Írjuk fel a pálya összes kis ds szakaszára ezt az összefüggést és összegezzük azokat. Ezáltal megkapjuk az A-ból B-be érkezés idejét.

$$T = \int_A^B \frac{ds}{v}$$

A ds szakasz hossza $\sqrt{dx^2 + dy^2}$. Emeljünk ki dx-et a gyök alól!

$$ds = \sqrt{1 + y^2} dx$$

Az energiamegmaradás segítségével le tudjuk írni, a sebesség koordináta függését. A test összes energiája A pontban legyen E_A, ez egyenlő lesz a helyzeti energiával.

$$E_A = m \cdot g \cdot y_A$$

Az m a test tömege, g pedig a grav. gyorsulás. Egy tetszőleges pontban a test összes energiája a helyzeti és mozgásinak az összege:

$$E_p = m \cdot g \cdot y + \frac{1}{2} m v^2$$

A mozgás során a test összes energiája állandó, azaz:

$$m \cdot g \cdot y_A = m \cdot g \cdot y + \frac{1}{2} m v^2$$

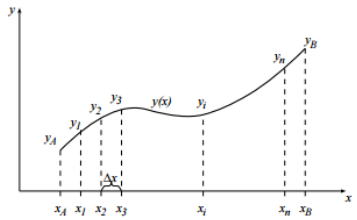
Ebből v-t kifejezve:

$$\sqrt{2g\left(y_A - y\right)}$$

Visszahelyettesítve:

$$T = \frac{1}{\sqrt{2g}} \int_{x_A}^{x_B} \sqrt{\frac{1 + y^2}{y_A - y}} dx$$

Ha y helyébe egy tetszőleges pálya alakját írjuk, akkor megkapjuk a befutásához szükséges időt. Adott pályánál T értéke a többi pálya T-jéhez viszonyítva minimális lesz, azaz meg kell keressük a legkisebb T-hez tartozó $y\left(x\right)$ függvényt.
Euler-féle megoldása a problémának:
Az $y\left(x\right)$ függvényt közelítsük véges sok pontjában felvett értékével. Ezáltal a funkcionál szélsőérték problémáját egy véges sok változótól függő mennyiség extrémumának meghatározására vezethetjük vissza.



9.4 ábra: Brachisztochron-probléma megoldása

Felosztjuk az $x_A \leq x \leq x_B$ intervallumot n+1 egyenlő részre. Legyen egy kis szakasz hossza $\Delta x = \frac{x_B - x_A}{n+1}$.
$y\left(x_i\right) = y_i$ és az $x_0 = x_A$ és $x_{n+1} = x_B$-hez tartozó értékek,y_A és y_B a feladat kitűzésekor megadott számok. A függvény deriváltját egy differencia hányadossal, az integrált pedig egy szummával közelítve:

$$I = \sum_{i=1}^{n+1} L\left(y_i, \frac{y_i - y_{i-1}}{\Delta x}, x_i\right) \Delta x$$

Ahhoz, hogy létezzen szélsőértéke ennek a függvénynek, a szükséges feltétele az, hogy az összes parc. deriváltja eltűnjön.

$$\frac{\partial I}{\partial y_i} = \frac{\partial L\left(y_i, y_i', x_i\right)}{\partial y_i} \Delta x + \left[\frac{1}{\Delta x} \frac{\partial L\left(y_i, y_i', x_i\right)}{\partial y_i'} - \frac{1}{\Delta x} \frac{\partial L\left(y_{i+1}, y_{i+1}', x_{i+1}\right)}{\partial y_{i+1}'}\right]$$

Tartsunk Δx-szel nullához, ez a következő egyenletre vezet:

$$\frac{\partial L}{\partial y} - \frac{d}{dx} \frac{\partial L}{\partial y'} = 0$$

Kifejtve egy közönséges másodrendű diff. egyenletet kapunk:

$$\frac{d}{dx}\frac{\partial L}{\partial \acute{y}} = \frac{\partial^2 L}{\partial \acute{y}^2}\cdot y'' + \frac{\partial^2 L}{\partial \acute{y}\partial y}\cdot \acute{y} + \frac{\partial^2 L}{\partial \acute{y}\partial x}$$

Az egyenlet az Euler-Lagrange egyenlet, megoldása pedig megadja azt az $y(x)$ függvényt ami extremálissá teszi a funkcionált.
Ezek után analógiát vonhatunk a pontmechanika és a geometriai optika között. Az "alapmennyiség" a hatásintegrál és az eikonál. Deriválással mindkettőből további mennyiségeket tudunk származtatni:

$$\mathbf{p} = \boldsymbol{\nabla} S; E = -\frac{\partial S}{\partial t}$$

$$\mathbf{k} = \boldsymbol{\nabla}\phi; \omega = -\frac{\partial \phi}{\partial t}$$

Mindkettőnek vannak alapegyenletei, mint a Hamilton-Jacobi egyenlet és az eikonál egyenlet:

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = H(\mathbf{r},\mathbf{p}) \Rightarrow E = H(\mathbf{r},\mathbf{p})$$

$$-\frac{\partial \phi}{\partial t} = \Omega(\mathbf{r},\mathbf{k}) \Rightarrow \omega = \Omega(\mathbf{r},\mathbf{k})$$

Ha E és ω mozgásállandó, ezek rövidített alakját kapjuk:

$$S(\mathbf{r},t) = -Et + S_0(\mathbf{r}) \Rightarrow E = H(\mathbf{r},\mathbf{p} = \boldsymbol{\nabla} S_0)$$

$$\phi(\mathbf{r},t) = -\omega t + \Phi(\mathbf{r}) \Rightarrow \omega = \Omega(\mathbf{r},\mathbf{k} = \boldsymbol{\nabla}\Phi)$$

Ezáltal felírhatóak a Hamilton-féle kanonikus egyenletek és a Hamiton-féle sugáregyenletek:

$$\dot{r} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}; \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}}$$

$$\dot{r} = \frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{k}}; \dot{k} = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{r}}$$

Az alábbi következtetéseket vonhatjuk le:

$$\mathbf{p} \sim \mathbf{k} \Rightarrow \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$$

$$E \sim \omega \Rightarrow E = \hbar\omega$$

$$0 = \delta S = \delta\int L dt = \delta\int K - V dt = \delta\int 2K - E dt = \delta\int 2K dt =$$

$$= \delta\int mv^2 dt = \delta\int mv^2\frac{dl}{v} = \delta\int mv dl = \delta\int |\mathbf{p}|\, dl = \delta\int \mathbf{p} d\mathbf{r}$$

Ennek optikai analógja:

$$\delta\int \mathbf{k} d\mathbf{r} = 0 = \delta\int |\mathbf{k}|\, dl = \delta\int \frac{\omega}{c_0} n(\mathbf{r})\, dl = \frac{\omega}{c_0}\delta\int n(\mathbf{r})\, dl$$

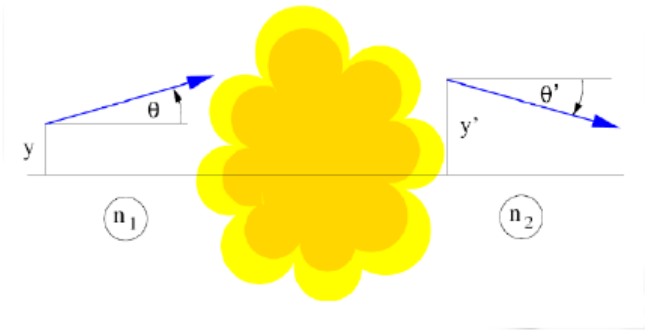
Ez pedig éppen a Fermat-elv. A legrövidebb út az, amelyik mindenhol merőleges a $\Phi(\mathbf{r}) = const.$ felületekre. A Fermat-elv által meghatározott fénysugarak az eikonál-felületek ortogonális trajektóriái.

9.3. Paraxiális közelítés

Paraxiális közelítésben hengerszimmetrikus, tengelyközeli rendszereket vizsgálunk. A feltételeink:

- A tengelytől való távolság kisebb, mint bármilyen releváns fókusztávolság, vagy rendszerméret.
- A sugarak szögei kicsik a tengelyhez képest. ($\theta \ll 1$)

Ebben a közelítésben: $sin\,(\theta) \approx \tan\theta \approx \theta$ A fénysugarakat az optikai tengelytől mért (előjeles!) y távolsággal, és szintén az optikai bezárt (előjeles!) szöggel jellemezzük. Tetszőleges paraxiális rendszerben a fényterjedése



9.4 ábra: Paraxiális közelítés

leírható mátrix- és vektorműveletekkel, azaz:

$$\begin{pmatrix} y \\ n_1\vartheta \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} y' \\ n_2\vartheta' \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} y' \\ n_2\vartheta' \end{pmatrix} = \mathbf{M}\begin{pmatrix} y \\ n_1\vartheta \end{pmatrix}$$

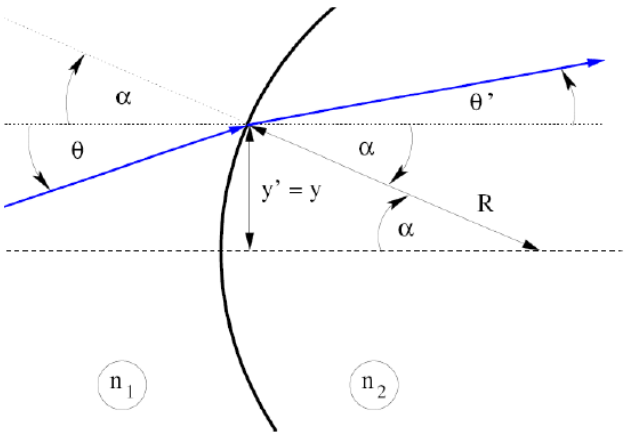
Van három úgy nevezett alapeset, amelyekre fel tudunk írni mátrixokat és ezeket építőkövekként használhatunk összetett rendszerek leírására. Az első ilyen a szabad terjedés.
A fény adott, n törésmutatójú közegben d távolságot tesz meg. Ilyenkor a szög és a törésmutató nyilván nem változik. Viszont az y a θ függvényében igen, az alábbi módon:

$$\acute{y} = y + d\tan\theta \approx y + d\theta = y + \frac{d}{n}n\theta$$

Ebből már könnyű felírni a szabad terjedés mátrixát:

$$\mathbf{M}_{szabad} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{d}{n} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

A második, a törés gömbfelületen. A fény egy gömb felületű közeghatáron halad keresztül az ábra szerint.



9.7 ábra: Törés gömbfelületen

$$\alpha \approx -\frac{y}{R}$$

valamint

$$y' = y$$

Írjuk fel a Snellius-Descartes törvényt kis szögekre:

$$n_1 (\Theta - \alpha) \approx n_2 (\Theta' - \alpha)$$

Vagyis: $n_2\acute{\Theta} = \frac{n_1 - n_2}{R} y + n_1\Theta$
Ez alapján a gömbtörés mátrixa:

$$\mathbf{M}_{torcs} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{n_1 - n_2}{R} & 1 \end{pmatrix}$$

Itt felhasználtunk egy konvenciót, mégpedig, hogy R előjele a görbület irányától függően lehet pozitív vagy negatív. Az ábrán látott esetben, pozitív. Ha az ellenkező (a gömb középpontja a másik oldalon van) akkor negatív. Ez nem függ a fénysugár irányától! Ha a fénysugár megfordul, akkor is ugyanezt a konvenciót kell alkalmazni! Az $R \to \infty$ esetben visszakapjuk az egységmátrixot.
A harmadik eset a visszaverődés gömbfelületről. Hasonló, mint az előző, azonban van egy lényeges különbség a két eset között. A fénysugár nem megtörik, hanem visszaverődik és ugyanabban a közegben halad tovább. Fennállnak a következő összefüggések: $\alpha \approx -\frac{y}{R}$, $y' = y$ és $\alpha - \theta' = \theta - \alpha$. Ebből adódik, hogy

$$n\theta' = -\frac{2n}{R} y - n\theta$$

Így a visszaverő gömbfelület mátrixa:

$$\mathbf{M}_{gombtukor} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{-2n}{R} & -1 \end{pmatrix}$$

9.4. Optikai, leképezési törvények, felbontóképesség

Fókuszpont: minden párhuzamos fénysugarat egy pontba gyűjtünk össze, az y y'-tól függetlenül valahol nulla lesz.
Leképezés: egy pont leképezése során a pontból kiinduló fénysugarat θ-tól függetlenül egy másik pontba gyűjtünk össze.
Gömbtükör esetén a rendszer leképezési mátrixa egy szabad terjedési mátrixból és egy visszaverődési mátrix szorzatából áll,

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 + \frac{2d}{R} & \frac{d}{n} \\ \frac{-2n}{R} & -1 \end{pmatrix}$$

ahol a θ azért nulla, mert a tengellyel párhuzamosan érkeznek a sugarak.

$$\begin{pmatrix} y' \\ \vartheta' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(1 + \frac{2d}{R}\right) y \\ -\frac{2n}{R} y \end{pmatrix} \Rightarrow y' = \left(1 + \frac{2d}{R}\right) y$$

Mivel a fókuszpontban $y' = 0$ ezért

$$d = f = -\frac{R}{2}$$

Ezáltal megkaptuk a gömbtükör fókusztávolságát.
Írjuk fel a gömbtükör leképezési törvényét is ! A rendszer leképezési mátrixa most egy tárgytól a tükörig tartó szabad terjedésből, egy visszaverődésből és egy tükörtől a leképezésig tartó szabad terjedésből áll. A terjedési mátrix e három szorzata:

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 + \frac{2k}{r} & k + \left(1 + \frac{2k}{R}\right) t \\ \frac{-2}{R} & -1 - \frac{2t}{R} \end{pmatrix}$$

Itt k a képtávolság, t a tárgytávolság. Mivel az y' a leképezésnél független a θ-tól, ezért mátrix első sorának második eleme nullát ad, így a fókuszra vonatkozó összefüggés felhasználásával megkapjuk a már ismert leképezési törvényt:

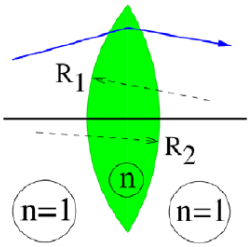
$$k + \left(1 + \frac{2k}{R}\right) t = k + \left(1 - \frac{k}{f}\right) = 0 \Rightarrow \frac{1}{f} = \frac{1}{k} + \frac{1}{t}$$

Egy vékony lencsénél két törőfelületről beszélhetünk, melyek két, R_1 és R_2 sugarú gömbfelületből állnak. A lencse anyagának törésmutatója n, a lencsét körülvevő közegé 1. A baloldali törőfelület mátrixa legyen M_L, a jobb oldalié M_R. Azaz:

$$\mathbf{M}_L = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{1-n}{R_1} & 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{M}_R = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{n-1}{R_2} & 1 \end{pmatrix}$$

A rendszert leíró mátrix ezek szorzata lesz a következő kép alapján:



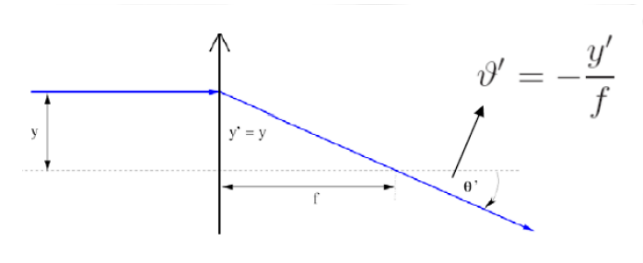
9.14 ábra: Vékony lencse

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}_R\mathbf{M}_L = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ (n-1)\left(\frac{1}{R_2} - \frac{1}{R_1}\right) & 1 \end{pmatrix}$$

Az optikai tengellyel párhuzamosan beérkező fénysugár változása a rendszeren való áthaladás után:

$$\begin{pmatrix} y' \\ \vartheta' \end{pmatrix} = \mathbf{M}\begin{pmatrix} y \\ \vartheta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y \\ yM_{21} \end{pmatrix}$$

Így az $M_{21} = -\frac{1}{f}$, tehát a fókusztávolság:



9.17 ábra:Vékony lencse

$$\frac{1}{f} = -M_{21} = (n-1)\left(\frac{1}{R_1} - \frac{1}{R_2}\right)$$

A vékony lencse leképezésének leírásához három mátrixot kell figyelembe vennünk, egyszer a tárgytávolságnyi szabad terjedés mátrixát, egyszer a törés mátrixát, egyszer pedig a lencsétől a képtávolságig terjedő szabad terjedés mátrixát. Ezeket összeszorozva kapjuk meg a teljes optikai rendszer mátrixát, ami a következőképpen néz ki:

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & k \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\frac{1}{f} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & t \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1-\frac{k}{f} & k+t-\frac{kt}{f} \\ -\frac{1}{f} & 1-\frac{t}{f} \end{pmatrix}$$

Mivel leképezésnél y' független a θ-tól, ezért $M_{12} = 0 \to k + t - \frac{kt}{f} = 0 \Rightarrow \frac{1}{f} = \frac{1}{k} + \frac{1}{t}$. Azaz itt is igaz a leképezési törvény. Teljesen általános leképezés esetén a leképezési mátrix:

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}$$

Ezzel az a probléma, hogy nem lehet tudni, hogy hol a rendszer eleje és vége. Így módosítanunk kell egy kicsit:

$$\mathbf{M}' = \begin{pmatrix} 1 & k_0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & t_0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Használjuk ki azt a tényt, hogy tetszőleges paraxiális optikai rendszer leképezési mátrixának determinánsa $detM = +1$ a következő összefüggéseket kapjuk a tárgy- és képtávolságra:

$$t_0 = \frac{1}{M_{21}}\left(detM - M_{22}\right) = \frac{1}{M_{21}}\left(\pm 1 - M_{22}\right)$$

$$k_0 = \frac{1}{M_{21}}\left(detM - M_{11}\right) = \frac{1}{M_{21}}\left(\pm 1 - M_{11}\right)$$

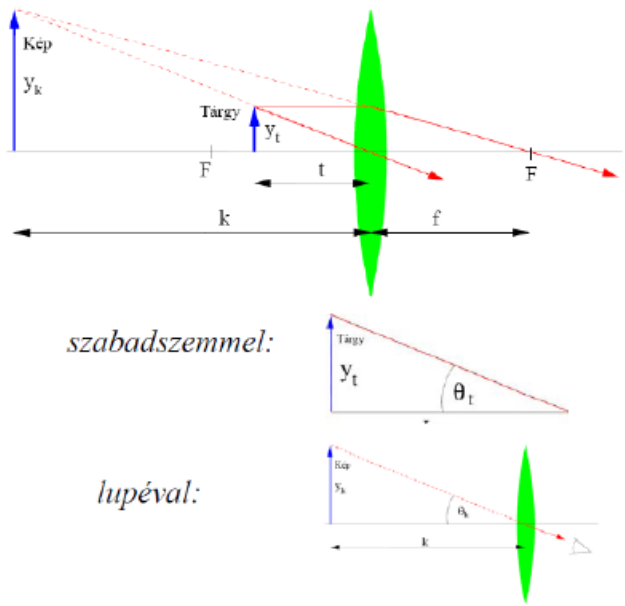
Így az M' a következőképpen egyszerűsödik:

$$\mathbf{M}' = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1-detM}{M_{21}} \\ M_{21} & 1 \end{pmatrix}$$

aminek az M_{12} eleme 0 lesz, mivel a determináns $+1$. Láttuk, hogy a vékony lencséknél a mátrix éppen így néz ki, így a fókusztávolság: $\frac{1}{f} = -M_{21}$

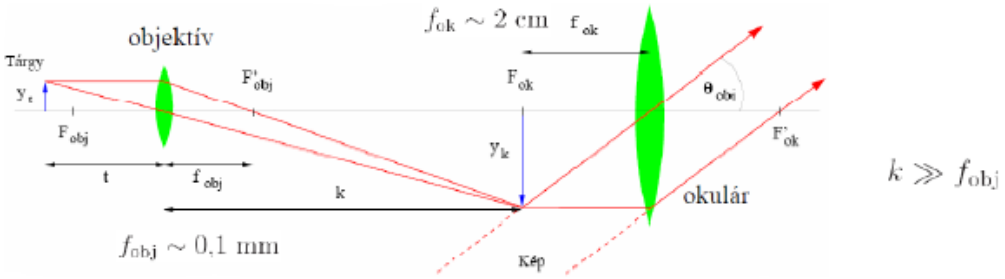
9.5. Optikai eszközök, felbontóképesség

A nagyítólencse vagy lupe nagyított, virtuális ($k < 0$) képet készít a fókusztávolságnál közelebb lévő tárgyakról. A probléma vele az, hogy nem tudjuk elég közel helyezni a szemünket. Ennek megoldására használunk két



9.22 ábra: Lupe

lencsét. Az objektív levetíti a képet, az okulár pedig lupeként funkcionál.



9.23 ábra:Mikroszkóp

Egy mikroszkópban az objektív és az okulár fókuszsíkjai egymástól a mikroszkóp felépítése által meghatározott,

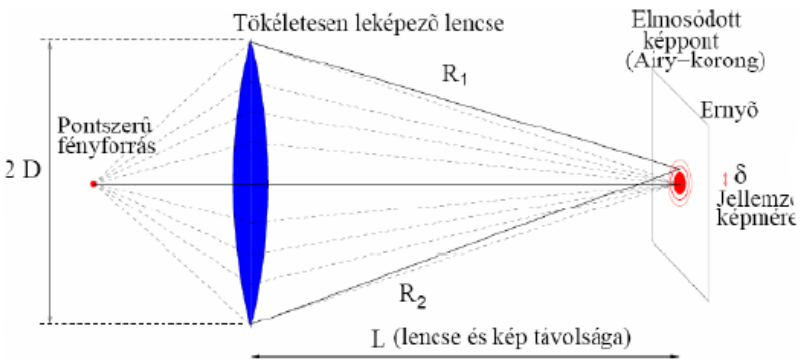
állandó távolságban vannak. Ez az optikai tubushossz: $F_{obj}\bar{F}_{ok} = \Delta$ Egy mikroszkópban ennek szabványos értéke 160 nm. Az objektív laterális nagyítása:

$$N_{obj} = \frac{y_k}{y_t} = \frac{k}{t} = \frac{k - f_{obj}}{f_{obj}}$$

A szögnagyítása:

$$N_{sz} = \frac{\Theta_{obj}}{\Theta_t} \approx \frac{\tan\Theta_{obj}}{\tan\Theta_t} = \frac{y_k/f_{ok}}{y_t/L_0} = \frac{\Delta}{f_{obj}}\frac{L_0}{f_{ok}}$$

A távcsövek konfokális (egybeeső fókuszponttal rendelkező) összetett lencserendszerek. A tárgy a végtelenben van, a kép is egy végtelen távoli pontban keletkezik. Laterális nagyításról tehát nincs értelme beszélni, csak szögnagyításról. Mátrixoptikával úgy lehet leírni, hogy egy fókuszálás-szabad terjedés-fókuszálás történik az-az 3 mátrix szorzataként előállítható. Formálisan a fókusztávolság végtelen, ha a két lencse közötti távolság: $d = f_1 + f_2$. A szögnagyítás: $|M_{22}| = \frac{f_2}{f_1}$.
A távcső felbontása: $\frac{\lambda}{D}$ ahol D a távcső lencséjének átmérője.
A Kepler-távcső, amely csillagászati távcső, két gyűjtőlencséből áll és $d = f_{obj} + f_{ok}$. A Galilei-féle távcső objektívje gyűjtőlencse, az okulárja pedig szórólencse és $d = f_{obj} - f_{ok}$. A Newton-távcső hasonló elvi elrendezésű, mint a másik kettő, csak tükrökkel van megvalósítva. A tükrös távcsövek előnyei a lencsésekkel szemben, hogy olcsóbban, nagyobb átmérőjű tükrök állítóhatóak elő, ezáltal jobb felbontást lehet elérni.
Az optikai eszközök felbontóképességét a hullámoptika közelíthetősége határolja be. Tökéletes leképezést feltételezve a Fermat-elv szerint minden képalkotásban résztvevő fényút optikai úthossza megegyezik. A hullámoptika szerint mindenféle pályán haladhat a fény, de ott lesz nagy az amplitúdó, ahol körülbelül azonos fázisban érkeznek a hullámok. A szögnagyítás: $\frac{\delta}{L} < \frac{\lambda}{D}$. Azaz minden lencse megfelel egy résnek, amely $\frac{\lambda}{D}$ nagyságú



9.24 ábra: Felbontóképesség

diffrakciót okoz. Ez azt jelenti, hogy a mikroszkóp maximális felbontása $f\frac{\lambda}{D}$. A lencsére jellemző $\frac{D}{f}$ hányadost numerikus apertúrának nevezzük.

9.6. Optikai jelenségek a természetben, kausztikák

A kausztika jelentése, görbesereg burkolója. Az optikában kausztikák akkor alakulnak ki, ha közel párhuzamos fénysugarak esnek egy nem sík felületre. Emiatt alakul ki a szivárvány, a tavakon naplementekor látható fényes sávok, valamit a henger alakú üvegalkalmatosságok alján látható furcsa fényfoltok is.
Szivárvány esetén feltételezzük, hogy a vízcseppek gömb alakúak (ez nem teljesen igaz, de a jelenség lényegileg nem változik sokat a gömbtől eltérő cseppalak esetén sem).Ha sok párhuzamos fénynyaláb érkezik rá egy irányból, akkor ezek a csepp határán megtörnek, majd a cseppben haladnak, annak falán,akár többször is, visszaverődnek. Ezáltal a különböző színek szétválnak, mivel a különböző frekvenciájú fénysugarak egy kicsit eltérően törnek ugyanolyan törésmutatójú közegben is. Máshol lépnek ki a cseppből néhány visszaverődés után. Ha sok ilyen cseppre esnek ugyanolyan irányból érkező párhuzamos fénysugarak, akkor a cseppekből a fény nagy része ugyanolyan irányban jut ki, ezt látjuk szivárványnak.
Nagyobb tavaknál,pl. Balaton, lehet látni naplementekor a következő jelenséget: ha vízre nézünk, fényes csíkot látunk rajta, mintha a Nap ráfolyt volna a vízre egy sávon. Ennek oka, hogy a víz hullámzik, így a fénysugarak különböző irányba verődnek vissza a felületéről. A fényes sávot azért látjuk, mert minden hullámnak van olyan része, ami a szemünk irányába veri vissza a fényt, így a sok különböző helyről szemünkbe jutó napfényt egy összefüggő fényes sávnak látjuk.

10. A kvantumelmélet alapvető kísérletei(Grajzel Dániel)

10.1. Hőmérsékleti sugárzás

Egymástól elválasztott, különböző hőmérsékletű testek között is megindul a kiegyenlítődés a melegebb test által kibocsátott és az alacsonyabb test által elnyelt hősugárzás révén. Az egyensúly jellemzésére feltételezhetjük. hogy az nem közvetlenül a testek között, hanem az egyes test és az azokat körülvevő elektromágneses sugárzási tér között teremtődik meg a test által időegység alatt elnyelt és kisugárzott energia egyenlőségének elérésével. Kirchhoff vizsgálta elsőként az egyensúly kérdését hullámhosszanként. Bevezette a $(\nu, \nu + d\nu)$ frekvenciatartományban kisugárzott spektrális teljesítménysűrűség fogalmát.

$$u\left(T\right) = \int_0^\infty \rho(\nu, T) d\nu \tag{14}$$

Ahol $u\left(T\right)$ a teljes energiasűrűség. A test egységnyi felületére eső, illetve onnét kisugárzott $E\left(\nu, T\right)$ spektrális teljesítmény termikus egyensúlyban egyenlő. A beeső teljesítmény az energiasűrűség és a vákuumbeli fénysebesség szorzata: $c\rho\left(\nu, T\right)$ A beeső teljesítménynek a test $A\left(\nu, T\right)$ hányadát nyeli el, így az egyensúly:

$$E\left(\nu, T\right) = A\left(\nu, T\right) c\rho\left(\nu, T\right) \tag{15}$$

Ha egy test hőmérséklettől és frekvenciától függetlenül tökéletesen elnyeli a ráeső sugárzást, azaz $A = 1$ akkor abszolút fekete testnek nevezzük.
A fekete test ideálisan megvalósítja egy nagy vezetőképességű fémfallal körbe vett zárt tartomány, egy üregrezonátor. A fém felületére eső sugárzást a fématomok elnyelik, majd visszasugározzák, aminek makroszkopikusan a beeső fénynek majdnem tökéletes visszasugárzása felel meg az üreg belsejébe.
1900-ban Rayleigh és Jeans javasolták, hogy a statisztikus mechanikai rendszerek mintájára a sugárzási tér energiaviszonyainak jellemzésére is alkalmazzák az ekvipartíció tételét, azaz, hogy termikus egyensúlyban minden egyes termodinamikai szabadsági fokra $k_BT/2$ energia jut. Csatolt oszcillátorok rendszere esetén a független rezgési módosuk vagy normálkoordináták számának kétszeres adja a termodinamikai szabadsági fokok számát. Egyetlen módusban az elektromos és a mágneses sugárzási energia időátlaga egyenlő, továbbá két független polarizációs iránya van, tehát minden módus 4 termodinamikai szabadsági fokot képvisel. Jelölje $dn\left(\nu\right)$ a $(\nu, \nu + d\nu)$ infinitezimális vastagságú frekvenciarétegben és egységnyi térfogatban a módusok számát. Ekkor a hozzárendelhető energiasűrűség:

$$\rho\left(\nu, T\right) d\nu = 2 \cdot 2 \cdot \frac{1}{2} k_B T \cdot dn\left(\nu\right) \tag{16}$$

Vegyük számba a módosukat egy L oldalhosszúságú kockára. A frekvencia lehetséges értékeit három nem-negatív egész szám szabályozza:

$$\nu_{n_1, n_2, n_3} = \frac{c}{2L} \sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2} \tag{17}$$

A ν_0 frekvenciánál kisebb frekvenciájú módusok száma, azok amelyekre jellemző számhármasokra teljesül, hogy

$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 \leq \left(\frac{2L\nu_0}{c}\right)^2 \tag{18}$$

Ez pedig olyan nem-negatív egész koordinátával jellemezhető pontok száma, melyek távolsága az origótól kisebb, mint $2L\nu_0/c$ azaz egy ilyen sugárral adott gömb térfogatának a nyolcada:

$$N\left(\nu < \nu_0\right) = \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} \left(\frac{2L\nu_0}{c}\right)^3 \tag{19}$$

A keresett módussűrűség:

$$dn\left(\nu_0\right) = \frac{1}{L^3} \left(N\left(\nu_0 + d\nu\right) - N\left(\nu_0\right)\right) = \frac{4\pi}{c^3} \nu_0^2 d\nu \tag{20}$$

Ha ezt behelyettesítjük a spektrális sűrűség fenti képletébe, akkor megkapjuk a Rayleigh-Jeans sugárzási törvényt:

$$\rho\left(\nu, T\right) = \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 k_B T \tag{21}$$

Ez alacsony frekvenciák esetén jól vissza adja a méréseket, de a teljes térbeli energiasűrűségre végtelen értéket ad. A nagy frekvenciás korlátlan növekedést hívjuk ultraibolya katasztrófának. Ezt követően Planck megadott egy interpoláló képletet ami kis frekvencián a Rayleigh-Jeans, nagy frekvencián a Wien-törvényt adja vissza:

$$\rho\left(\nu, T\right) = \alpha \nu^3 \frac{1}{e^{\beta\nu/T} - 1} \tag{22}$$

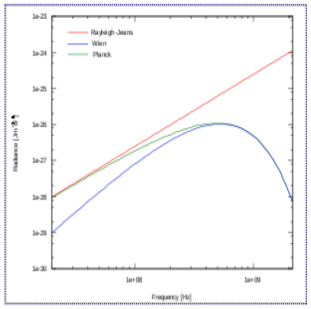
ahol α és β két állandó, amelyeket az adatokhoz lehet illeszteni. Planck feltételezte, hogy a ν frekvenciájú módusban tárolt energia $\epsilon_0(0)$ elemi energia-csomagok egész számú többszöröse lehet azaz $l \cdot \epsilon$, ahol l pozitív egész szám. Véges T hőmérsékleten a csomagok előfordulási statisztikájára Boltzmann képletét alkalmazva:

$$p(l) = \left(1 - e^{-\epsilon_0/k_B T}\right) * l e^{-\epsilon_0/k_B T} \tag{23}$$

Az eloszlás normált. Ezután kiszámíthatjuk a módus energiájának várható értékét:

$$\epsilon(\nu) = \sum_{l=0}^{\infty} l\epsilon_0(\nu)\, p(l) = \epsilon_0(\nu) \frac{1}{e^{\epsilon_0/k_B T} - 1} \tag{24}$$

Ha ezt a megszorozzuk a módus szabadsági fokainak számával és a módusok sűrűségének kifejezésével, a



spektrális energiasűrűségre:

$$\rho(\nu, T) = \frac{8\pi}{c^3}\nu^2 \cdot \epsilon_0(\nu) \frac{1}{e^{\epsilon_0/k_B T} - 1} \tag{25}$$

adódik. Az interpolációs képlettel való egyezés érdekében Planck feltette, hogy

$$\epsilon(\nu) = h\nu \tag{26}$$

és ezzel eljutott a róla elnevezett fekete test sugárzási törvény felfedezéséhez:

$$\rho_{Planck}(\nu, T) = \frac{8h\pi}{c^3}\nu^3 \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1} \tag{27}$$

A képlet maximumhelyére vonatkozó szélsőérték számítással megkaphatjuk a Wien-féle eltolódási törvényt:

$$\frac{\nu_{max}}{T} = 2,821\frac{k_B}{h} \tag{28}$$

A tapasztalattal való összevetés meghatározza a Planck-állandó értékét:

$$h = 6,62607 \cdot 10^{-34} Js \tag{29}$$

10.2. Fotoeffektus

A fotoelektromos jelenséget Hertz fedezte fel 1887-ben. Ennek során fémből elektronok lépni ki fény hatására. A jelenséget kísérletileg alkáli fémekkel könnyű vizsgálni, mert itt a látható fény is elektron kilépést eredményez. A kísérletből az adódik, hogy a kilépő fotoelektronok száma az intenzitással arányos és a frekvenciától általában nem függ. Azonban található egy minimális frekvencia ami alatt intenzitásfüggetlenül nem lépnek ki elektronok. A kísérlet során a kilépő elektronok áramát mérhetjük a fény intenzitása és frekvenciája függvényében. Ha az anód és a katód közötti feszültséget növeljük állandó intenzitás és frekvencia mellett nő a kilépő elektronok száma. Ha az összes eljut az anódra, akkor hiába növeljük a feszültséget, az áram nem növekszik tovább, ez a szaturációs áram, melynek értéke csak az intenzitástól függ. Ha a feszültséget negatív irányban csökkentjük egyre kisebb áramot mérünk. A negatív irányban vett legnagyobb feszültség (V_0) annak felel meg, amelyet a kilépő elektronok még éppen le tudnak győzni. Ez az elektronok mozgási energiájának felel meg és lineárisan függ a frekvenciától.
A kísérletet értelmezhetjük úgy, hogy a beérkező fény energiája részben az elektron atomból való kilépésére fordítódik, részben annak kinetikus energiájára. Ezek mellett még akár a katódnak is adhat valamekkora energiát az elektron, azaz

$$E_f = W + E_e + \Delta k \tag{30}$$

Ahol a W kilépési munka tulajdonképpen az atom ionizációs energiája. Ha ezeket az elektronokat V_0 feszültséggel éppen meg tudjuk állítani, akkor $eV_0 = E_e$, tehát $eV_0 = E_f - W$ ami éppen a kívánt lineáris összefüggés és

mérésből azt mondhatjuk, hogy $E_f = h \cdot f$, ahol h a Planck-állandó. A küszöbfrekvenciára pedig $W = hf_0$. Ekkor éppen kiszabadulnak az elektronok, de a legkisebb feszültség gátat sem tudják legyőzni.
Az intenzitás minden értéktől független. A megfigyelések csak úgy értelmezhetők, ha a fény kvantumok, azaz fotonok formájában terjed és ezen kvantumok hf energiát hordoznak és ők tudnak kilökni egy elektront. Hiába nagy a fény intenzitása, ha a frekvenciája kicsi, akkor az egyes kvantumok energiája is kicsi.

10.3. Compton-effektus

Compton 1922-ben vizsgálta meg Röntgen sugarak szóródását paraffinon. Azt tapasztalta, hogy a szórt sugárzásban nagyobb hullámhosszú komponensek jelennek meg, és a szögeloszlás is eltér a várakozástól. Klasszikusan a bejövő és kimenő hullám frekvenciája azonos. Ha elég nagy az intenzitás, a töltés visszalökődhet és a Doppler-effektus módosítja a frekvenciát, de elég kis intenzitásnál ez a hatás minimális. A megfigyelés szerint azonban alacsony intenzitásnál is megjelenik egyfajta frekvencia vagy hullámhossz módosulás, amelyet a klasszikus kép nem tud magyarázni.
A hullámhosszmódosulás magyarázata a részecskeképben egyszerűen látható. Bejön egy $p = hf/c = h/\lambda$ impulzusú foton és kimegy egy $p' = hf'/c = h/\lambda'$ impulzussal, miközben átadott a kettő különbségének megfelelő impulzust az elektronnak és az energiájából is adott át neki. Az elektron teljes energiája az ütközés előtt: $m_e^2c^4$, míg ütközés után: $E_e^2 = m_e^2c^4 + p_e^2c^2$ a fotonra pedig $E = hf$ és $E' = hf'$. Innen az energiamegmaradás:

$$E - E' = E_e - m_ec^2 \tag{31}$$

azaz:

$$hf - hf' = \sqrt{m_e^2c^4 + p_e^2c^2} - m_ec^2 \tag{32}$$

rendezzük ezt az impulzusra:

$$p_e^2c^2 = \left(hf + m_ec^2 - hf'\right)^2 - m_e^2c^4 \tag{33}$$

Ezt követően írjuk fel az impulzusmegmaradást is:

$$\mathbf{p_e} = \mathbf{p} - \mathbf{p}' \tag{34}$$

négyzetre emelés után:

$$p_e^2 = p^2 + p'^2 - 2pp'cos\left(\theta\right) \tag{35}$$

Helyettesítsük vissza az impulzus kifejezésébe:

$$h^2f^2 + h^2f'^2 - 2h^2ff'cos\left(\theta\right) = \left(hf + m_ec^2 - hf'\right)^2 - m_e^2c^4 \tag{36}$$

$$hf' = \frac{hf}{1 + \frac{hf}{m_ec^2}\left(1 - cos\left(\theta\right)\right)} \tag{37}$$

más alakban:

$$\frac{c}{f'} - \frac{c}{f} = \frac{h}{m_ec}\left(1 - cos\left(\theta\right)\right) \tag{38}$$

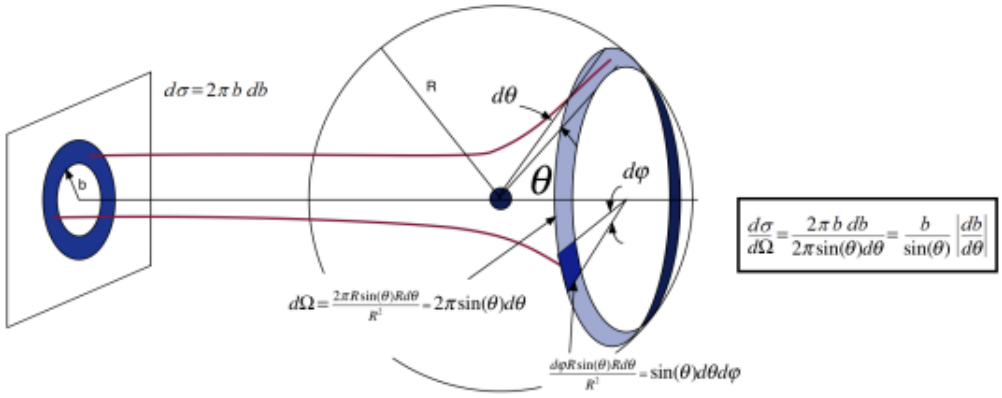
Ebből számolni tudjuk a hullámhossszmódosulást:

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_ec}\left(1 - cos\left(\theta\right)\right) = 2\lambda_C\left(sin\left(\theta/2\right)\right)^2 \tag{39}$$

ahol $\lambda_C = \frac{h}{m_ec} = 2.4pm$, a Compton-hullámhossz.
Ha $hf << m_ec^2$ azaz $\lambda \sim \lambda'$, tehát alacsony energiájú fotonok esetén nincs hullámhossz változás. A bejövő fényt hf energiájú fotonokra bontva a szórt részecskék száma arányos a fotonszámmal, azaz a Compton-szórás elemi folyamat, ami szintén a részecske képet támasztja alá. A mért hatáskeresztmetszetet a Klein-Nishina formula adja meg:

10.4. Rutherford-kísérlet

Rutherford 1911-ben mréte alfa-bomlásból származó részecskék aranyfólián való szóródásában a differenciális hatáskeresztmetszetet. A Thomson-modell alapján túlnyomó részt kis szögű szórást vártak, ezzel szemben a részecskék jó része visszaszóródott. Ezt egyfajta pontszerű maggal és annak centrális erőterében való eltérüléssel lehet magyarázni.
Egy E energiájú α részecske egy Z rendszámú, rögzített magot a kezdeti mozgási energia és a Coulomb-potenciál



A differenciális hatáskeresztmetszet klasszikus értéke

egyenlősége alapján $d = 2kZe^2/E$ távolságra tudná megközelíteni, ha b=0 impakt paraméterrel érkezik. Ezek alapján a differenciális hatáskeresztmetszet:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = k^2 \frac{Z^2 e^4}{4E^2} \frac{1}{(sin\,(\theta/2))^4} = \frac{d^2}{16\,(sin\,(\theta/2))^4} \tag{40}$$

Rutherford ezzel megegyező differenciális hatáskeresztmetszetet mért, mivel ólom α bomlásából származó nyalábot használt, amelynek energiája nem teszi lehetővé, hogy az α mag és az arany atommag annyira megközelítsék egymást, hogy a magerő szerepe is megjelenjen. Azt tudta megállapítani, hogy az atommag sugara kisebb, mint $3,4 \cdot 10^{-14}$ méter, ami több nagyságrenddel kisebb, mint az arany atom 10^{-10} méteres mérete.
Nagyobb energián viszont nagy szögekre azaz nagy impakt paraméterre eltérést találtak a fenti formulától, ugyanis ekkor az impakt paraméterekre már nem tekinthető pontszerűnek a mag, az α részecske lényegében közvetlenül nekiütközik és így már a magerő is szerepet játszik. Ez az impakt paraméter a mag sugarának és a magerő hatótávolságának összege.
A mag tehát egy, az atom angström nagyságrendű méreténél tíz- vagy százezerszer kisebb objektum, az atom méretét pedig elhanyagolható tömegű elektronfelhő adja. Kézenfekvő az atomra, mint egy miniatűr Naprendszerre gondolni, ahol a gravitációs erő helyébe az elektromos vonzás lép. Ez a Rutherford-féle atommodell lényege.

10.5. Millikan-kísérlet

Az elektron töltésének pontos meghatározását Robert Millikan 1910ben elvégzett kísérlete adta. Homogén, de változtatható nagyságú elektromos térbe töltött olajcseppet juttatott. A cseppek mozgását megfigyelve azaz sebességüket mérve, meghatározható az olajcsepp töltése. Feltételezve, hogy a kis, m tömegű cseppünk a felületi feszültség miatt gömb alakú. Az elektromos teret kikapcsolva, a mozgó olajcseppre a gravitációs erő, a levegő felhajtóereje és a súrlódási erő hat. Utóbbit a mozgó cseppnek a levegő molekuláival való ütközése okozza. Ha a csepp mérete jóval nagyobb, mint a levegő molekulák szabad úthossza, a súrlódási erő a Stokes-féle fékezőerőből határozható meg:

$$F = 6\eta\pi r v \tag{41}$$

ahol η a belső súrlódási együttható, v a sebesség, és r a sugár. A sebességgel arányos fékezőerő miatt a csepp egy idő után csak a függőlegesen mozog egyenletes sebességgel. A nehézségi erővel egyensúlyt tart a levegő felhajtóereje és a súrlódási erő. Az olaj illetve levegő sűrűsége legyen ρ_o és ρ_l:

$$\frac{4}{3}\pi r^3 (\rho_o - \rho_l)\, g = 6\pi\eta r v_0 \tag{42}$$

amiből meghatározható a csepp sugara:

$$r = \sqrt{\frac{9}{2}\frac{\eta v_0}{2\,(\rho - \rho_0)} g} \tag{43}$$

Az egymástól d távolságra lévő lemezekre akkora U feszültséget kapcsolva, hogy azok lebegjenek, akkor az elektromos térerősség a q töltésű cseppre qU/d erőt fejt ki és ez az erő tart egyensúlyt a nehézségi erővel és a felhajtó erővel. Ilyenkor nincs súrlódási erő:

$$\frac{4}{3}\pi r^3 (\rho_o - \rho_l)\, g = qU/d \tag{44}$$

összefüggésből r behelyettesítésével kapjuk, hogy:

$$q = \frac{1}{U} d \frac{4}{3} \pi \left(\frac{9}{2} \eta v_0 \right)^{\frac{3}{2}} \left[(\rho_o - \rho_l) g \right]^{\frac{-1}{2}} \tag{45}$$

Mivel elég nehéz beállítani a térerősséget úgy, hogy a töltés ne mozogjon, ezért azt a módszert szokás alkalmazni, amely során a csepp vagy a gravitációs tér irányába mozog v_{fel} vagy a gravitációs tér irányába v_{le} állandó sebességgel.
A megfelelő

$$qU/d = \frac{4}{3} \pi r^3 (\rho_o - \rho_l) g + 6\pi \eta r v_{fel} \tag{46}$$

$$qU/d = -\frac{4}{3} \pi r^3 (\rho_o - \rho_l) g + 6\pi \eta r v_{le} \tag{47}$$

összefüggésekbe behelyettesítve r-t és q-t kifejezve kapjuk a töltésre:

$$q = \frac{1}{U} d \frac{4}{3} \pi \left(\frac{9}{2} \eta v_0 \right)^{\frac{3}{2}} \left[(\rho_o - \rho_l) g \right]^{\frac{-1}{2}} + \frac{6\pi \eta d}{U} v_{fel} \left(\frac{9}{2} \frac{\eta v_0}{(\rho_o - \rho_l) g} \right)^{\frac{1}{2}} \tag{48}$$

$$q = -\frac{1}{U} d \frac{4}{3} \pi \left(\frac{9}{2} \eta v_0 \right)^{\frac{3}{2}} \left[(\rho_o - \rho_l) g \right]^{\frac{-1}{2}} + \frac{6\pi \eta d}{U} v_{le} \left(\frac{9}{2} \frac{\eta v_0}{(\rho_o - \rho_l) g} \right)^{\frac{1}{2}} \tag{49}$$

10.6. Atommodellek

A Rutherford-modell a kísérletnél ismertetve van.

Thomson 1897-es, katódsugarakkal végzett kísérletéig az volt az elképzelés, hogy az anyag legkisebb, oszthatatlan egységét az atomok alkotják. A Crookes-csővel végzett vizsgálatok során kiderült, hogy a katódsugarakat, amelyek fényt keltenek a fluoreszcens rétegen, eltéríti az elektromos tér. Ez alapján Thomson arra jutott, hogy ezek a sugarak nem a fény egy formáját jelentik, hanem könnyű, negatív töltésű részecskékből állnak. Ezeket a részecskéket később elnevezték elektronoknak.
Thomson konkrét mérésének a lényege az volt, hogy az adott elektromos tér miatti ϕ eltérülést éppen kioltó mágneses teret állított be. Ha a két erő kioltja egymást, akkor $E = vB$ azaz a sebesség a kettő hányadosa. Ekkor az elektromos tér miatti eltérülést mérve meghatározható a töltés/tömeg arány:

$$\phi = \frac{y}{l} = \frac{eEl}{2mv^2} \tag{50}$$

átrendezve:

$$\frac{e}{m} = \frac{2\phi v^2}{El} = \frac{2E\phi}{B^2 l} \tag{51}$$

Így a pályasugár helyett a ϕ eltérülés mértékére van szükség. A mérés eredménye szerint az elektron töltés/tömeg aránya három nagyságrenddel kisebb a H^+ ionénál. Miután a töltésük megegyezik ezért ez a hidrogén atomnál ezerszer könnyebb részecskét jelent. Ezek alapján Thomson 1904-ben megalkotta a "plum-pudding" névvel illetett első atommodellt. Ebben az atom egy pozitív töltésű levesből áll, amelyben úsznak a negatív töltésű elektronok.
A Bohr-modell lényege, hogy az elektronok perdülete csak $L = mvr = pr = n\hbar$ lehet és az ilyen pályákon nincs gyorsulásból fakadó sugárzás. Minden pályának ebből adódó energiaszintek felelnek meg, és a fény elnyelése és kibocsátása ezen pályák közötti átmenetnek felel meg. Az első posztulátumot úgy is meg lehet fogalmazni, hogy a $2r\pi$ kerületű pályákra éppen egész számú hullám fér rá, azaz $n\lambda = 2r\pi$. Ez azt jelenti, hogy a pályákon kvázi állóhullámok jelennek meg. Az energiaszinteket úgy lehet kiszámolni, hogy kiindulunk a Coulomb-erő és a pályán tartó centripetális erő egyenlőségéből, azaz

$$k\frac{Ze^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r} = \frac{p^2}{mr} \tag{52}$$

innen:

$$p^2 r^2 = kZe^2 mr = n^2 \hbar^2 \tag{53}$$

tehát

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{kZe^2 m} \tag{54}$$

és

$$v_n = \frac{kZe^2}{n\hbar} \tag{55}$$

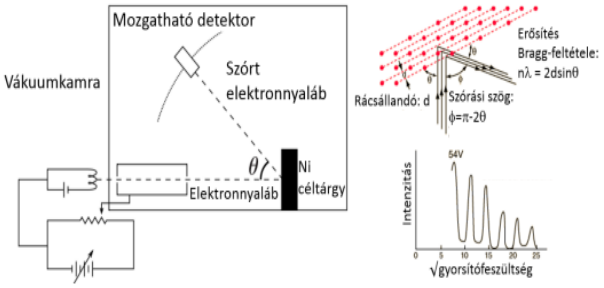
Mivel az adott elektron pályájához tartozó energia $-kZe^2/r$, a mozgási energia pedig $mv^2/2$ ezért az energiaszintek a kettő összegéből számolhatóak:

$$E_n = mv^2/2 - kZe^2/r = -\frac{E_0 Z^2}{n^2} \tag{56}$$

a végeredményt a sugár és a sebesség behelyettesítésével és az E_0 mint jelölés bevezetésével kapjuk.

10.7. Davisson-Germer kísérlet

A kísérletben vákuumcsövek elektródjának szekunder elektron-emisszióját mérték. Elektronnyalábot irányítottak egy nikkel céltárgyra, hogy az atomok elektromos terét, illetve a felület szerkezetét vizsgálják, csak a rugalmasan szórt elektronokat vizsgálva. Azt várták, hogy az elektronok számára még a legsimább kristályfelület is felbontható az atomos szerkezet miatt, és így erről lehet információt szerezni a szögeloszlásról. A kísérlet során oxigén került a vákuumcsőbe, amely oxidréteget képzett a nikkel felületen. Ezt úgy érték el, hogy



Kísérleti elrendezés

magas hőmérsékletre felfűtötték. Nem tudták viszont, hogy a nikkel megelőzőleg polikristályos szerkezete ezáltal egykristállyá változik, így az elektronnyaláb számára azonos kristályfelület fog látszódni. Az újra elvégzett kísérletben mér a kristálysíkok befolyásolták a szórást.
Laue és Bragg óta tudjuk, hogy ilyen esetekben az interferenciamintázatban $n\lambda = 2d\sin\theta$ hullámhosszaknál maximumok jelentkeznek, ahol θ a bejövő sugárzás kristálysíkkal bezárt szöge és $\Phi = \pi - 2\theta$ a szórás szöge. Ha ennek megfelelő mintázatot találnak az elektron-szórásban, akkor elektron-interferencia jött létre, az anyag tehát hullámként viselkedik.
A gyorsítófeszültség 54 V-os, a detektor pedig $\phi = 50°$ szögben állt, amikor az első intenzitás maximumot tapasztalták, ami $\theta = 65°$-nak felel meg. Így az ismert $d = 0,091nm$ rácstávolság mellett a hullámhossz értékére: $\lambda = 0,165nm$ adódott. Ez pedig jól egyezik a de Broglie hipotézissel:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \frac{h}{\sqrt{2meU}} \tag{57}$$

melynek értéke 54 V feszültségre 0,167 nm-t ad. Az erősítés feltétele $2dsin\,(\theta) = n\lambda$, a hullámhossz pedig az előbb meghatározott, így kiszámítható az erősítésnek megfelelő feszültség.

$$\sqrt{U} = \frac{hn}{2dsin\,(\theta)\sqrt{2me}} = K \cdot n \tag{58}$$

ahol K konstans. Ha ennél a fix θ szögnél vizsgáljuk a kilépő nyaláb intenzitását, akkor a gyorsítófeszültség gyökének függvényében maximumokat tapasztalunk, méghozzá éppen a fenti K egész számú többszöröseinél, ez látszik a fenti ábrán is.

10.8. Stern-Gerlach kísérlet

Az impulzusmomentumhoz klasszikusan mágneses momentum is tartozik! A mágneses momentum definíciója alapján a kör alakú áramhurokra $\vec{\mu} = I\vec{A}$ amiből az e töltés és a $2r\pi/v$ periódusidő miatt $I = ev/\,(2r\pi)$ és $A = r^2\pi$ alapján általánosítva a következő formulához jutunk:

$$\vec{\mu} = \frac{e\vec{L}}{2m} \tag{59}$$

Azaz ha a perdület iránya és nagysága is kvantált akkor a mágneses momentum is kvantált. A momentumhoz tartozó energia B mágneses térben $E = -\vec{\mu}\vec{B}$ tehát adott B tér mellett az energia a mágnese momentum abba

az irányba eső vetületét méri. Ebből az erő: $\vec{F} = \vec{\nabla}\left(\vec{\mu}\cdot\vec{B}\right)$ ami adott z irányú tér esetén $\vec{F} = \mu_z\vec{\nabla}B_z$. Ezek alapján, ha a perdület kvantált, akkor egy atomnyaláb egyes atomjaira diszkrét, különböző mértékű erő hat, így a nyaláb diszkrét komponensekre eshet szét. Ezt a feltevést igazolja a Stern-Gerlach kísérlet.
A kísérletben inhomogén nagyságú, de mindenhol z irányú B mágneses térbe vezettek atomnyalábot, amelynek momentumára így erő hatott. Ekkor a v sebességgel l távolságot megtevő atomok θ eltérülési szöge a következő módon kapható meg:

$$F = ma_\perp = \mu_z\nabla B \tag{60}$$

$$v = a_\perp t = \frac{\mu_z\nabla B}{m}\frac{l}{v} \tag{61}$$

$$\frac{v_\perp}{v} = \frac{\mu_z\nabla Bl}{mv^2} \tag{62}$$

Ez alapján azt mondhatjuk, hogy adott μ_z-hez adott eltérülés tartozik.
A kérdés az, hogy az abszolútértékben μ momentummal rendelkező ezüst atomnyaláb felhasad-e különböző, diszkrét μ_z értékű nyalábokra vagy a $\pm\mu$ között tetszőleges értéket vesz-e fel. Elsőre túl nagy volt a felhasadás eredményeképpen létrejövő két folt és átfedtek, de utána a nyalábot leszűkítő kollimációs rést kör alakúról vékony téglalap alakúra cserélték és így már megjelent a két különálló folt.

10.9. Einstein-de Haas-kísérlet

Feltették, hogy a ferromágneses anyag mágnesség az atomok mágneses momentuma okozza, amelyet viszont a perdületük, és így ha átfordítjuk egy elektromágnes polarizációját, akkor a perdület is megváltozik, amely megfigyelhető.
Ferromágnest függesztett fel vékony torziós szálra, amelyre tükröt erősítettek, hogy a forgását egy lézer segítségével megfigyelhessék. A ferromágnesre tekercset csévéltek és az ebben folyó árammal állították be a mágnes atomjainak mágneses momentumát és ezzel a perdületét. A mágneses momentum és az impulzusmomentum változásának a hányadosát vizsgálták. Átfordulás esetén:

$$\frac{\delta\mu_{teljes}}{\delta L_{teljes}} = \frac{2N\mu}{2NL} = \frac{\mu}{L} \tag{63}$$

ha N darab L perdületű és μ mágneses momentumú atom található a rúdban. Így a rúd mágneses momentumának és a perdületének megváltozásán keresztül tulajdonképpen az atomok mágneses momentumának és perdületének arányát vizsgálhatjuk.
Vezessük be a $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$ Bohr-magnetont, a $\mu = \mu_B L/\hbar$ összefüggés lesz érvényes. Ez után bevezethetjük a giromágneses faktort, amely az ettől való eltérést vizsgálja:

$$\mu = g\mu_B l \tag{64}$$

ahol l-re az igaz, hogy $L = \hbar l$. Ha feltesszük, hogy igaz az előbbi összefüggés, akkor a kísérlet eredménye valójában $\frac{ge}{2m}$, tehát a giromágneses faktort mérhetjük. Ennek értéke viszont eltér egytől.
A páros számra hasadás a Stern-Gerlach kísérletben illetve az Einstein-de Haas kísérlet eredménye is magyarázatra szorul. Ezeket az elektron belső tulajdonsága, egyfajta belső perdülete kell, hogy okozza, amit elneveztek sajátperdületnek vagy spinnek. A spin a pályaperdülethez hasonló, ugyanazok a tulajdonságai a kvantummechanikai operátoroknak is. Ugyanúgy a teljes értéke és egy vetülete egyszerre mérhető. Előbbi mindig $S = \hbar/2$ értéket vesz fel, az ennek megfelelő kvantumszám $s = 1/2$. A spin vetülete $S_z = \pm\hbar/2$ lehet azaz $s_z = \pm 1/2$. A spinhez tartozó mágneses momentumról kiderült, hogy $\mu = e\hbar/m$ nagyságú és a g giromágneses faktort bevezetve $\mu = g\mu_B s$ így $\mu_B = e\hbar/2m$ miatt $g = 2$ adódik.

10.10. Zeeman effektus

Ha egy atomot külső mágneses térbe helyezünk, az energiaszintjei eltolódnak, az eredetileg degenerált szintek felhasadhatnak. Ez a jelenség a Zeeman-effektus. A felhasadást az atomi mágneses momentumok $\vec{\mu}$ és a külső mágneses tér $\vec{B}$ kölcsönhatásaként fellépő energia okozza:

$$\Delta E = -\vec{\mu}\vec{B} \tag{65}$$

A skalárszorzat tehát függ a mágneses tér és a mágneses momentum relatív irányától. A mágneses magrezonancia és az elektron spin rezonancia egyaránt az atomi energiaszintek Zeeman-felhasadásának következménye.
Az optikai Zeeman-effektus során az atom egy gerjesztett állapotból alapállapotba relaxál és az energiaszintek közötti energia egy foton formájában sugárzódik ki. Ha ez a folyamat külső mágneses térben zajlik, akkor mind a kezdő, mind a végállapot energiaszintjei felhasadhatnak és ennek megfelelően többféle, kicsit különböző

energiájú foton figyelhető meg.
A jelenség Zeeman-Lorentz féle magyarázatában a mágneses térben mozgó elektronokra Lorentz-erő hat, ami kissé módosítja a pályájukat és ezáltal az energiájukat. Ez az energiaváltozás függ a pálya irányától. Ha merőleges a pálya a mágneses térre akkor a ΔE energia pozitív vagy negatív lesz, attól függően, hogy az elektron mozgása a pálya mentén az óramutató járásával egyező vagy ellenkező. Ha a mágneses tér a pálya síkjába esik, akkor pedig a Lorentz-erő átlaga egy körbejárás során zérus lesz és emiatt $\Delta E = 0$ lesz. Ez az érvelés minden esetben a spektrumvonalak hármas felhasadására vezet.

11. A kvantummechanika alapjai(Grajzel Dániel)

11.1. A kvantummechanika matematikai háttere

Dirac ismerte fel elsőként, hogy a fizikai mennyiségek matematikai úton történő reprezentálásához ne függvényeket használjunk, hanem bizonyos operátorokat, amelyet a fizikai állapotot reprezentáló függvények terén, a Hilbert téren hatnak.
Egy $\hat{O}$ operátor egy függvényhez egy másik függvényt rendel: $g(x) = \hat{O}f(x)$. Ilyen operátor például a koordináta szerinti deriválás. Azonban a fizikai mennyiségeket leíró operátorok nem lehetnek akármilyenek. Az anyagi részecskékhez rendet hullámok interferenciára való képessége (ld. Davisson-Germer kísérlet) vezetett el a szuperpozíció elv kimondásához azaz két állapot szuperpozíciója is lehetséges állapot. Ahhoz, hogy ez teljesüljön, a fizikai mennyiségeket reprezentáló operátoroknak lineárisnak kell lenniük. Egy $\hat{O}$ lineáris ha:

$$\hat{O}(\psi_1 + \psi_2) = \hat{O}\psi_1 + \hat{O}\psi_2$$

és

$$\hat{O}(k \cdot \psi_1) = k\left(\hat{O}\psi_1\right)$$

ahol k tetszőleges skalár ψ pedig hullámfüggvény vagy állapot függvény amely a szóbanforgó rendszer térbeli jellemzésére szolgál és valószínűségi amplitúdóként interpretáljuk.
Lineáris operátorok összegét a következő módon értelmezzük:

$$\left(\hat{O}_1 + \hat{O}_2\right)\psi = \hat{O}_1\psi + \hat{O}_2\psi$$

Lineáris operátorok szorzatán pedig azok egymás után való alkalmazását értjük:

$$\hat{O}_1\hat{O}_2\psi = \hat{O}_1\left(\hat{O}_2\psi\right)$$

Különösen fontosak az olyan függvények, amelyeket a lineáris operátorok azok skalárszorosába viszik át:

$$\hat{O}\psi = \lambda\psi$$

ahol λ egy konstans és az operátor sajátértékének hívjuk, míg a ψ-t az operátor sajátfüggvényének, magát az egyenletet sajátérték-egyenletnek. A Schrödinger-egyenlet is egy speciális operátor egyenlet, az energia fizikai mennyiséghez rendelt ún. Hamilton ($\hat{H}$) operátor egyenlete:

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

Egydimenziós mozgások esetén az x irányú impulzus fizikai mennyiséghez tartozó operátor: $\hat{p_x} \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$. Az x irányú elmozduláshoz tartozó pedig az x-szel való szorzás: $\hat{x} \to x\cdot$ Így következik, hogy a potenciál, amely csak a koordinátáktól függ szintén a potenciállal való szorzásként lesz reprezentálva:$\hat{V}(x) \to V(x)\cdot$ Ezek segítségével már fel tudjuk írni, az energiához, mint fizikai mennyiséghez rendelt operátort:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p_x^2}}{2m} + \hat{V}(x) \to -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

A fizikai mennyiségeket reprezentáló operátorok nem tetszőleges függvényekre hatnak, hanem olyanokra amelyek a következő tulajdonságokkal rendelkeznek:

- egyértékűek
- folytonosak
- normálhatók

Ezeket összefoglaló néven reguláris függvényeknek nevezzük, amelyek összessége Hilbert-teret alkot.
Vezessük be a skalárszorzat fogalmát a reguláris függvényekre!

$$\langle f_i | f_k \rangle = \int f_i^* f_k dv$$

Az integrálás a függvényváltozók teljes értelmezési tartományára vonatkozik, f_i^* pedig f_i komplex konjugáltja. A skalárszorzat tehát egy olyan művelet, amely két függvényhez egy (komplex) számot rendel.A skalárszorzat tulajdonságai:

$$\langle \psi_1 | \psi_2 + \psi_3 \rangle = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle + \langle \psi_1 | \psi_3 \rangle$$

$$\langle\psi|\, 0\rangle = 0$$
$$\langle\psi_1|\, \psi_2\rangle = \langle\psi_2|\, \psi_1\rangle^*$$
$$\langle k\psi_1|\, \psi_2\rangle = k^* \langle\psi_1|\, \psi_2\rangle$$

ahol k egy tetszőleges skalár. Két függvény ortogonális, ha $\langle\psi_1|\, \psi_2\rangle = 0$. Vezessük be az $\hat{O}^+$ adjungált operátor fogalmát:

$$\left\langle \psi_1 \middle|\, \hat{O}\psi_2 \right\rangle = \left\langle \hat{O}^+\psi_1 \middle|\, \psi_2 \right\rangle$$

. Azokat az operátorokat, melyekre teljesül, hogy $\hat{O} = \hat{O}^+$ önadjungált operátoroknak nevezzük. A fizikában különlegesen fontosak az olyan operátorok, amelyekre:

$$\left\langle \psi_1 \middle|\, \hat{O}\psi_2 \right\rangle = \left\langle \hat{O}\psi_1 \middle|\, \psi_2 \right\rangle$$

minden ψ_1, ψ_2 Hilbert-térbeli függvény esetén. Ezeket hívjuk Hermitikus operátoroknak. Az önadjungált operátorok egyben hermitikusak is, viszont visszafelé az állítás nem igaz.
A hermitikus operátorok alkalmasak fizikai mennyiségek reprezentálására, mert valós saját értékkel rendelkeznek. Bizonyítás:

$$\left\langle \phi \middle|\, \hat{O}\phi \right\rangle = \langle\phi|\, k\phi\rangle = k\,\langle\phi|\, \phi\rangle$$

másrészt:

$$\left\langle \phi \middle|\, \hat{O}\phi \right\rangle = \left\langle \hat{O}\phi \middle|\, \phi \right\rangle = \langle k\phi|\, \phi\rangle = k^*\,\langle\phi|\, \phi\rangle$$

amiből $k = k^*$ következik.
Különböző sajátértékekhez tartozó sajátfüggvények ortogonálisak egymásra. Ha

$$\hat{O}\phi_m = k_m\phi_m$$
$$\hat{O}\phi_n = k_n\phi_n$$

és $k_m \neq k_n$ valamint $k_n \neq 0$ akkor

$$\langle\phi_m|\, \phi_n\rangle = \frac{1}{k_n}\left\langle \phi_m \middle|\, \hat{O}\phi_n \right\rangle = \frac{1}{k_n}\,\langle\hat{o}\phi_m|\, \phi_n\rangle = \frac{k_m}{k_n}\,\langle\phi_m|\, \phi_n\rangle$$

amiből következik, hogy

$$(k_n - k_m)\,\langle\phi_m|\, \phi_n\rangle = 0$$

mivel az első tag nem nulla, így a második kell, hogy az legyen.
Hermitikus operátorok sajátfüggvényei teljes függvényrendszert alkotnak. Ez a tétel alapvető jelentőségű, ugyanis azt fejezi ki, hogy bármely reguláris függvény sorba fejthető. Azaz tetszőleges $\psi(x)$ állapotfüggvényt elő lehet állítani, mint a $\phi_n(x)$ sajátfüggvények szuperpozíciója:

$$\psi(x) = \sum_n c_n\phi_n(x)$$

valamint tudjuk, hogy: $\langle\phi_n|\, \phi_m\rangle = \delta_{nm}$. A kifejtési együtthatókat a következő módon tudjuk meghatározni:

$$c_n = \langle\phi_n|\, \psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(x')\,\psi(x')\,dx'$$

Ezt helyettesítsük vissza a kifejtésbe és cseréljük fel az integrálást és az összegzést:

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\sum_n \phi_n(x)\,\phi_n^*(x')\right] \psi(x')\,dx'$$

amelyből leolvasható a teljességet kifejező összefüggés:

$$\sum_n \phi_n(x)\,\phi_n^*(x') = \delta(x - x')$$

ahol a $\delta(x)$ a Dirac-delta függvényt jelöli. A $\psi(x)$ állapot normáltságából a következő adódik:

$$1 = \langle|\,\rangle = \sum_{n,m} c_n^* c_m\,\langle\phi_n|\, \phi_m\rangle = \sum_l |c_r|^2 = 1$$

. Ez az ún. normáltsági feltétel a kifejtési együtthatókra vonatkozóan.

11.2. Schrödinger- és Heisenberg-kép

Heisenberg mátrixokon alapuló mechanikája volt az első sikeres kísérlet az atomi spektrum kvantitatív leírására. Ugyanabban az évben Schrödinger is megalkotta hullámmechanikáját, amelyet könnyebben érthetőnek és elképzelhetőnek tartottak, mivel differenciál egyenleteket alkalmazott, amit a fizikusok amúgy is már jól ismertek. Később kiderült, hogy a két kép ekvivalens egymással.
A Heisenberg-képben az állapotvektorok $|\psi(t)\rangle$ nem változnak az időben és a megfigyelt A kielégíti a következő egyenletet:

$$\frac{dA(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, A(t)] + \left(\frac{\partial A}{\partial t}\right)$$

ahol H a Hamilton-operátor, a $[,]$ pedig két operátor kommutátorát jelöli. Ha vesszük a várhatóértékeket akkor könnyedén eljutunk az Ehrenfest-tételhez. Ez a megközelítés jobban hasonlít a klasszikus mechanikához, hiszen ha a kommutátor helyére Poisson-zárójeleket írunk a fenti Heisenberg-egyenlet egy klasszikus hamiltoni egyenletre redukálódik.
A különbség a két kép között az az időben változó rendszerek kezelésében mutatkozik meg. A Heisenbeg-féle megközelítést fent említettem.
Schrödingernél a $|\psi\rangle$ ket állapotvektor a Hilbert-tér eleme, egy vektortér ami tartalmazza a rendszer összes lehetséges állapotát. Egy kvantummechanikai operátor $|\psi\rangle$ ketből csinál egy $|\psi'\rangle$ ketet csinál.
Az időfejlesztő $U(t, t_0)$ operátor definíció szerint az az operátor ami hat a t_0 időpillanatban lévő ketre és előállít egy másik t pillanatban lévő ketet.

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle$$

Az időfejlesztő operátor unitér és $t = t_0$ esetben az identitás. A továbbiakban az egyszerűség kedvéért $t_0 = 0$ feltételezéssel élünk. Kiindulásként írjuk fel a Schrödinger-egyenletet:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle$$

írjuk be az egyenletbe a $|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle$ összefüggést:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t)|\psi(0)\rangle = HU(t)|\psi(0)\rangle$$

Mivel $|\psi(0)\rangle$ egy konstans ket vektor és a fenti egyenletnek igaznak kell lennie minden Hilbert-térbeli konstans ketre ezért az időfejlesztő operátornak ki kell elégítenie a következőt:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t) = HU(t)$$

Ha a Hamilton operátor nem függ az időtől akkor a megoldása ennek az egyenletnek:

$$U(t) = e^{\frac{-iHt}{\hbar}}$$

ezáltal

$$|\psi(t)\rangle = e^{\frac{-iHt}{\hbar}}|\psi(0)\rangle$$

Így a kiindulási állapot és a Hamilton-operátor ismeretében megtudjuk adni egy adott t időpillanatban a rendszert jellemző ket vektort.
Ha a kiindulási állapot sajátállapot és a H sajátértéke E akkor:

$$|\psi(t)\rangle = e^{\frac{-iEt}{\hbar}}|\psi(0)\rangle$$

Látszik, hogy a Hamilton operátor sajátállapotai stacionárius állapotok, az időfejlődéssel csak egy fázisfaktort szednek fel.

11.3. Határozatlansági reláció

Ha egy mikrorendszer ψ állapotfüggvénye az A operátornak nem sajátfüggvénye, akkor az A által leírt fizikai mennyiség értékére a mérések általában különböző értékeket szolgáltatnak. Minél távolabb vannak ezek az értékek az általuk szolgáltatott átlagértéktől, annál *határozatlanabb* ilyenkor a kérdéses fizikai mennyiség értéke, azaz annál nagyobb a mérés szórása. A szórásnégyzet definíció szerint:

$$(\Delta A)^2 =< (A- < A >)^2 >$$

ahol $< A >= \langle\psi|\ A\psi\rangle$ az A fizikai mennyiség várható értéke.
A négyzetes közepes eltérés sajátállapotban és csakis ebben, zérus. A bizonyításhoz induljunk ki a definícióból, emeljünk négyzetre és végezzük el a közepelést:

$$(\Delta A)^2 = \left\langle\psi\middle|\ (A- < A >)^2\,\psi\right\rangle = \langle\psi|\ \left(A^2 - 2A < A > + < A >^2\right)\psi\rangle =< A^2 > - < A >^2$$

Sajátállapotban ($A\psi = \lambda\psi$) a jobboldal valóban zérust ad $\left(\lambda\cdot\lambda - \lambda^2\right) = 0$, egyébként nem.
Amennyiben két fizikai mennyiség operátora egymással nem felcserélhető, akkor a szórásuk szorzatának legkisebb értéke a két operátor kommutátorából álló várható érték abszolút értékének a fele:

$$[A, B] = C \rightarrow \Delta A\Delta B \geq \frac{1}{2}\,|< C >|$$

A bizonyításához a Schwarz-féle egyenlőtlenségből indulunk ki:

$$\langle f|\ f\rangle\,\langle g|\ g\rangle \geq \langle f|\ g\rangle\,\langle g|\ f\rangle = |\langle f|\ g\rangle|^2$$

Definiáljuk a következő hermitikus operátorokat: $A' = A- < A >$ és $B' = B- < B >$, amelyek kommutátora $C = [A', B']$. Továbbá $f = A'\psi$ és $g = B'\psi$. Ezt helyettesítsük be a Schwarz-egyenlőtlenségbe:

$$(\Delta A\Delta B)^2 \geq |< A'B' >|^2 = \left|< \frac{A'B' + B'A'}{2} > + < \frac{A'B' - B'A'}{2} >\right|^2$$

$$\left|< \frac{A'B' + B'A'}{2} >\right|^2 + \left|< \frac{A'B' - B'A'}{2} >\right|^2 +$$

$$+ < \frac{A'B' + B'A'}{2} >^* \cdot < \frac{A'B' - B'A'}{2} > +$$

$$+ < \frac{A'B' + B'A'}{2} > \cdot < \frac{A'B' - B'A'}{2} >^*$$

az utolsó két tag kiejti egymást, mert:

$$\langle\psi|\ (A'B' \pm B'A')\,\psi\rangle^* = \pm\,\langle\psi|\ (A'B' \pm B'A')\,\psi\rangle$$

Így:

$$(\Delta A\Delta B)^2 \geq \left|< \frac{A'B' + B'A'}{2} >\right|^2 + \left|< \frac{A'B' - B'A'}{2} >\right|^2$$

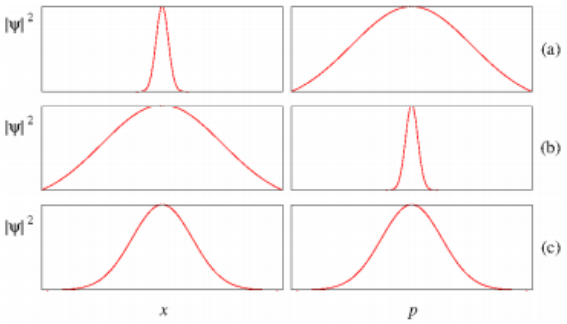
Az első tagot elhagyva még inkább teljesül az egyenlőtlenség:

$$(\Delta A\Delta B)^2 \geq \left|< \frac{A'B' - B'A'}{2} >\right|^2$$

Legyen $B = p_x$, $A = x$ így $C = -\frac{\hbar}{i}$, helyettesítsünk be és vonjunk gyököt, így megkapjuk a Heisenberg-féle határozatlansági relációt:

$$\Delta x\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

A relációnak mély fizikai tartalma van. Azt mondja ki, hogy a koordináta és az impulzus (vagy két olyan operátor amely egymással nem felcserélhető) fizikai mennyiség mérése egyszerre nem végezhető el tetszőleges pontossággal egy mindig azonos ψ állapotban lévő rendszer-sokaságon. Egész pontosan az egyenlőtlenség azt jelenti, hogy ilyen sokaságokon sokszor megmérve az x értéket majd sokszor megmérve a p_x értéket, a mérés során adódó hibák $(\Delta x, \Delta p_x)$ szorzata még végtelen pontos műszerek esetén sem lehet kisebb, mint a megadott alsó korlát. Ezt a klasszikus szemlélethez jobban illeszkedően úgy is mondhatjuk, hogy egy részecske koordinátája és impulzusa egyidejűleg nem vehet fel pontos értéket és így nem is mérhető tetszőleges pontossággal egyidejűleg.



A határozatlansági reláció szemléltetése

11.4. Szabad részecske hullámfüggvénye, szuperpozíció

Schrödinger 1926-ban a felállította a nemrelativsztikus részecskék tér- és időbeli mozgását elíró hullámegyenletet a fényre analóg módon. Tekintsünk egy időben és térben tovaterjedő síkhullámot, amely $\mathbf{k}$ hullámszámmal és ω körfrekvenciával rendelkezik:

$$\Psi(\mathbf{r},t) = Ae^{i(\mathbf{kr}-\omega t)} = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{pr}-Et)}$$

ahol kihasználtuk a $\mathbf{k} = \mathbf{p}\hbar$ és $\omega = E/\hbar$ összefüggéseket. A fényre fennáll a diszperziós reláció:

$$\omega(\mathbf{k}) = c \cdot k$$

Helyettesítsük ebbe a következő összefüggéseket:

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = -\omega^2\Psi$$

$$\Delta\Psi = -k^2\Psi$$

Így a jól ismert hullámfüggvényt kapjuk:

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = \Delta\Psi$$

Nemrelativsztikus részecskék alkotta anyagra az $E = \hbar\omega = \frac{p^2}{2m} + V$ összefüggés miatt:

$$\omega(\mathbf{k}) = \frac{\hbar}{2m}k^2 + \frac{1}{\hbar}V$$

ezért $\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -i\omega\Psi$ miatt a keresett hullámegyenlet a következőképpen írható:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + V\Psi$$

és ezt nevezzük időtől függő Schrödinger-egyenletnek vagy másképp állapotegyenletnek, amelyet Schrödinger tetszőleges $V(\mathbf{r},t)$ potenciál esetére mondta ki.
A $\Psi(\mathbf{r},t)$ hullámfüggvény a szóbanforgó mikrorészecske térbeli jellemzésére szolgál és valószínűségi amplitúdóként interpretáljuk. Ez azt jelenti, hogy annak a valószínűsége, hogy a rendszer az $\mathbf{r}$ körül dv intervallumban található: $|\Psi(\mathbf{r},t)|^2\,dv$. Mivel a rendszer a térben valahol biztosan megtalálható, a hullámfüggvény abszolút érték négyzetének a teljes térre vett integrálja egységnyi értéket kell, hogy felvegyen:

$$\int |\Psi(\mathbf{r},t)|^2\,dv = 1$$

Emiatt az mondjuk, hogy a hullámfüggvény normálható. Schrödinger 3. posztulátuma azt mondja ki, hogy ha ismerjük a hullámfüggvényt egy adott pillanatban akkor létezik egy egyenlet amellyel kiszámolható a hullámfüggvény egy későbbi időpontban, ez az előbb felírt Schrödinger-egyenlet. Ez a posztulátum azt fejezi ki, hogy a kvantummechanika egy determinisztikus elmélet vagyis ha adott a rendszer állapot egy időpillanatban, akkor ez meghatározza a rendszer állapotát későbbi időpillanatokban. A 4. posztulátum pedig a szuperpozíció elvét mondja ki, tehát ha $\Psi_1, \Psi_2, ..., \Psi_N$ hullámfüggvények valós fizikai állapotot írnak le akkor $\Psi_1 + \Psi_2 + ... + \Psi_N$ is egy lehetséges állapotot ír le.
Szabad részecske esetén a Schrödinger egyenlet a következőképp néz ki:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi$$

Ez az egyenlet teljesíti a következő feltételeket:

- A Schrödinger-egyenlet lineáris és homogén kell legyen
- időben maximum elsőrendű differenciálegyenlet lehet, mert csak egy kezdeti ismert mennyiség van, a hullámfüggvény a kezdő időpontban
- a kvantummechanika egyenletei formailag hasonlók kell legyenek a klasszikus mechanika egyenleteihez és a kvantummechanika határeseteként vissza kell kapjuk a klasszikus mechanika egyenleteit (korrespondencia-elv)

11.5. Anyaghullámok, valószínűségi értelmezés, a fizikai állapot leírása

de Broglie gondolt arra elsőként, hogy ha a fény, amely elektromágneses hullám, részecsketulajdonságokat mutat, akkor ennek lehet, hogy a fordítottja is igaz, azaz minden mv impulzusú részecske hullámtulajdonsággal is rendelkezik. A foton energiája $E = h\nu$, impulzusa $p = \frac{h\nu}{c}$ a fény hullámhossza kifejezhető a foton impulzusával a következőképp: $\lambda = \frac{h}{p}$. Ezt általánosítva kis sebességű anyagi részecskére kapjuk a hullámtulajdonságok és részecsketulajdonságok közti fontos de Broglie-féle összefüggést:

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

Ezt az elképzelést aztán kísérletileg is sikerült alátámasztani. A Davisson-Germer kísérlet során Ni-egykristályra irányítottak elektronnyalábot és a szórás utáni intenzitást mérték a szórási szög függvényében és 50 fokos eltérülésnél elhajlási maximumot találtak. A szomszédos rácssíkok távolsága d, a rácsállandó. A beeső elektronnyaláb a síkkal θ szöget bezáró irányból érkezik. A kérdés az, hogy milyen θ szögek esetén következik be θ szögű visszaverődés azaz tükröződés. Ez akkor történik, ha az egymás mögött síkok atomjairól visszaszórt hullámok erősítik egymást. A hátrébb lévő síkról érkező hullám többlet útja $2dsin\left(\theta\right)$ így a Bragg-feltétel:

$$2dsin\left(\theta\right) = n\lambda$$

Interferenciát leíró matematikai objektum, szuperponálódó hullámamplitúdók négyzetre emeléséből jöhet létre. A tapasztalati eredmények miatt, az elektron térbeli terjedésével társítva olyan mennyiséget kell definiálnunk, amely alkalmas az interferencia tárgyalására. Feynman bevezette a forrásból (S) a képernyő megfigyelési pontjába (O) érkezés valószínűségi amplitúdóját, $\Psi\left(S- \rightarrow O\right)$ és a kvantummechanika alapelvét a következőképpen mondta ki: az elektron megtalálási valószínűsége amplitúdójának az $S \rightarrow O$ helyváltoztatást leíró értékét az összes lehetséges pályán történő terjedéshez rendelhető valószínűségi amplitúdók összege adja meg:

$$\Psi\left(S \rightarrow O\right) = \sum_{osszesut} \Psi_{k.ut}\left(S \rightarrow O\right)$$

Második alapelvként az optikai Huygens-elvvel analóg tulajdonságot tételezünk fel:

$$\Psi\left(S \rightarrow R \rightarrow O\right) = \Psi\left(S \rightarrow R\right) \cdot \Psi\left(R \rightarrow O\right)$$

azaz az R pont az O-ba érkezés szempontjából másodlagos forrásnak tekinthető.
Harmadik alapelvként pedig kimondható, hogy az $S \rightarrow O$ átmenet $P\left(S \rightarrow O\right)$ valószínűségét a

$$P\left(S \rightarrow O\right) = \left|\Psi\left(S \rightarrow O\right)\right|^2$$

kifejezés adja meg.

11.6. Fizikai mennyiségek operátorai, sajátfüggvények, sajátértékek

ld. 11.1

11.7. Schrödinger-egyenlet és szeparálása

Az időfüggő Schrödinger-egyenletet már korábban kitárgyaltuk, most tekintsük azt az esetet amikor az erőtérnek nincs időfüggése. Ilyenkor a Ψ hullámfüggvényt megkísérelhetjük változóiban szeparált alakban felírni:

$$\Psi\left(\mathbf{r}, t\right) = \psi\left(\mathbf{r}\right) \cdot \Theta\left(t\right)$$

. Ezt a Schrödinger-egyenletbe helyettesítve olyan egyenletet kapunk, átrendezéssel, amely egyik oldalán csak t-től, másik oldalán csak $\mathbf{r}$-től függő mennyiségeket tartalmaz:

$$i\hbar\frac{1}{\Theta}\frac{d\Theta}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\Delta\psi + V\left(\mathbf{r}\right) = E$$

Ez csak úgy lehetséges, ha a bal- és jobboldal egy idő- és térváltozótól független állandó, amelyet E-vel jelöltünk. Így tehát két egyenletet kaptunk az állapotfüggvény idő- és térbeli viselkedésének meghatározására.

$$\frac{d\Theta}{dt} = -i\hbar^{-1}E\Theta$$

amely megoldása azonnal felírható:

$$\Theta = exp\left[-iEt/\hbar\right] = exp\left[-i\omega t\right]$$

Míg a másik egyenlet a hullámfüggvény térszerű részét határozza meg:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\left(\mathbf{r}\right)\psi = E\psi$$

. Ez utóbbi az időtől független vagy más néven stacionárius Schrödinger-egyenlet.
A kvantummechanikának leggyakoribb alkalmazási területét éppen a kvantummechanikai részecskerendszerek lehetséges energiaértékeinek és az ezekhez tartozó hullámfüggvényeknek a meghatározása képezi. Mindez a Schrödinger-egyenlet megoldását jelenti, amely csupán a legegyszerűbb valóságos kvantumfizikai rendszerre, az egyetlen elektront Coulomb kölcsönhatással magához láncoló atommag esetére ismert analitikus formában.
Centrális a potenciál, ha $V\left(\mathbf{r}\right) = V\left(r\right)$. Ekkor az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet

$$\left[\frac{p_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} + V\left(r\right)\right]\psi\left(\mathbf{r}\right) = E\psi\left(\mathbf{r}\right)$$

megoldásait kereshetjük a következő, szeparált alakban:

$$\psi\left(\mathbf{r}\right) = P\left(r\right)Y_l^m\left(\theta,\phi\right)$$

. Behelyettesítés után, a $P\left(r\right)$ függvényre a következő differenciál egyenletet kapjuk:

$$\left[\frac{p_r^2}{2m} + \frac{\hbar^2 l\left(l+1\right)}{2mr^2} + V\left(r\right)\right]P\left(r\right) = EP\left(r\right)$$

Használjuk fel a

$$p_r^2 = -\hbar^2\left(\frac{1}{r}\frac{\partial^2 r}{\partial r^2}\right)$$

összefüggést és vezessük be az $R\left(r\right) = rP\left(r\right)$ radiális hullámfüggvényt. Így megkapjuk a radiális Schrödinger egyenletet:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l\left(l+1\right)}{2mr^2} + V\left(r\right)\right]R\left(r\right) = ER\left(r\right)$$

Az $Y_l^m\left(\theta,\phi\right) = P_l^m\left(\Theta\right)\cdot e^{im\phi}$ függvényeket gömbfüggvényeknek hívjuk. A $P_l^m\left(\Theta\right)$ függvény a $sin\left(\Theta\right)$ és $cos\left(\Theta\right)$ polinomja. A gömbfüggvények normáltak:

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\left(Y_l^m\left(\Theta,\phi\right)\right)^*\cdot Y_l^m\left(\Theta,\phi\right)sin\left(\Theta\right)d\Theta d\phi = 1$$

11.8. Impulzusmomentum operátor, sajátértékei, sajátfüggvényei

A tömegpont impulzusmomentumának definíciója a klasszikus mechanikában:

$$\mathbf{L} = \mathbf{r}\times\mathbf{p}$$

vagy

$$L_i = \sum_{j,k}\varepsilon_{ijk}x_j p_k = \varepsilon_{ijk}x_j p_k$$

felhasználva az Einstein-konvenciót. űa kvantummechanikában ezt az utóbbi definíciót használjuk, annyi különbséggel, hogy a megfelelő operátorokat helyettesítjük be. Vizsgáljuk meg az egyes komponensekre a felcserélési relációt:

$$\left[L_i, L_j\right] = \varepsilon_{ikl}\varepsilon_{jnm}\left[x_k p_l, x_n p_m\right]$$

Használjuk fel a következő operátor azonosságot:

$$\left[AB, C\right] = A\left[B, C\right] + \left[A, C\right]B$$

$$\left[x_k p_l, x_n p_m\right] = x_k\left[p_l, x_n p_m\right] + \left[x_k, x_n p_m\right]p_l = x_k\left[p_l, x_n\right]p_m + x_n\left[x_k, p_m\right]p_t$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left(\delta_{nl}x_k p_m - \delta_{mk}x_n p_l\right)$$

Ezt kihasználva meg tudjuk adni az imp. operátor komponenseinek kommutátorát:

$$[L_i, L_j] = \hbar\varepsilon_{ikl}\varepsilon_{jnm}\left(\delta_{nl}x_k p_m - \delta_{mk}x_n p_l\right)$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left(\varepsilon_{ikn}\varepsilon_{jnm}x_k p_m - \varepsilon_{iml}\varepsilon_{jnm}x_n p_l\right)$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left(\varepsilon_{ilm}\varepsilon_{jnm}x_n p_l - \varepsilon_{ikn}\varepsilon_{jmn}x_n p_m\right)$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left(\left[\delta_{ij}\delta_{nl} - \delta_{in}\delta_{jl}\right]x_n p_l - \left[\delta_{ij}\delta_{km} - \delta_{im}\delta_{jk}\right]x_k p_m\right)$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left(\delta_{ij}x_n p_n - x_i p_j - \delta_{ij}x_k p_k + x_j p_i\right)$$

$$= i\hbar\left(x_i p_j - x_j p_i\right)$$

Összefoglalva:

$$[L_i, L_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}L_k$$

mert

$$\varepsilon_{ijk}L_k = \varepsilon_{ijk}\varepsilon_{klm}x_l p_m = x_i p_j - x_j p_i$$

Az L^2 operátort a következő kifejezés definiálja:

$$L^2 = L_i L_i = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

Az L^2 operátor kommutál L_i-vel.

$$\left[L^2, L_i\right] = \left[L_k L_k, L_i\right] = L_k\left[L_k, L_i\right] + \left[L_k, L_i\right]L_k$$

$$= i\hbar\varepsilon_{kij}\left(L_k L_j + L_j L_k\right) = i\hbar\left(\varepsilon_{kij} + \varepsilon_{jik}\right)L_k L_j = 0$$

Aminek a következménye, hogy L^2 és bármely L_i operátornak létezik közös sajátfüggvényrendszere.
A perdület operátor z-komponense:

$$L_z = xp_y - yp_x = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

Térjünk át gömbi koordináta-rendszerre:

$$x = r sin\left(\theta\right) cos\left(\phi\right)$$

$$y = r sin\left(\theta\right) sin\left(\phi\right)$$

$$z = r cos\left(\theta\right)$$

Így $L_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}$ Mert:

$$\frac{\partial}{\partial\phi} = \frac{\partial x}{\partial\phi}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial\phi}\frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial\phi}\frac{\partial}{\partial z} = -y\frac{\partial}{\partial x} + x\frac{\partial}{\partial y}$$

Az L_z operátornak hermitikusnak kell lennie:

$$\langle\psi|\, L_z\phi\rangle = \frac{\hbar}{i}\int_0^{2\pi}\psi\left(\varphi\right)^*\frac{\partial\phi\left(\varphi\right)}{\partial\varphi}d\varphi$$

$$\frac{\hbar}{i}\left[\psi\left(\varphi\right)^*\phi\left(\varphi\right)\right]_0^{2\pi} + \int_0^{2\pi}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi\left(\varphi\right)}{\partial\varphi}\right)^*\phi\left(\varphi\right)d\varphi$$

$$\langle L_z\psi|\,\phi\rangle + \frac{\hbar}{i}\left[\psi\left(2\pi\right)^*\phi\left(2\pi\right) - \psi\left(0\right)^*\phi\left(0\right)\right]$$

emiatt a következő feltételnek kell teljesülnie a hermetikussághoz bármely ψ és ϕ függvényre:

$$\frac{\psi\left(2\pi\right)}{\psi\left(0\right)}\left(\frac{\phi\left(2\pi\right)}{\phi\left(0\right)}\right)^* = 1$$

így tetszőleges $\alpha \in \mathbf{R}$ számhoz definiálható egy $[0, 2\pi] = \left\{\psi : \psi\left(2\pi\right) = e^{i\alpha}\psi\left(0\right)\right\}$ függvényhalmaz, melyek mindegyikén L_z hermitikus. A hullámfüggvény egyértékűségére vonatkozó axióma miatt a fizikai állapotokat a

$[0, 2\pi] = \{\psi : \psi(2\pi) = \psi(0)\}$ halmazon keressük.
L_z sajátérték-egyenlete:

$$L_z\psi(\varphi) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi(\varphi)}{\partial\varphi} = K\psi(\varphi)$$

mely normált megoldása:

$$\psi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\frac{i}{\hbar}K\varphi}$$

Az egyértékűség következtében:

$$\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi) \to \frac{K}{\hbar} = m \to K = \hbar m$$

ahol $m = 0, \pm 1, \pm 2...$
Azt kaptuk tehát, hogy a perdület z irányú komponense kvantált: $\hbar$ egész számszorosát veheti föl. Ugyanez igaz az x és y komponensekre, csak mások a sajátfüggvények.

11.9. Spin, Pauli-egyenlet

Az 1920-as években egyre inkább uralkodóvá vált az a felfogás, hogy az elektronnak saját impulzusmomentummal, *spinnel*kell rendelkeznie. Ezt az álláspontot sokféle kísérlet támasztotta alá, pl. a Zeeman-effektus, a Stern-Gerlach kísérlet, az Einstein-de Haas kísérlet stb.
A közönséges Zeeman-effektus során a különféle, pl. hidrogénszínkép-vonalak homogén mágneses tár hatására kiszélesednek és felhasadnak. Ez az atomi energianívók felhasadásával magyarázható. Az anomális Zeeman-effektus az, amikor külső mágneses tér hiányában is észlelhető a nívófelhasadás. Ez alapján kimondható, hogy az elektron egy további szabadság fokkal rendelkezik, ami a saját impulzusmomentum vagy spin és ehhez saját mágneses momentum is társul. Ennek az atom belső mágneses terével való kölcsönhatása eredményezi a megfigyelt dublett szerkezetet.
Stern és Gerlach keskeny, ezüstatomokból álló nyalábot bocsátott át inhomogén mágneses téren. A tér az ezüst-atom nyalábot két részre osztotta. A Ag-atom zárt héjjal s azon kívül egyetlen elektronnal rendelkezik. Az ezüst atom teljes pálya-impulzusmomentuma zérus, így az ebből eredő mágneses nyomaték is. Egyedül a saját impulzusmomentum/spin hordozhat mágneses nyomatékot, amit meg lehet mérni inhomogén mágneses tér alkalmazásával. A nyalábra ható erő meghatározható az eltérülésből, így mérhető lesz a mágneses nyomaték, melyre $\pm\mu_B$ érték adódott. Ez az elektron saját impulzusmomentumának z komponenséhez feles kvantumszámot rendel.
Vegyünk egy z-irányú homogén mágneses teret: $\mathbf{B} = (0, 0, B)$. Az ezzel való kölcsönhatás révén keletkező

$$V_{magn} = -\left(\mathbf{M}^L + \mathbf{M}^S, \mathbf{B}\right) = \mu_B B\frac{1}{\hbar}(L_z + 2S_z) = \mu_B B(m_l + 2m_s)$$

potenciális energiaoperátor $2(2l+1)$-szeres nívófelhasadást eredményez. Ez az eredmény implicit tartalmazza a spin z-komponensének sajátértékegyenletét. Az $\mathbf{M}^L = \mu_B\frac{1}{\hbar}\mathbf{L}$ és az $\mathbf{M}^S = -2\mu_B\frac{1}{\hbar}\mathbf{S}$ összefüggéseket felhasználva:

$$S_z\chi_s^{m_s} = \hbar m_s\chi_s^{m_s}$$

ahol $m_s = \pm\frac{1}{2}$ A spinoperátor a pálya-impulzusmomentummal azonos felcserélési szabályoknak tesz eleget:

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z$$

$$\left[S_z, S^2\right] = 0$$

$$[\mathbf{S}, \mathbf{r}] = 0$$

$$[\mathbf{S}, \mathbf{p}] = 0$$

$$[\mathbf{S}, \mathbf{L}] = 0$$

Ez elegendő a spinoperátor és spinsajátfüggvény megalkotásához: $\mathbf{S}=\frac{\hbar}{2}\sigma$ ahol σ komponensei az ún. *Pauli-mátrixok*:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

A sajátfüggvények pedig:

$$\alpha = \chi_{1/2}^{1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\beta = \chi_{1/2}^{-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

A Pauli-egyenletet konzekvensen a Dirac-egyenletből lehet levezetni, azonban megindokolható fenomenologikusan is.
Kis sebességgel mozgó elektron esetén a spin csak mágneses kölcsönhatások során jelentkezik. A spin-mágneses tér kölcsönhatás energiája:

$$E = -\vec{\mu_e} \cdot \vec{B} = -g \cdot \mu_0 \vec{S}\vec{B} = -\mu_0 \vec{\sigma}\vec{B}$$

ahol figyelembe vettük, hogy $\vec{\sigma} = 2\vec{S}$ és $g \approx 2$. Mágneses térben tehát a Hamilton függvény a következő alakban írható fel:

$$H = \frac{1}{2m_e}\left(\vec{p} - e\vec{A}\right)^2 + e\phi - \mu_0 \vec{\sigma}\vec{B}$$

ahol $\vec{A}$ a vektorpotenciál és ϕ a skalárpotenciál. Az időfüggő Schrödinger-egyenletet használjuk. Az elektron állapotát leíró hullámfüggvény legyen a következő:

$$\psi\left(\vec{r}, t\right) = \begin{pmatrix} \psi_+\left(\vec{r}, t\right) \\ \psi_-\left(\vec{r}, t\right) \end{pmatrix}$$

ahol $\psi_+\left(\vec{r}\right) = \langle \vec{r}| +\psi\rangle$ és $\psi_-\left(\vec{r}\right) = \langle \vec{r}| -\psi\rangle$ Az $\langle \vec{r}|$ vektorok a $\vec{r}$ koordináta operátor sajátvektorait jelentik.

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{B} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} B_x + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} B_y + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} B_z$$

A Schrödinger-egyenlet alakja ezáltal:

$$i\hbar \frac{d}{dt}\begin{pmatrix} \psi_+\left(\vec{r}, t\right) \\ \psi_-\left(\vec{r}, t\right) \end{pmatrix} = \left[\frac{1}{2m_e}\left(\hat{\mathbf{p}} - e\hat{\mathbf{A}}\right)^2 + e\hat{\phi}\right]\begin{pmatrix} \psi_+\left(\vec{r}, t\right) \\ \psi_-\left(\vec{r}, t\right) \end{pmatrix} +$$

$$+\mu_0 \begin{pmatrix} B_z & B_x - iB_y \\ B_x + iB_y & -B_z \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_+\left(\vec{r}, t\right) \\ \psi_-\left(\vec{r}, t\right) \end{pmatrix}$$

Ez az egyenlet tehát a Schrödinger-egyenlet a spinnel rendelkező elektronra azaz a Pauli-egyenlet, amely tulajdonképpen két egymással kapcsolt differenciálegyenlet. Amikor a kvantummechanika keretében egy elektron nemrelativsztikus mozgását vizsgáljuk a mágneses terek jelenlétében első közelítésként a Pauli-egyenletet kell megoldani.
Mágneses tér hiányában vagy $B_x = B_y = 0$ esetben a Pauli egyenletet leíró két kapcsolt differenciálegyenlet felbomlik két egymástól független egyenletre.
A Pauli-egyenlet nem tartalmazza a spin-pálya kölcsönhatási tagot. Mivel az elektron pályamenti mozgásából és a spinjéből kifolyólag mágneses nyomaték származik, e két nyomaték pedig kölcsönhat és ez eredményezi a spin-pálya kölcsönhatását, melynek erőssége az $\vec{S} \cdot \vec{L}$ szorzatta arányos és egy plusz tagot ad a Hamilton-függvényhez.

11.10. Korrespondencia-elv

A klasszikus fizika és a kvantumfizika közötti kapcsolatot Niels Bohr fogalmazta meg az úgynevezett korrespondencia-elvben, mely szerint mindkét elmélet bizonyos körülmények között azonos eredményre vezet.
Nagy kvantumszámok esetén a kvantumfizika következtetéseinek és eredményeinek át kell menniük a klasszikus fizika megfelelő következtetéseibe és eredményeibe. Más szavakkal: a klasszikus elmélet és az azt továbbfejlesztő elmélet között törvényszerű kapcsolatnak kell fennállnia.
Ha egy rendszer energiája nagy az egymás után következő energianívók különbségéhez képest, akkor a kvantumelmélet eredményei alig különböznek a klasszikus elmélet folytonos eredményeitől vagyis megszűnik a kvantumosság. Az elv beteljesülése belátható a H-atom sugárzása esetében.
Hasonló a helyzet a relativitáselmélet esetében is. Ha a sebesség jóval kisebb, mint a fénysebesség, akkor a spec. rel. mechanikai összefüggései átmennek a newtoni mechanika összefüggéseibe.

11.11. Ehrenfest-tétel

Ha egy rendszer nem stacionárius, akkor mennyiségeinek középértéke időben változik:

$$\frac{\partial < f >}{\partial t} = \left\langle \frac{\partial \psi}{\partial t} \middle| \hat{\mathbf{F}} \left| \psi \right\rangle + \left\langle \psi \right| \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial t} \left| \psi \right\rangle + \left\langle \psi \right| \hat{\mathbf{F}} \middle| \frac{\partial \psi}{\partial t} \right\rangle$$

Helyettesítsük be az időfüggő Schrödinger egyenletet a harmadik tagba és komplexkonjugáltját az elsőbe:

$$\frac{\partial < f >}{\partial t} = \left\langle \frac{i}{\hbar} \hat{\mathbf{H}} \psi \middle| \hat{\mathbf{F}} \left| \psi \right\rangle + \left\langle \psi \right| \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial t} \left| \psi \right\rangle + \left\langle \psi \right| \hat{\mathbf{F}} \middle| -\frac{i}{\hbar} \hat{\mathbf{H}} \psi \right\rangle$$

$$= \left\langle \psi \right| \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \left[\hat{\mathbf{H}}, \hat{\mathbf{F}} \right] \left| \psi \right\rangle$$

Vizsgáljuk az x irányú elmozdulást. Az operátor az időtől nem függ, ezért az első tag 0, a kommutátor pedig a következőképp számítható:

$$\frac{\partial < x >}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \left[\hat{\mathbf{H}}, \hat{\mathbf{x}} \right] \psi = \frac{i}{\hbar} \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \cdot x \cdot \psi - x \cdot \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi \right)$$

az első tagnál kétszer kell elvégezni a szorzat deriválását, hiszen ott előbb az x hat és csak utána a deriválás:

$$= \frac{-i\hbar}{2m} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial x} + x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right) = \frac{-i\hbar}{2m} 2 \frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{\hat{\mathbf{p_x}}}{m} \psi$$

Az eredmény a klasszikus $\frac{\partial x}{\partial t} = v = \frac{p}{m}$ esethez hasonló.
Ha az impulzus időbeli változását vizsgáljuk, akkor a Hamilton-operátorból elhagyhatjuk a kinetikus tagot, mivel az kommutál az impulzusoperátorral. Az erőtér legyen konzervatív, így a potenciális energia operátora egyszerű függvényszorzást csinál:

$$\frac{\partial < p_x >}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \left[\hat{\mathbf{V}}, \hat{\mathbf{p_x}} \right] \psi = \frac{i}{\hbar} \left(V \cdot (-i\hbar) \frac{\partial \psi}{\partial x} - (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} \cdot V \cdot \psi \right) = V \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial V}{\partial x} \psi - V \frac{\partial \psi}{\partial x} = -\frac{\partial V}{\partial x} \psi$$

A potenciál negatív gradiense az erő, tehát klasszikus esetben az $F = m \cdot a$ képletet kapjuk. A fent tett elhanyagolás $\left(\frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial t} = 0 \right)$ nélkül az egész nem működik. A kvantummechanika csak akkor adja vissza a klasszikus mechanika egyenleteit, ha a változások lassúak.

12. Atom- és molekulaszerkezet(Novák Martin)

12.1. Kvantummechanikai közelítő módszerek

Gyakran találkozunk olyan problémákkal, hogy a Schrödinger-egyenlet nem oldható meg egzaktul. Ekkor közelítő eljárásokat kell alkalmazni. A legtöbb atomfizikai és magfizikai problémánál a feladat az energia-sajátértékek és sajátfüggvények közelítő meghatározása. Sokszor a vizsgált fizikai rendszer Hamilton-operátora csak egy kicsit tér el az egzakt problémáétól. Tehát:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}'$$

Ahol $\hat{H}_0$ az egzaktul megoldható rendszer Hamilton-operátora, a $\hat{H}'$ az úgynevezett perturbáló Hamilton-operátor, λ pedig egy kicsi szám.

12.1.1. Időfüggetlen perturbációszámítás nem degenerált esetben

Tegyük fel, hogy,

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots$$

valamint

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + \dots$$

Írjuk ezt vissza a Schrödinger-egyenletbe:

$$\left(\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}'\right) \left[\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle + \lambda \left|\psi_n^{(1)}\right\rangle + \lambda^2 \left|\psi_n^{(2)}\right\rangle + \dots\right] =$$
$$= \left(E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots\right) \left[\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle + \lambda \left|\psi_n^{(1)}\right\rangle + \lambda^2 \left|\psi_n^{(2)}\right\rangle + \dots\right]$$

Bontsuk fel a zárójeleket és hagyjuk el a λ^2-es tagokat:

$$\hat{H}_0 \left|\psi_n^{(0)}\right\rangle + \lambda \hat{H}_0 \left|\psi_n^{(1)}\right\rangle + \lambda \hat{H}' \left|\psi_n^{(0)}\right\rangle = E_n^{(0)} \left|\psi_n^{(0)}\right\rangle + \lambda E_n^{(0)} \left|\psi_n^{(1)}\right\rangle + \lambda E_n^{(1)} \left|\psi_n^{(0)}\right\rangle$$

Vegyük észre, hogy a jobb és a bal oldal első tagja pont kiejtik egymást. Szorozzunk balról $\left\langle\psi_n^{(0)}\right|$-nel, egyszerűsítsünk λ-val.

$$\left\langle\psi_n^{(0)}\right| \hat{H}_0 \left|\psi_n^{(1)}\right\rangle + \left\langle\psi_n^{(0)}\right| \hat{H}' \left|\psi_n^{(0)}\right\rangle = E_n^{(0)} \left\langle\psi_n^{(0)} \middle| \psi_n^{(1)}\right\rangle + E_n^{(1)} \left\langle\psi_n^{(0)} \middle| \psi_n^{(0)}\right\rangle$$

A Hamilton-operátor hermitikussága miatt a bal oldal első tagja éppen $E_n^{(0)} \left\langle\psi_n^{(0)} \middle| \psi_n^{(1)}\right\rangle$, így az eredményünk az első energiakorrekcióra:

$$E_n^{(1)} = \left\langle\psi_n^{(0)}\right| \hat{H}' \left|\psi_n^{(0)}\right\rangle$$

Azaz az első energiakorrekció az nem más mint a perturbáló Hamilton-operátor alapállapotban vett várható értéke. Ez csak nem degenerált esetben érvényes. Határozzuk meg a sajátfüggvényeket. Fejtsük ki a $\left|\psi_n^{(1)}\right\rangle$-et az alapállapoti hullámfüggvények bázisán:

$$\left|\psi_n^{(1)}\right\rangle = \sum_m c_{nm} \left|\psi_m^{(0)}\right\rangle$$

Rendezzük az előző, csak λ rendet tartalmazó egyenletet úgy, hogy egyik oldalon csak az alapállapoti hullámfüggvény, a másikon pedig csak a perturbáció miatt megjelenő hullámfüggvény van:

$$\left(\hat{H}_0 - E_n^{(0)}\right) \left|\psi_n^{(1)}\right\rangle = -\left(\hat{H}' - E_n^{(1)}\right) \left|\psi_n^{(0)}\right\rangle$$

Helyettesítsük be a kifejtett hullámfüggvényt:

$$\left(\hat{H}_0 - E_n^{(0)}\right) \sum_m c_{nm} \left|\psi_m^{(0)}\right\rangle = -\left(\hat{H}' - E_n^{(1)}\right) \left|\psi_n^{(0)}\right\rangle$$

Szorozzunk be balról $\left\langle\psi_l^{(0)}\right|$-al:

$$\sum_m c_{nm} \left[\left\langle\psi_l^{(0)}\right| \hat{H}_0 \left|\psi_m^{(0)}\right\rangle - E_n^{(0)} \left\langle\psi_l^{(0)} \middle| \psi_m^{(0)}\right\rangle\right] = -\left\langle\psi_l^{(0)}\right| \hat{H}' \left|\psi_n^{(0)}\right\rangle + E_n^{(1)} \left\langle\psi_l^{(0)} \middle| \psi_n^{(0)}\right\rangle$$

A bal oldal első tagját írjuk át $E_m^{(0)} \left\langle \psi_l^{(0)} \middle| \psi_m^{(0)} \right\rangle$-re, így a következő marad:

$$\sum_m c_{nm} \left(E_m^{(0)} - E_n^{(0)} \right) \left\langle \psi_l^{(0)} \middle| \psi_m^{(0)} \right\rangle = - \left\langle \psi_l^{(0)} \middle| \hat{H}' \middle| \psi_n^{(0)} \right\rangle + E_n^{(1)} \delta_{ln}$$

Elvégezve az összegzéseket:

$$c_{nl} \left(E_l^{(0)} - E_n^{(0)} \right) = - \left\langle \psi_l^{(0)} \middle| \hat{H}' \middle| \psi_n^{(0)} \right\rangle + E_n^{(1)} \delta_{ln}$$

Két eset lehetséges $n = l$, ekkor

$$E_n^{(1)} = \left\langle \psi_l^{(0)} \middle| \hat{H}' \middle| \psi_n^{(0)} \right\rangle$$

ami éppen a nem degenerált esetben kapott korrekció. Ha $n \neq l$ akkor

$$c_{nl} \left(E_l^{(0)} - E_n^{(0)} \right) = - \left\langle \psi_l^{(0)} \middle| \hat{H}' \middle| \psi_n^{(0)} \right\rangle \Rightarrow c_{nl} = \frac{\left\langle \psi_l^{(0)} \middle| \hat{H}' \middle| \psi_n^{(0)} \right\rangle}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}}$$

Amelyen látszik, hogy csak nem degenerált esetben működik, azaz, ha $n \neq l$ hiszen nullával kellene osztani, ha másképp lenne. Így a hullámfüggvény első korrekciója:

$$\psi_n^{(1)} = \sum_{l \neq n} \frac{\left\langle \psi_l^{(0)} \middle| \hat{H}' \middle| \psi_n^{(0)} \right\rangle}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}} \psi_l^{(0)}$$

Ha másodrendű tagokig vizsgáljuk, akkor ugyan ez az eljárás. A másodrendű energiakorrekció:

$$E_n^{(2)} = \sum_{l \neq n} \frac{\left| \left\langle \psi_l^{(0)} \middle| \hat{H}' \middle| \psi_n^{(0)} \right\rangle \right|^2}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}}$$

Ezt már jóval körülményesebb kiszámolni, mivel ismerni kell az összes állapotot, és a szummákat is el kell tudni végezni. De általában az első rend elég pontos eredménnyel szolgál.

12.1.2. Időfüggetlen perturbációszámítás degenerált esetben

Ilyenkor

$$c_{nl} \left(E_n^{(0)} - E_l^{(0)} \right) = \left\langle \psi_l^{(0)} \middle| \hat{H}' \middle| \psi_n^{(0)} \right\rangle$$

és $n \neq l$ de $\exists E_n^{(0)} - E_l^{(0)} = 0$. Ilyenkor a $\left| \psi_{n,l}^{(0)} \right\rangle$ sajátfüggvények nem egyértelműek, tetszőleges lineárkombinációjuk is sajátfüggvény lesz. Végezzünk el egy bázistranszformációt, hogy a perturbáció mátrixa azon a bázison diagonális legyen. Legyenek $|\phi_i\rangle$-k olyan állapotok, aminél minden $i = (1, \ldots, k)$ indexre ugyanaz az alapállapoti energia-sajátérték*(k-szorosan degenerált állapot)*, azaz:

$$\hat{H}_0 |\phi_i\rangle = E |\phi_i\rangle$$

Definiáljuk a következő mátrixot:

$$W_{nm} = \langle \phi_m | \hat{H}' | \phi_n \rangle$$

Mivel $\hat{H}'$ hermitikus volt, így a W_{nm}-ekből képezett mátrix is az lesz. Mivel a mátrix herimtikus, ezért mindig diagonalizálható, méghozzá úgy, hogy a főátlóban a valós sajátértékek vannak, valamint a sajátvektorai is ortonormált rendszert alkotnak. A képzett $k \times k$ méretű mátrixnak k darab sajátértéke és sajátvektora van, amik a következőt teljesítik:

$$\sum_{n=1}^{k} W_{nm} e_n^{(i)} = \Delta^{(i)} e_m^{(i)}$$

$$\sum_n e_n^{(i)*} e_n^{(j)} = \delta_{ij}$$

Alkossunk egy bázist*(az ortonormáltság továbbra is fennáll)* a következő módon:

$$|\chi_i\rangle = \sum_{n=1}^{k} e_n^{(i)} |\phi_n\rangle$$

Transzformáljuk át erre a bázisra a perturbáló Hamilton-operátort.

$$\langle\chi_i|\hat{H}'|\chi_j\rangle = \left\langle \sum_{n=1}^{k} e_n^{(i)}\phi_n \middle| \hat{H}' \middle| \sum_{m=1}^{k} e_m^{(j)}|\phi_m\rangle \right\rangle = \sum_{n,m} e_n^{(i)*} e_m^{(j)} \langle\phi_n|\hat{H}'|\phi_m\rangle =$$
$$= \sum_{n,m} e_n^{(i)*} e_m^{(j)} W_{nm} = \sum_n e_n^{(i)*} \sum_m W_{nm} e_m^{(j)} = \sum_n e_n^{(i)*} \Delta^{(j)} e_n^{(j)} = \Delta^{(j)}\delta_{ij}$$

Látható, hogy itt tényleg diagonális mátrixot kapunk. Ha áttérünk a χ bázisra, akkor erre azt szokták mondani, hogy ez a "jó" sajátvektorrendszer. Ezekben a "kevert" állapotokban megszűnik a degeneráció. A k darab "jó" sajátállapotra tehát teljesül, hogy

$$E_i^{(1)} = \langle\chi_i|\hat{H}'|\chi_i\rangle = \Delta^{(i)}$$

Egyszerűbbé tehető az élet, ha találunk egy az alapállapoti és a perturbáló Hamilton-operátorral is kommutáló hermitikus opertátort. Ekkor a W megkeresése elkerülhető, a talált operátor sajátfüggvényei által alkotott bázison nem degenerált a probléma. Ilyen például centrális potenciál esetén a $\hat{J}_z$ operátor*(bizonyítás az A-s kvantum ea. jegyzetben.*

12.1.3. Időfüggő perturbációszámítás

Eddig mind a potenciál, mind pedig a Hamilton-operátor időfüggetlen volt, így az időfüggetlen Schrödinger-egyenletet alakítgatva jutottunk eredményre. Nézzük meg az időfüggő esetet:

$$i\hbar\frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{H}\psi$$

Ha $\hat{H}$ időfüggetlen, akkor az időfüggés leválasztható: $\psi(t) = \psi_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$. Az általános megoldás:

$$\psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

Ha a rendszer energia sajátállapotban van, akkor az ott is marad*(egy darab c=1 a többi 0)*. Ez zárt rendszerre mindig igaz. De zárt rendszer nem létezik a valóságban. A kölcsönhatások általában függnek az időtől, de kicsik:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'(t)$$

így

$$\psi(t) = \sum_n c_n(t)\psi_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

A c_n együtthatók meghatározásához kezdeti feltételek kellenek. Fejtsük ki a $\hat{H}'$ hatását ψ_n-re ugyan ezen a bázison:

$$\hat{H}'\psi_n = \sum_m d_m \psi_m$$

$$d_m = \langle\psi_m|\hat{H}'(t)|\psi_n\rangle = H'_{nm}(t)$$

így

$$\hat{H}'\psi_n = \sum_m H'_{nm}\psi_m$$

Ezt behelyettesítve a Schrödinger-egyenletbe:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \sum_m \left[\frac{dc_n}{dt}\psi_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} - \frac{i}{\hbar}E_n c_n \psi_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\right] i\hbar$$

A másik oldal:

$$\hat{H}\psi = \hat{H}_0\psi + \hat{H}'(t)\psi = \sum_n c_n(t)E_n\psi_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} + \sum_n c_n(t)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\sum_m H'_{nm}\psi_m$$

A második tagban ki kell cserélni az indexeket, hogy a két egyenletet egybeírhassuk:

$$i\hbar\sum_m \frac{dc_n}{dt}\psi_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} = \sum_n \left(\sum_m H'_{nm}c_m e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)t}\right)\psi_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

Ez egy differenciálegyenlet c-re:

$$i\hbar\frac{dc_n}{dt} = \sum_n H'_{nm} c_m e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)t}$$

Vezessük be $E_m - E_n = \hbar\omega_{nm}$ jelölést, így:

$$i\hbar\frac{dc_n}{dt} = \sum_n H'_{nm} c_m e^{i\omega_{nm}t}$$

Eddig minden egzakt volt, csak helyettesítgettünk. Az egyenletet semmivel nem egyszerűbb megoldani mint a Schrödinger-egyenletet. Iteratív módszerrel próbálkozunk, mivel a megoldás H' szerese az eredetinek. A nulladik közelítés az, hogy minden c konstans.
Az első közelítés az, hogy ezt a konstanst beteszem a jobb oldalra és akkor egy integrálással megkapjuk a c-t első közelítésben. Ez H'-vel arányos. A második közelítést úgy kapjuk, hogy az első közelítés eredményét írjuk jobb oldalra, ezt azonban már jóval komplikáltabb kiszámolni, így megelégszünk az első renddel. Az első rendben elvégzendő integrál:

$$c_N(t) = -\frac{i}{\hbar}\sum_m c_m(t=0)\int_0^t dt' H'_{nm}(t) e^{i\omega_{nm}t'} + c_n(t=0)$$

(A Nagy Károly könyvben más van, az bonyolultabbnak tűnik, ezért inkább ezt írtam le.) Példák lehet, hogy kellenek, azokat nem írom ide, mert baromi sok van, pl. Fermi-féle aranyszabály, abszorpció, emisszió, stb...

12.1.4. Variációs módszer

A variációs módszer az alapállapoti energia megbecslésére alkalmas, ha van egy Ansatzunk az alapállapoti hullámfüggvényre. Legyenek $|\phi_i\rangle$-k egymásra merőleges sajátállapotai a Hamilton-operátornak, E_i sajátértékkel. Fejtsünk ki ezen egy $|\psi\rangle$ állapotot és tegyük fel, hogy E_1 a legkisebb energiasajátérték:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle$$

$$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = \left\langle \sum_m c_m\phi_m \middle| \hat{H} \middle| \sum_n c_n\phi_n \right\rangle = \sum_{m,n} c_m^* c_n E_n \langle\phi_m|\phi_n\rangle = \sum_n |c_n|^2 E_n \geq E_1 \sum_n |c_n|^2 = E_1$$

Átrendezve és a normáltságot biztosítva:

$$E_1 \leq \frac{\langle\psi|\hat{H}'|\psi\rangle}{|\psi|^2}$$

Ezt ténylegesen akkor lehet használni, ha $E_1 = \langle\phi_1|\hat{H}|\phi_1\rangle$, ekkor $E_1 = \min_{\psi\in\mathcal{H}}\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle$. Ezt egyébként nem tudjuk megcsinálni a teljes Hilbert-téren, hanem csak egy részén. Ezért α_i-kkel paraméterezett hullámfüggvényeket veszünk és a paraméterek szerint minimalizálunk. Minél közelebb van az alapállapoti hullámfüggvényre adott "tippünk" a tényleges alapállapoti hullámfüggvényhez, annál pontosabban megkapjuk az alapállapoti energiát.

12.1.5. Hartree-Fock módszer

Írjuk fel egy Z rendszámú atom Hamilton-operátorát:

$$\hat{H} = \sum_{l=1}^{Z}\hat{H}_l + \frac{1}{2}\sum_{k,l=1,k\neq l}^{Z}\frac{e^2}{r_{lk}}$$

A $\hat{H}_l$ az l-edik elektron Hamilton-operátora

$$\hat{H}_l = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\triangle_l - \frac{Ze^2}{r_l}$$

Alkalmazzuk erre a variációs módszert. Az

$$I = \int\ldots\int \phi^*\hat{H}\phi dx_1\ldots dx_f$$

integrál minimumát keressük

$$\int\ldots\int \phi^*\phi dx_1\ldots dx_f = 1$$

mellékfeltétellel. Vegyük fel a teljes hullámfüggvényt az egyrészecske hullámfüggvények szorzataként. Ez nem rendelkezik a kívánt szimmetriatulajdonságokkal, de a számolás így jobban érthető. A végén annyit kell majd változtatni, hogy a hullámfüggvényt egy Slater-determinánsból képezzük majd, így teljesül az elektronok által megkövetelt antiszimmetria is.

$$I = \sum_{l=1}^{Z} \int \phi_l^* \hat{H}_l \phi_l dV_l + \frac{1}{2} \sum_{k=1,k\neq l}^{Z} \int \int \phi_l^* \phi_k^* \frac{e^2}{r_{lk}} \phi_l \phi_k dV_l dV_k$$

A minimum feltétele, hogy az integrál ϕ_l-ek szerinti variációja nulla legyen:

$$\delta I = \sum_{l=1}^{Z} \int \delta\phi_l^* \left[\hat{H}_l + \sum_{k=1,k\neq l}^{Z} \int \phi_k^* \frac{e^2}{r_{lk}} \phi_k dV_k \right] \phi_l dV_l = 0$$

A kényszerfeltétel variációjából azt kapjuk, hogy

$$\int \delta\phi_l^* \phi_l dV_l = 0$$

Tegyük ezt bele a variált integrálba egy $-E_l$ Lagrange-multiplikátorral:

$$\sum_{l=1}^{Z} \int \delta\phi_l^* \left[\hat{H}_l + \sum_{k=1,k\neq l}^{Z} \int \phi_k^* \frac{e^2}{r_{lk}} \phi_k dV_k - E_l \right] \phi_l dV_l = 0$$

Ez tetszőleges $\delta\phi_l^*$-ra teljesül, így a következő marad:

$$\left[\hat{H}_l + \sum_{k=1,k\neq l}^{Z} \int \phi_k^* \frac{e^2}{r_{lk}} \phi_k dV_k - E_l \right] \phi_l = 0$$

Ezt Hartree-egyenletrendszernek nevezik, szukcesszív approximáció segítségével lehet megoldani. A ϕ_l sajátfüggvényeket nulladik közelítésben hidrogénszerű sajátfüggvényeknek vesszük és ezekkel kiszámítjuk az

$$U_l^{(0)}(\mathbf{r}_l) = \sum_{k=1,k\neq l}^{Z} \int \phi_k^{(0)*} \frac{e^2}{r_{lk}} \phi_k^{(0)} dV_k$$

összeget. Ez tulajdonképpen az l-edik elektron közepes potenciális energiája, ami a többi elektronnal való kölcsönhatásból származik. Ha ezt visszahelyettesítjük a Hartree-egyenletbe, akkor az első közelítés $\phi_l^{(1)}$ függvényeit meghatározó egyenletrendszert kapunk:

$$\left(\hat{H}_l + U_l^{(0)} - E_l^{(0)} \right) \phi_l^{(1)} = 0$$

Az így kiszámított $\phi_l^{(1)}$ függvénnyel

$$U_l^{(1)}(\mathbf{r}_l) = \sum_{k=1,k\neq l}^{Z} \int \phi_k^{(1)*} \frac{e^2}{r_{lk}} \phi_k^{(1)} dV_k$$

Melyet újra visszahelyettesítve megkaphatjuk a második korrekciót és így tovább. Ezt addig folytatjuk, amíg $\phi_l^{(n)} \neq \phi_l^{(n-1)}$. Így rendszer teljes alapállapoti energiája:

$$E = \sum_{l=1}^{Z} E_l - \frac{1}{2} \sum_{k,l=1,k\neq l}^{Z} \int \int \phi_l^* \phi_k^* \frac{e^2}{r_{lk}} \phi_l \phi_k dV_l dV_k$$

ahol

$$E_l = \int \phi_l^* \hat{H} \phi_l dV_l + \sum_{k=1,k\neq l}^{z} \int \int \phi_l^* \phi_k^* \frac{e^2}{r_{lk}} \phi_l \phi_k dV_l dV_k$$

Ennek a közelítésnek az a hibája, hogy nem veszi figyelembe a Pauli-elvet. Ezt később Fock orvosolta azzal, hogy a hullámfüggvényt egy Slater-determinánsból képezte. Ezzel a Hartree-Fock egyenletet kapjuk:

$$\left[\hat{H}_l + \sum_{k=1,k\neq l}^{Z} \int \psi_k^* \frac{e^2}{r_{lk}} \psi_k d\xi_k - E_l \right] \psi_l - \sum_{k=1,k\neq l}^{Z} \int \psi_k^*(\xi_k) \frac{e^2}{r_{lk}} \psi_l(\xi_k) d\xi_k \psi_k = 0$$

Itt a ξ_k valamennyi változót *(térkoordináták, spinváltozó)* jelöli, így az integrálás is ezekre értendő.

12.2. Atomi energiaszintek, spektrumok, spektroszkópia

Az első vonalas színképet Fraunhoffer látta. Később Bunsen spektroszkópiai megfigyeléseinek köszönhetően a színképelemzés a fizika külön tudománnyá fejlődött. A színképvonalak egyértelműen jellemeznek egy-egy kémiai elemet, sőt a vonalaik alapján fedeztek fel új elemeket. Ez a vonalas színkép azonban már nem volt magyarázható a klasszikus tárgyalásmódban.
A félklasszikus Bohr- illetve Bohr-Sommerfeld-féle atommodell jól leírja a hidrogén és közelítőleg az alkáli atomok színképének főbb vonásait, de a színképek finomabb részleteinek magyarázata csak a modern kvantumelmélet eszközeivel lehetséges. A modellek lényege, hogy az atomok energiaállapotai kvantumszámokkal jellemezhetők és az adott állapotokhoz diszkrét, meghatározott energia tartozik.
Az alapállapotban levő atom elektronjai a Pauli-elv által megengedett legalacsonyabb energiaállapotokat foglalják el, és gerjesztéskor a kiválasztási szabályoknak is megfelelően az atom egy vagy több elektronja magasabb energiaállapotba ugrik. Ha a gerjesztett elektronok egyike alacsonyabb energia-állapotba kerül, akkor az energiakülönbségnek megfelelő energiájú foton sugárzódik ki:

$$\Delta E = h\nu - h\frac{c}{\lambda}$$

Az egyes atomi energiaszintek jelölésére a kvantumszámokat használják:

- n: főkvantumszám *(1, 2, 3, 4, ..., betűjelöléssel: K, L, M, N, ...)*
- L: eredő pálya-impulzusmomentum *(1, 2, 3, 4, ..., betűjelöléssel: S, P, D, F, G, ...)*
- S: eredő spin-impulzusmomentum *(a 2S+1 multiplicitással szokás megadni)*
- J: teljes impulzusmomentum *(L+S)...|L − S| közé esnek egyesével változva*
- m_j mágneses kvantumszám $(j, j-1, ..., -j)$

A felsorolt kvantumszámok segítségével a következő módon szokás felírni az egyes energiaszinteket:

$$n^{2S+1}L_J$$

Így például a nátriumatom alapállapota: $3^2S_{1/2}$*(három-dublett-S-egyketted).* Az első szám a legkülső elektron állapotának főkvantumszáma, a betű a pálya-impulzusmomentum kvantumszámot jelöli(S állapot, azaz L=0), a bal felső szám a lehetséges spinbeállások száma($S = \frac{1}{2}$ miatt $2S + 1 = 2$), a jobb alsó index pedig a teljes impulzusmomentumot mutatja.
Spektrumok közül megkülönböztethetünk abszorpciós és emissziós spektrumot. Emissziós spektrum esetén sötét háttér előtt látunk színes vonalakat, abszorpciós esetén pedig a látható fény színskálájában látunk fekete csíkokat diszkrét helyeken.
A spektrum vizsgálatához spektroszkópokat használnak. Ezeknek legfontosabb része a színbontó elem, ami lehet optikai rács, vagy prizma. Gyakran ún. holografikus rácsot használnak, amelyen a vonalak profilja speciális, hogy csak az első diffrakciós rendet engedje át. A rácsot a rácsállandójával lehet jellemezni. Nagyon fontos jellemző a felbontóképesség:

$$R_S = \frac{\lambda}{d\lambda}$$

itt $d\lambda$ az egymás melletti, még épp megkülönböztethető két vonal hullámhossza közötti különbség. A felbontóképesség javítható a rácsállandó csökkentésével, ám biztosítani kell azt a feltételt, hogy a rácsállandó legalább két hullámhossznyi legyen, ami látható fény esetén kb $1\mu m$. Minden rácsnak vannak leképezési hibái. Ezek akkor a legkisebbek, ha a fény merőlegesen esik a rácssíkra.
A fény általában egy kollimátoron keresztül jut a résre és a prizmára, majd a megfigyelésre szolgáló távcsőbe. A spektroszkóp-goniométer egy olyan szerkezet, amivel nagyon pontosan meg lehet mérni a diffrakciós rácson eltérült fénysugár eltérülési szögét. A pontos mérés nagyon precíz beállítást igényel. Ezek a következők: a távcső és a kollimátor egy tengelybe essen és legyenek párhuzamosak, valamint a tárgyasztal normálisa merőleges legyen a távcső és a kollimátor tengelyére.

12.3. A hidrogénatom spektruma

A hidrogénatom a legegyszerűbb elem, csupán egy protonból és egy elektronból áll. A Bohr-modell szerint az elektron impulzusmomentuma kvantált, $\frac{h}{2\pi}$ egész számú többszöröse. E feltételt és az elektron-proton közti vonzó Coulomb-kölcsönhatást figyelembe véve a hidrogénatombeli elektron lehetséges energiaszintjei:

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0 h^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

Itt e az elektron töltése, m_e az elektron tömege, ε_0 a vákuum permittivitása, n a főkvantumszám, h pedig a Planck-állandó. Külső tér nélkül hidrogénatomban az elektron energiája csak a főkvantumszámtól függ. A

$$T_n = -\frac{E_n}{hc}$$

mennyiséget termnek is nevezzük. A termek különbsége megegyezik a kisugárzott fény hullámhosszának reciprokával:

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{m_e e^2}{8\varepsilon_0^2 h^3 c}\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right) = R_\infty\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right)$$

ahol R_∞-t Rydberg-állandónak nevezik. Ez a fenti kifejezés nem ad pontos egyezést a mérésekkel, mert a hidrogén atomban az elektron nem a proton körül, hanem az elektron és a proton közös tömegközéppontja körül kering. Ezt korrigálni lehet, ha az elektron tömege helyett a redukált tömeget használjuk.

$$R_H = R_\infty\left(1 + \frac{m_e}{m_p}\right)^{-1}$$

Ha az összes olyan átmenetet tekintjük, ahol n rögzített és m nagyobb mint n, akkor az előző kifejezés egy-egy színképsorozatot ír le. Az $n = 2$ átmeneteit Balmer-sorozatnak, az $n = 1$-hez átmeneteket pedig Lymann-sorozatnak nevezik. Ez adja az úgynevezett durva-szerkezetet.

12.3.1. Spin-pálya kölcsönhatás

Érzékeny spektroszkóppal látni lehet, hogy az egyes színképvonalak nem egyedül vannak, hanem megkettőződtek. Ennek az oka a spin-pálya kölcsönhatás. Ez tulajdonképpen a Dirac-egyenlet egy következményeként azt írja le, hogy ahogy az elektron spin- és tértbeli változói nem teljesen függetlenek. Ennek a fizikai eredete a Dirac-egyenlet nélkül is megérthető: egy $\mathbf{v}$ sebességgel mozgó elektron az atommag centrális elektromos terét részben*($\mathbf{v} \times \mathbf{E}$-vel arányosan)* mágneses térnek érzi. Az elektronnak a spinjével arányos mágneses dipólmomentuma van, ennek az energiája ebben a belső mágneses térben:

$$-\boldsymbol{\mu}_s \mathbf{B}_b \propto \mathbf{S}\left(\mathbf{v} \times \mathbf{E}\right) \propto \mathbf{SL} = \xi(\mathbf{r})\mathbf{SL}$$

Ha ezt kiátlagoljuk az elektron térbeli hullámfüggvényével, akkor a következőt kapjuk:

$$K_{SO} = \lambda \mathbf{SL}$$

Mivel a mag elektromos tere Z-vel arányos, valamint az $\frac{1}{r^3}$ várható értéke Z^3-el arányos*(miért???)*, ezért a $\lambda \propto Z^4$. A finomszerkezet ezek után könnyen megérthető. A spin-pálya csatolás következtében nem mindegy, hogy az elektron spinje és pálya-impulzusmomentuma hogyan áll egymáshoz képest, azaz mekkora a teljes impulzusmomentum:

$$\lambda \mathbf{LS} = \frac{\lambda}{2}\left((\mathbf{L} + \mathbf{S})^2 - \mathbf{LL} - \mathbf{SS}\right) = \frac{\lambda}{2}\left(J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\right)$$

A λ rendszámfüggése miatt ez az effektus sokkal nagyobb a nagyobb rendszámú atomok esetében.

12.3.2. Hiperfinom kölcsönhatás

Egyes spektrumvonalak nagy felbontásban igen finom szerkezettel rendelkeznek. Pauli ezt a hiperfinom szerkezetet a magspinhez járuló magmágneses momentummal hozta kapcsolatba. A magmágneses momentum kölcsönhat az elektronok által a mag helyén keltett mágneses térrel és ez vezet a hiperfinom felhasadáshoz. A spin-pálya kölcsönhatáshoz hasonlóan a hiperfinom kölcsönhatás a következő módon írható:

$$K_{hf} = A_J \mathbf{JI}$$

Itt A_J a hiperfinom kölcsönhatási állandó, $\mathbf{J}$ és $\mathbf{I}$ pedig az elektronfelhő eredő impulzusmomentuma illetve a mag spinje. A hiperfinom kölcsönhatásban a legnagyobb járulékot az s-elektronok adják, mert egyedül nekik nem nulla a mag helyén való megtalálási valószínűségük. Ezt az izotrop részt Fermi-féle kontakt-kölcsönhatásnak hívjuk.
A nem nulla pálya-impulzusmomentumú elektronok dipól-dipól jellegű járuléka anizotroppá teszi a hiperfinom kölcsönhatást. Mivel azonban ez a járulék sokkal kisebb a kontakt-kölcsönhatásnál, ezért nem foglalkozunk az A_J anizotrópiájával. A kölcsönhatás az $\mathbf{I}$ és $\mathbf{J}$ precessziójához vezet az $\mathbf{F} = \mathbf{I} + \mathbf{J}$ tejes impulzusmomentum körül és az adott E_J energiájú energiaszint felhasadását(E_F) eredményezi:

$$E_F = E_J + \frac{1}{2}A_j\left[F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)\right]$$

Itt az F és I megfelelő kvantumszámok, hasonlóan J-hez. Így az adott szint $2J+1$*(ha $I \geq J$)* illetve $2I+1$*(ha $J \geq I$)* szintre hasad fel.

12.4. Felhasadások különböző terekben

Különböző külső terekkel hatva például gázokra további felhasadásokat figyelhetünk meg.

12.4.1. Stark-effektus

Hassunk a hidrogénatomra $\mathbf{E} = (0, 0, \varepsilon)$ külső elektromos térrel. Ekkor a Hamilton-operátor:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\triangle - \frac{e^2}{r} + e\varepsilon z$$

Itt az első két tag az alapállapoti Hamilton-operátor, az utolsó pedig a perturbáló. A hidrogénatom alapállapoti Hamilton-operátorának a megoldása más tételből ismert, perturbálatlan energiák és hullámfüggvények

$$E_{0n} = -\frac{\mu e^2}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}$$

$$\psi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_l^m(\vartheta, \varphi)$$

Látható, hogy minden energiasajátértékhez n^2 lineárisan független sajátfüggvény tartozik. Vizsgáljuk meg, hogy a külső elektromos tér mennyire változtatja meg az energiaszinteket. A sajátfüggvények paritását a gömbfüggvények paritása hordozza, azt pedig az l mellékkvantumszám határozza meg. Páros l-hez páros, páratlanhoz páratlan sajátfüggvény tartozik. A perturbáló operátor páratlan, így a $\hat{H}'$-nek csak az olyan perturbálatlan állapotok között vett H'_{ks} mátrixelemei különböznek nullától, amik ellentétes paritásúak. Ezért a $\hat{H}'$ operátor mátrixának a főátlójában álló elemek mind nullák, amiből azt következik, hogy a hidrogénatom $n = 1$ alapállapotában*(amely nem elfajult)* a perturbációszámítás első közelítése nem ad változást.
Az első gerjesztett állapot $n^2 = 4$-szeresen elfajult. Az (l, m) kvantumszámok ebben az állapotban a $(0, 0)$, $(1, 0)$, $(1, 1)$, $(1, -1)$ értéket vehetik fel. A $H'_{ks}(k \neq s)$ mátrixelemk közül csak azok nem nullák, melyek mágneses kvantumszáma megegyezik. Ez belátható a következő módon:

$$\left[\hat{L}_z, \hat{H}'\right] = 0$$

teljesül, valamint jelölje ψ_{n_k,l_k,m_k} és ψ_{n_s,l_s,m_s} két hidrogénállapot sajátfüggvényét. Így

$$\left[\hat{L}_z, \hat{H}'\right]_{ks} = \langle\psi_{n_k,l_k,m_k}|\left[\hat{L}_z, \hat{H}'\right]|\psi_{n_s,l_s,m_s}\rangle = (m_k - m_s)\hbar H'_{ks} = 0$$

Ebből látszik, hogy $H'_{ks} = 0$, ha $m_k \neq m_s$. Így tehát első gerjesztett állapotban, csak a $\psi_{200} = \varphi_1$ és a $\phi_{210} = \varphi_2$ sajátfüggvényekkel vett mátrixelem nem nulla.

$$\varphi_1 = \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(2 - \frac{r}{a_0}\right)e^{-\frac{r}{2a_0}}\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$\varphi_2 = \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{r}{a_0\sqrt{3}}e^{-\frac{r}{2a_0}}\left(\frac{3}{\sqrt{4\pi}}\right)^{\frac{1}{2}}cos\,(\vartheta)$$

Ezekkel kiszámolva a mátrixelemeket és felhasználva, hogy $a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$

$$H'_{12} = H'_{21} = -3e\varepsilon a_0$$

Az energiakorrekciókat a következő determináns adja:

$$\begin{vmatrix} -E_2^{(1)} & -3e\varepsilon a_0 & 0 & 0 \\ -3e\varepsilon a_0 & -E_2^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E_2^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -E_2^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

Ebből $E_2^{(1)} = \pm 3e\varepsilon a_0$, 0, 0. A négy gyök közül kettő nulla, a degeneráció tehát csak részlegesen oldódik fel. A felhasadt energiaszintek:

$$E_{21} = E_0 + 3e\varepsilon a_0$$
$$E_{22} = E_0 - 3e\varepsilon a_0$$

A Nagy Károly könyvben ezt kihozza, nem írom ide, mert kell hozzá más levezetés is, ami nem kapcsolódik szorosan ide

$$\varphi_{21} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1 + \varphi_2)$$
$$\varphi_{22} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1 - \varphi_2)$$

12.4.2. Zeeman-effektus

Ha mágneses térbe helyezzük az hidrogén atomot akkor is felhasadást tapasztalunk. Az elektron hullámfüggvénye öt változótól függ. A három helykoordinátától, az időtől és a spintől. Ez utóbbi értéke $\pm\frac{1}{2}$ lehet.

$$\psi(x, y, z, t, \frac{1}{2}) = \alpha\psi(x, y, z, t)$$
$$\psi(x, y, z, t, -\frac{1}{2}) = \beta\psi(x, y, z, t)$$

Itt α és β spin-sajátfüggvények. Felírható oszlopvektor alakban is:

$$\psi(x, y, z, t, s) = \psi_+(x, y, t, z)\alpha + \psi_-(x, y, t, z)\beta = \begin{pmatrix}\psi_+\\ \psi_-\end{pmatrix}$$

$$\psi(x, y, z, t, \frac{1}{2}) = \begin{pmatrix}\psi_+\\ 0\end{pmatrix}$$

$$\psi(x, y, z, t, -\frac{1}{2}) = \begin{pmatrix}0\\ \psi_0\end{pmatrix}$$

A valószínűségi értelmezés szerint a $\psi_+^*\psi_+$ az $s = \frac{1}{2}$ spinállapotú elektron tartózkodási valószínűsége, a pedig$\psi_-^*\psi_-$ az $s = -\frac{1}{2}$-é. Teljesülnie kell, hogy

$$\int \psi_+^*\psi_+ + \psi_-^*\psi_- dV = 1$$

Tegyük fel, hogy φ a mag centrális sztatikus elektromos terének potenciálja. Ekkor a Pauli-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\triangle\psi + \frac{e}{2\mu c}\mathbf{H}\left(\mathbf{L} + 2\mathbf{S}\right)\psi + \frac{e^2}{8\mu c^2}\left(\mathbf{H}\times\mathbf{r}\right)^2\psi - e\varphi\psi = E\psi$$

Itt $\varphi = \frac{Ze}{r}$ és $\mathbf{H} = (0, 0, H)$. A mágneses tér olyan erősségű, hogy a négyzetes tag elhanyagolható*(normális Zeeman-effektus)*.

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\triangle\psi + \frac{e}{2\mu c}H\left(\mathbf{L}_z + 2\mathbf{S}_z\right)\psi - \frac{Ze^2}{r}\psi = E\psi$$

Tudjuk, hogy

$$\hat{\mathbf{L}}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

és

$$\hat{\mathbf{S}}_z = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_z$$

ahol $\hat{\sigma}_z$ a megfelelő Pauli-mátrix. Ezeket behelyettesítve az egyenletbe, kihasználva, a hullámfüggvény alakját két egyenletet kapunk:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\triangle\psi_+ + \frac{e\hbar}{2\mu c}H\left(-i\frac{\partial}{\partial\varphi} + \hat{\sigma}_z\right)\psi_+ - \frac{Ze^2}{r}\psi_+ = E\psi_+$$
$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\triangle\psi_- + \frac{e\hbar}{2\mu c}H\left(-i\frac{\partial}{\partial\varphi} + \hat{\sigma}_z\right)\psi_- - \frac{Ze^2}{r}\psi_- = E\psi_-$$

Az első a pozitív, a második a negatív spinállapotoknak megfelelő sajátérték-egyenlet. A spin figyelmen kívül hagyásával a tárgyalt hidrogénatom sajátérték-feladatával összehasonlítva, látjuk, hogy az ottani

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r)Y(\vartheta, \varphi)$$

sajátfüggvényekből képzett

$$\psi_+ = \psi(r,\vartheta,\varphi)\alpha = R(r)Y(\vartheta,\varphi)\alpha$$
$$\psi_- = \psi(r,\vartheta,\varphi)\beta = R(r)Y(\vartheta,\varphi)\beta$$

függvények lesznek a két egyenlet sajátfüggvényei az

$$E_{n,l,m,s} = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2} - \frac{e\hbar^2}{2\mu c}H(m+2s)$$

sajátértékekkel. Ezt alkalmazva a hidrogénatom alapállapotára:

$$E_{1,0,0,\pm\frac{1}{2}} = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \mp \frac{e\hbar}{2\mu c}H$$

A mágneses tér tehát felhasítja az alapállapot energiaszintjét két szintre. Ez az ún. dublett-felhasadás. Ez által a színképvonalak is szétválnak. Ez az úgynevezett normális Zeeman-effektus, amit erős mágneses tereknél figyelhetünk meg. Gyengébb mágneses terek esetén ez az egyszerű számítás nem alkalmazható, mivel az energia-kifejezésben megjelenik még egy tag, a spin-pálya kölcsönhatásból származó energia. Gyenge terek esetén ennek járuléka a mágneses nyomaték $-\mathbf{MH}$ potenciális energiájával összemérhető nagyságrendű, ezért nem hagyható figyelmen kívül. Ez az ún. anomális Zeeman-effektus, ahol a két energiatag együttes járuléka jelenik meg és hozza létre az atomi energiaszintek a fentinél bonyolultabb megváltozását.

12.4.3. Lamb-shift

A kvantumtérelmélet szerint az elektron bármikor kibocsáthat egy fotont magából, ha azt el is nyeli. Ezek az úgynevezett virtuális fotonok körbelengik az atom elektronjait és lecsökkentik az elektron "effektív" tömegét és töltését. Az elektromos tér csak egy kicsit lesz kisebb és csak kis távolságon van hatása, így csak az s állapotot befolyásolja igazán. A Dirac-egyenlet szerint az azonos j, de különböző l kvantumszámokhoz tartozó szintek*(pl.* $2^2S_{1/2}, 2^2P_{1/2}$*)* elfajulnak, és emiatt nem igaz pl. a $g_s = 2$ összefüggés sem.. Lamb és Retherford kísérletileg kimutatta, hogy ez az eltolódás nagyon kicsi, rádiófrekvenciás tartományban van, $4,4 \cdot 10^{-6} eV$ az értéke. Ezt optikai úton már nem lehet kimutatni, csak nagyfrekvenciás rezonanciakísérlettel.

12.5. Szórás centrális térben, hatáskeresztmetszet, alagútjelenség

Ha van egy potenciál, ott a potenciál nagyságának és a a részecske energiájának a viszonya dönti el, hogy szórási vagy kötött állapot jön-e létre. Ha a részecske energiája nagyobb mint a potenciál az egész mozgás során, akkor szórás lesz.
Ha a potenciál a végtelenben nullához konvergál, akkor ott meg tudjuk oldani az egyenleteket, hiszen csak szabad részecskére kell gondolni, ott síkhullámok lesznek. A síkhullámra lehet úgy gondolni, mint egy bizonyos intenzitású részecskenyaláb.
Az egyenletek megoldása során a potenciált mindig tartományonként vizsgáljuk és a határfeltételeket megfelelően illesztjük. A Schrödinger-egyenlet linearitása miatt az együtthatók között is lineáris összefüggést várunk. Lecsengő potenciál esetén a végtelenben:

$$\psi(x \to -\infty) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$
$$\psi(x \to \infty) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}$$

Ahol A és B a bejövő síkhullám amplitúdója, F és G pedig a kimenőé. Ezek között keresünk lineáris kapcsolatot, nevezzük ezt szórási mátrixnak*(a teljes formalizmus hasonló mint az optikában a transzfer-mátrixos játék).*

$$\begin{pmatrix} B \\ F \end{pmatrix} = \mathbf{S} \cdot \begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} \\ s_{21} & s_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix}$$

Ha a Schrödinger-egyenletben $\hat{H}$ nem időfüggő, akkor a megoldás:

$$\psi = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\psi(t=0)$$

Állítás: $\mathbf{S}$ unitér mátrix, így megtartja a normát. Ez azt jelenti, hogy $|B|^2 + |F|^2 = |A|^2 + |G|^2$. Ha nincs jobbról jövő részecske nyaláb, akkor $G = 0$, így átrendezéssel:

$$\frac{|B|^2}{|A|^2} + \frac{|F|^2}{|A|^2} = 1$$

Vezessük be az $R = \frac{|B|^2}{|A|^2}$ reflexiós és $T = \frac{|F|^2}{|A|^2}$ transzmissziós együtthatókat. Látható, $R+T = 1$ ami megnyugtató. *(Ezt a transzfer-mátrixos számolgatást akkor érdemes használni, ha sok szabad terjedés és potenciálgát/gödör van egymás után, mert akkor az eredő transzfermátrix ezek szorzata lesz. DGy rezgések 3-on levezettük a közegből közegbe lépés és a szabad terjedés mátrixait):* A k_1 közegből k_2 közegbe lépés mátrixa:

$$\mathbf{L}(k_1, k_2) = \begin{pmatrix} 1 + \frac{k_1}{k_2} & 1 - \frac{k_1}{k_2} \\ 1 - \frac{k_1}{k_2} & 1 + \frac{k_1}{k_2} \end{pmatrix}$$

Itt a k_i-val a szokásos $\frac{2_m(E-V_i)}{\hbar^2}$-t jelöljük. Adott közegben terjedés mátrixa:

$$\mathbf{S}_a(k) = \begin{pmatrix} e^{ika} & 0 \\ 0 & e^{-ika} \end{pmatrix}$$

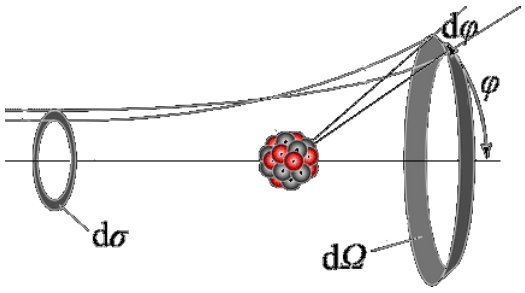
itt a az a hossz, ahol a terjedés történik. Ezekkel a terjedés mátrixokkal mindig úgy kell bánni, hogy az összes terjedés 0 legyen. Tehát pl. legyen egy a hosszú k_1 közeg, ami egy b hosszú k_2 közeggel határos, ami egy k_3 közeggel határos. Induljon a nyaláb a k_1 közeg felől. Így a teljes transzfermátrix:

$$\mathbf{T} = \mathbf{S}_{-b}(k_3)\mathbf{L}(k_2, k_3)\mathbf{S}_b(k_2)\mathbf{S}_{-a}(k_2)\mathbf{L}(k_1, k_2)\mathbf{S}_a(k_1)$$

Ebből pedig már könnyen megadható az eredő reflexiós és transzmisszós együttható.
Alagútjelenségnek nevezik azt, mikor van egy véges potenciálgát amin a részecske képes átjutni. Klasszikusan erről a részecske visszapattanna, tehát $R = 1$ lenne. Viszont ha megoldjuk a Schrödinger-egyenletet ezen a tartományon, akkor azt tapaszaljuk, hogy a hullámfüggvény ebben a tartományban exponenciálisan lecseng. Tehát ha a potenciálgát kellően vékony, akkor a részecskének van esélye átmenni rajta valamekkora valószínűséggel. Ez a valószínűség *(transzmissziós együttható)* a transzfermátrixos formalizmussal *(lépcső+szabad terjedés)* könnyen meghatározható.

$$|T_{22}|^2 = \frac{1}{T} \Rightarrow T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0-E)} \sinh^2(q'a)}$$

Itt $k' = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2} = iq'$, a pedig a potenciálgát hossza.
Fontos fogalom a szórás számításához a hatáskeresztmetszet. Ez szemléletesen nem más, mint az az ütkö-



12.1 ábra: Hatáskeresztmetszet

zésre merőleges kiterjedési síkon elfoglalt terület, amelyet az ütköző részecskék kölcsönhatási erőközpontok, illetve egyéb kölcsönhatási objektumok egymásnak célfelületként nyújtanak az ütközési kölcsönhatás szempontjából, mintha klasszikus kiterjedt részecskék lennének. Mértékegysége a $barn = 10^{-28}m^2$. A $d\sigma$ mennyiséget differenciális hatáskeresztmetszetnek nevezik. Ennek segítségével később definiálható a $\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega$ teljes hatáskeresztmetszet.
Ha van egy nyalábunk, akkor annak áramsűrűsége $\mathbf{j}$ az időegységenként egységnyi felületen átmenő részecskék száma. Ha megnézzük, hogy időegységenként hány db. részecske megy át a felületen, akkor

$$dN = d\sigma j = j\frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega \Rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{j}\frac{dN}{d\Omega}$$

A kvantummechanikai problémák során feltehető, hogy a potenciál $V(r)$ gömbszimmetrikus, véges hatótávolságú, azaz $V(r) \approx 0$ ha $r > R$ karakterisztikus távolságnál. Ez alatt azt kell érteni, hogy gyorsabban cseng le, mint $\frac{1}{r^2}$. Jöjjenek a részecskék z irányból. Írjuk fel a Hamilton-operátort bejövő részecskék nyalábjára, olyan kezdőfeltétellel, hogy $t \to -\infty$ -ben a részecskék messze vannak a szórócentrumtól. A bejövő síkhullám $-z$ irányból tehát

$$\psi_{be} = Ae^{i\frac{p}{\hbar}z}$$

Lesz egy szórt hullám, amit a centrumtól távolodó gömbhullámként képzelünk el. Keressük a megoldást

$$\psi(r,\theta,\varphi) = \frac{U(r)}{r} f(\theta,\varphi)$$

alakban. Itt a ψ nem feltétlenül sajátfüggvénye az $\hat{L}^2$-nek, így az f függvények nem feltétlenül a gömbfüggvényekkel egyezik meg, de felírható gömbfüggvények lineárkombinációjaként. A radiális Schrödinger-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2U}{dr^2} + \left(V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right) U = EU$$

Ha az $r \to \infty$ akkor már a sugárzási zónában vagyunk. A potenciál gyorsan levág, így minden $\frac{1}{r^2}$-es tag nullához tart, tehát egy szabad Schrödinger-egyenletet kell megoldani. Ennek a megoldása ismert:

$$U(r) = Ae^{ikr} + Be^{-ikr}$$

ahol $k = \frac{\sqrt{2Em}}{\hbar} = \frac{p}{\hbar}$. Mivel befelé semmit nem várunk, ezért $B = 0$, tehát

$$\psi(r \to \infty) = \frac{U(r)}{r} f(\theta,\varphi) \to e^{ikr}\frac{f}{r}$$

Milyen lehet az f? Mivel a potenciál centrális, ezért a szórt nyaláb is gömbszimmetrikus, így nem függ a φ-től. Így már kereshetjük a megoldást egy bejövő síkhullám és egy szórt gömbhullám összegeként.

$$\psi = A\left(e^{i\frac{p}{\hbar}z} + f(\theta)\frac{e^{i\frac{p}{\hbar}r}}{r}\right)$$

Írjuk fel az áramsűrűséget:

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\boldsymbol{\nabla}\psi + \psi\boldsymbol{\nabla}\psi^*\right)$$

A bejövő áram a síkhullámból jön:

$$j_{be} = -\frac{i\hbar}{2m}|A|^2\left(e^{-i\frac{p}{\hbar}z} i\frac{p}{\hbar} e^{i\frac{p}{\hbar}z} - e^{i\frac{p}{\hbar}z}\left(-i\frac{p}{\hbar}\right)e^{-i\frac{p}{\hbar}z}\right) = \frac{p}{m}|A|^2$$

Ez éppen a sebesség szorozva a bejövő nyaláb amplitúdójával. Ez a $d\Omega$ térszögben időegységenként szórt részecskék száma. Ha elmegyünk nagyon messzire, akkor $dA = r^2 d\Omega$ és a részecskék száma $dN = dAj_r = r^2 j_r d\Omega$.

$$j_r = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi_{sz}^*\frac{\partial\psi_{sz}}{\partial r} - \psi_{sz}\frac{\partial\psi_{sz}^*}{\partial r}\right)$$

$$\psi_{sz} = Af(\theta)\frac{e^{i\frac{p}{\hbar}}}{r}$$

ezekkel

$$j_r = \frac{p}{m}\frac{1}{r^2}|A|^2|f_p(\theta)|^2$$

$$dN = \frac{p}{m}\frac{1}{r^2}|A|^2|f_p(\theta)|^2 d\Omega$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_p(\theta)|^2$$

$$\sigma = \int |f_p(\theta)|^2 d\Omega = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta\, |f_p(\theta)|^2 d\Omega = 2\pi\int_{-1}^{1} d(\cos\theta)\, |f_p(\theta)|^2$$

Mostantól az a kérdés, hogy adott $V(r)$ potenciálhoz mi lesz $f_p(\theta)$. A fenti megoldás csak az $r \to \infty$ esetben működik, így meg kell oldani középen is a Schrödinger-egyenletet. *(Ez hosszú és annyira nem is könnyű, a Katz-féle jegyzetben benne van "Parciális hullámanalízis" címszó alatt. Bejönnek Bessel-függvényektől elkezdve minden. Nincs kedvem ide leírni, meg kétlem, hogy pontosan visszakérnék.)*

12.6. He-atom

Írjuk fel a Hamilton-operátort:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\triangle_1 - \frac{Zq_e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_1} - -\frac{\hbar^2}{2\mu}\triangle_2 - \frac{Zq_e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_2} + \frac{q_e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{12}}$$

Keressük $\psi = \phi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ alakban a megoldást. A ϕ-t perturbációszámítással kaphatjuk meg. Vegyük észre, hogy az alapállapoti Hamilton-operátor két egyrészecske Hamilton-operátor összege, amihez petrurbációként jön hozzá a kölcsönhatási tag. Tehát

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_1^{(0)} + \hat{H}_2^{(0)} \Rightarrow \phi_{kl}^{(0)} = \phi_k^{(0)}(\mathbf{r}_1)\phi_l^{(0)}(\mathbf{r}_2) \Rightarrow E_{kl}^{(0)} = E_k^{(0)} + E_l^{(0)}$$

Szétbonthatjuk tehát két egyrészecske Schrödinger-egyenletre:

$$\hat{H}_1^{(0)}\phi_k(\mathbf{r}_1) = E_k^{(0)}\phi_k(\mathbf{r}_1)$$
$$\hat{H}_2^{(0)}\phi_l(\mathbf{r}_2) = E_l^{(0)}\phi_l(\mathbf{r}_2)$$

Mivel a két állapot nem különböztethető meg, ezért nem csak a $\phi_k^{(0)}(\mathbf{r}_1)\phi_l^{(0)}(\mathbf{r}_2)$ sajátfüggvény, hanem a $\phi_k^{(0)}(\mathbf{r}_2)\phi_l^{(0)}(\mathbf{r}_1)$ is. A két sajátfüggvény azonban $l = k$ esetben megegyezik, így a kölcsönhatás által okozott energiakorrekció:

$$E^{(1)} = \left\langle \phi_{kk}^{(0)} \middle| \hat{H}' \middle| \phi_{kk}^{(0)} \right\rangle = \int \dots \int \phi_k^{(0)*}(\mathbf{r}_1)\phi_k^{(0)*}(\mathbf{r}_2)U_{12}\phi_k^{(0)}(\mathbf{r}_1)\phi_k^{(0)}(\mathbf{r}_2)dx_1 \dots dz_2$$

Ha viszont $k \neq l$ akkor a degeneráció van, amit éppen a kölcsönhatás perturbációként való figyelembevétele fog feloldani. Ebben az esetben

$$\begin{vmatrix} C_1 - E^{(1)} & K_1 \\ K_2 & C_2 - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

adja a korrekciót. Itt

$$C_1 = \left\langle \phi_{kl}^{(0)} \middle| \hat{H}' \middle| \phi_{kl}^{(0)} \right\rangle$$
$$K_1 = \left\langle \phi_{kl}^{(0)} \middle| \hat{H}' \middle| \phi_{lk}^{(0)} \right\rangle$$
$$K_2 = \left\langle \phi_{lk}^{(0)} \middle| \hat{H}' \middle| \phi_{kl}^{(0)} \right\rangle$$
$$C_2 = \left\langle \phi_{lk}^{(0)} \middle| \hat{H}' \middle| \phi_{lk}^{(0)} \right\rangle$$

Mivel az $U_{12} = U_{21}$, ezért $C_1 = C_2$ és $K_1 = K_2$, tehát

$$\begin{vmatrix} C - E^{(1)} & K \\ K & C - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow E^{(1)} = C \pm K$$

Az $E_k^{(0)} + E_l^{(0)}$ perturbálatlan állapot energiája tehát két felé hasad, melyek között az energiakülönbség $\Delta E = 2K$. Írjuk ki a C-re és a K-ra adódó integrálokat, hogy megvizsgálhassuk a jelentésüket.

$$C = \int \dots \int |\phi_k(\mathbf{r}_1)|^2 |\phi_l(\mathbf{r}_2)|^2 \frac{e^2}{r_{12}} dx_1 \dots dz_2$$

Itt $|\phi_k(r_1)|^2 dV_1$ és $|\phi_l(r_2)|^2 dV_2$ éppen annak a valószínűsége, hogy az (1)-es vagy (2)-es részecske éppen a dV_1 vagy dV_2 térfogatban van. A C tehát éppen a két elektron közötti Coulomb-kölcsönhatás energiájának középértéke ebben az állapotban. A K-nak nincs ilyen szemléletes jelentése. Azért lép fel, mivel a két elektron azonos. A $k - l$ állapotban levő készei közötti kölcsönhatósból származó energia, a kicserélődési energia. A szimmetrikus hullámfüggvény egyszerűen felírható, az antiszimmetrikusat pedig Slater-determinánssal lehet képezni:

$$\phi_+^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_k(\mathbf{r_1})\phi_l(\mathbf{r_2}) + \phi_l(\mathbf{r_1})\phi_k(\mathbf{r_2})\right)$$
$$\phi_-^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_k(\mathbf{r_1})\phi_l(\mathbf{r_2}) - \phi_l(\mathbf{r_1})\phi_k(\mathbf{r_2})\right)$$

Alapállapotban: $\phi^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \phi_{100}(\mathbf{r}_1)\phi_{100}(\mathbf{r}_2) = \frac{8}{\pi a_0^3}e^{-\frac{2}{a_0}(\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_2)}$ Ahol $a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$ Így az energiakorrekció:

$$E^{(1)} = \frac{64e^2}{\pi^2 a_0^6}\int\int e^{-\frac{4}{a_0}(\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_2)}\frac{1}{r_{12}}dV_1 dV_2 = \frac{5}{4}\frac{e^2}{a_0}$$

12.7. Kétatomos molekulák

12.7.1. Általános megjegyzések

- A tér szimmetrikus a két atommagon átmenő tengelyre, ezért az impulzusmomentum ezen tengelyre vett vetülete megmarad. Ezt a vetületet Λ-val szokás jelölni, és 0,1,2 értékei esetén rendre $\sum$- $\prod$-, δ-termről beszélünk.
- A molekula tengelyét tartalmazó síkre való tükrözés az impulzusmomentum előjelét megfordítja(axiálvektor). Következik, hogy a Σ-termek kivételével a többi kétszeresen elfajult(ezek a sajátfüggvények az impulzusmomentum előjelében különböznek). Egy $\sum$-term tükrözés esetén egy állandóval szorzódhat, mivel kétszeres tükrözés az identitással egyenlő ez az állandó ± 1, ezek alapján szokás $\sum^+$ és $\sum^-$ termekről beszélni.
- Két azonos atomból álló molekula szimmetrikus az atommagokat összekötő szakasz felezőpontjára is. Az erre való tükrözés szerint beszélhetünk páros(h) és páratlan(u) állapotokról. Ez utóbbi az elektronkoordináták előjelének megváltoztatásakor előjelet vált. Jelölés pl.:$\prod_u$
- Empirikus szabály: kémiailag stabil kétatomos molekulák túlnyomó többségének alapállapota teljesen szimmetrikus(a molekula minden szimmetriájára invariáns)
- Termeket ábrázolhatjuk grafikusan a magtávolság függvényében. **Tétel:** Csak különböző szimmetriájú termek metszhetik egymást.

12.7.2. Pauli-elv

A Hamilton-operátor szimmetrikus két azonos részecske(elektron) felcserélésére. Ezért a Hamilton-operátor kommutál a részecskék felcserélésével. Következésképpen választható olyan energia sajátfüggvények, amelyek a felcserélés operátorának is sajátfüggvényei. Mivel kétszeri felcserélés után az eredeti állapotba jutunk vissza, a felcserélés sajátértéke csak ± 1 lehet, vagyis a felcseréléssel szemben a sajátállapot lehet szimmetrikus vagy antiszimmetrikus.
Ha áttérünk az időfüggő Schrödinger-egyenletre, akkor a permutáció operátora megmaradó mennyiség *(mivel a Hamilton-operátorral felcserélhető)*, így a kezdeti szimmetria az időfejlődés során is megmarad.
Mint kiderült, a hullámfüggvény szimmetriája a részecske fajtájából következik:

- Feles spinű részecskék(**fermionok**) hullámfüggvénye antiszimmetrikus. Ebből az állításból rögtön következik, hogy az atom elektronjai közül semelyik kettő nem lehet azonos állapotban *(Pauli-elv)*.
- Egész spinű részecskék(**bozonok**) hullámfüggvénye szimmetrikus. Mivel nincsenek vegyes szimmetriájú részecskék, ezért minden részecskének tartozni kell valamelyik kategóriába. Azonos részecskék megcserélése az előzőtől megkülönböztethetetlen állapotot hoz létre. Az azonos részecskék megkülönböztethetetlenek.

12.7.3. Viriáltétel

A kvantummechanikai viriáltétel azt mondja, hogy ha egy rendszer Hamilton-operátora:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \sum \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i} + \hat{V}$$

ahol a potenciális energia k-ad rendű homogén függvény, akkor fennáll a következő egyenlősége:

$$k \langle V \rangle = 2 \langle T \rangle$$

12.7.4. Born-Oppenheimer közelítés

A molekulák elméletében kiemelt jelentőségű az a tény, hogy az atommagok tömege sokkal nagyobb az elektronokénál, ezért azok sokkal lomhábban mozognak, mint az elektronok. Ez teszi lehetővé, hogy a molekula elektronproblémáját rögzített magkoordinátákkal megoldva, azokat paraméternek tekintve, majd az így kapott energiafelület minimumát megkeresve megkapjuk a molekula alapállapoti energiáját *(és hullámfüggvényét)*. Ezt az eljárást nevezik Born-Oppenheimer közelítésnek. Az elektronprobléma megoldása több energiát ad, ezekből több potenciálfelületet kapunk. Akkor alkalmazható a közelítés, ha ezek a felületek szeparálva vannak egymástól. Kicsit részletesebben, a Born-Oppenheimer közelítésben a hullámfüggvény:

$$\psi = \psi_{el}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \psi_{mag}(\mathbf{R})$$

A Hamilton-operátor:

$$\hat{H} = \hat{H}_{el} + \hat{H}_{mag}$$

$$\hat{H}_{el} = \hat{T}_{el} + \hat{V}(\mathbf{r}, \mathbf{R})$$
$$\hat{H}_{mag} = \hat{T}_{mag} + \hat{V}_{mag}(\mathbf{R})$$

A lassan változó magkoordinátáktól függő elektron sajátérték probléma:

$$\hat{H}_{el}\psi_{el,j}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = U_j(\mathbf{R})\psi_{el,j}(\mathbf{r}, \mathbf{R})$$

Adiabatikus közelítésben az a közelítő potenciál amelynek minimuma a kémiailag kötött állapotot jelenti:

$$\hat{V}_{mag}(\mathbf{R}) + U_j(\mathbf{R})$$

Ezen minimum körül alakulnak ki a molekularezgések, melyek kis gerjesztésnél harmonikusak, nagyobb gerjesztésnél anharmonikusak. Még nagyobb gerjesztés disszociációhoz, kémiai reakcióhoz vezet. Akkor romlik el a közelítés, ha az elektronok is lassan motognak. Ahol egy $U_i(\mathbf{R})$ és egy $U_j(\mathbf{R})$ szint keresztezi egymást, ott van lassú mozgás, ott keverednek a molekula különböző gerjesztései. Az ilyen kevert gerjesztési módust **polaritonnak** hívják.

12.7.5. Hellman-Feynnman tétel

A Hellman-Feynnman tétel szerint

$$\frac{\partial E}{\partial \lambda} = \langle\psi| \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} |\psi\rangle$$

Itt E a ψ hullámfüggvényhez tartozó energia, λ pedig valamilyen paraméter. Ezen tétel segítségével ki lehet számolni a molekulában a magokra ható erőket, amiből lehet egyensúlyi magtávolságokat számolni. Ekkor λ helyére a magkoordinátákat kell írni, és ekkor tulajdonképpen a potenciál hely szerinti deriváltja áll a képletben, ami éppen az erő -1-szerese.

12.8. A periódusos rendszer és a kémiai kötések kvantummechanikai alapjai

A kvantummechanika korai sikereinek egyike a periódusos rendszer megértése volt a Hartree-módszer alapján. Az eljárás a következő. A megoldásokat szorzat alakban keressük: $\psi = \prod_j u_j$, és a Pauli-elv miatt nem engedjük meg, hogy egy elektronpályát kettőnél több elektron töltsön be*(két ellentétes spinű elektron)*. Az egyrészecske Schrödinger-egyenletekben szereplő átlagos potenciál mindig radiális szimmetriájúvá átlagoljuk vissza, így a kapott egyrészecske állapotok jellemezhetők az n főkvantumszámmal és l mellékkvantumszámmal. Az l mellékkvantumszámok hagyományos jelölése: $s, p, d, f, ...$
Az elektronok leárnyékolják a mag potenciáját, így ha egy elektron távolabb van a magtól, akkor kisebb potenciált érez. Az, hogy egy elektron milyen messze jár a magtól elsősorban a mellékkvantumszámától függ, hiszen ahogy pl. a hidrogénatomnál látható, a radiális hullámfüggvény hatvánnyal indul. Másképp megfogalmazva, nagy l-re az $l(l+1)$-el arányos centrifugális potenciál miatt az elektron kintebb lesz. Így a magasabb l kvantumszámú állapotok gyengébben kötöttek, és megszűnik a hidrogénatomnál még meglévő l szerinti degeneráció. Azonos főkvantumszámra az $l = 0$-tól $(n-1)$-ig tartó állapotok energiasajátértéke monoton nő. A Hartree-közelítés megadja az elektronpályák betöltésének sorrendjét: $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, ...$

12.8.1. A kovalens kötés

A kvantummechanika egyik nagy sikere volt a kovalens kötés megmagyarázása. A kötés azért jöhet létre, mert a kötött rendszer energiája alacsonyabb, mint az atomok energiájának összege. Ez azért van, mert az elektronok hullámfüggvénye besűrűsödik az atomok között. Ekkor:

- Coulomb-potenciálban a viriál-tétel miatt:

  $$E = \langle T\rangle + \langle V\rangle = -\frac{1}{2}\langle V\rangle$$

  Ha a magok között az elektronok összesűrűsödnek, akkor a magok vonzó potenciálja összeadódik, ami mélyebb eredőt eredményez.

- Egy helyről lehet két magot egymás felé vonzani.(Hellmann-Feynmann tétel)
- Vannak olyan effektusok is, amelyek a sűrűsödést akadályozzák:
  - Kisebb helyre szorulás a kinetikus energia növekedésével jár.
  - Az elektronok közötti Coulomb-taszítás
  - Pauli-elv akadályozza sok azonos spinű elektron összegyülekezését kis helyre, emiatt egy-egy molekulapályán ellentétes spinű elektronokból párok alakulhatnak ki

Ez kvalitatív kép. A kvantitatív számolások nehezek.

12.8.2. A vegyérték

Tekintsük a H_2 molekulát. Ennek a legalacsonyabb impulzusmomentumú lehetséges termjei az ${}^1\sum$ spinszinglett állapot és a ${}^3\sum$ spintriplett állapot. A spintriplett szimmetrikus spinhullámfüggvényt jelent, ami a Pauli-elv miatt antiszimmetrikus helyhullámfüggvényt. Azonban egy antiszimmetrikus helyhullámfüggvény $|\mathbf{r}_1| = |\mathbf{r}_2|$-nél eltűnik, így nem lehet az alapállapot. Kémiában szokásos kifejezés szerint **csomósíkja** van az elektronpályának. Részletes számolás szerint valóban a ${}^1\sum$ termnek a magtávolság függvényében minimuma van, míg a ${}^3\sum$ termnek nincs(**lazító állapot**), így az alapállapot a ${}^1\sum$ term. Vagyis alapállapotban a spin 0. Mind kiderül, a főcsoport elemeinek majdnem minden kémiailag stabil molekulája rendelkezik ezzel a tulajdonsággal. Azt, hogy az ilyen típusú, tisztán kvantummechanikai kötés(**kovalens kötés**, azaz mindkét atomra kiterjedő molekulapályák által alkotott kötés) a spinnel kapcsolatos, Heitler és London felfedezése volt. Ez teszi lehetővé a **vegyérték** fogalmának bevezetését. Egy atom vegyértéke egy atom spinjének kétszerese, ami a körülötte található elektronok spinjének összege. Atomok egyesülése során pedig a vegyértékeknek kölcsönösen telítődnie kell, vagyis egy atom minden vegyértékkötésének meg kell feleljen egy másik atom vegyértékkötése.

13. A magfizika alapjai(Grajzel Dániel)

13.1. Az izotóp térkép, atommagok kötési energiája, tömege, mérete

Az anyag atomokból, az atomok atommagot és elektronokat tartalmaznak. Az atom tömegének több, mint 99 százaléka, térfogatának pedig $\frac{1}{10^{14}}$ része az atommagban található.
Az atommag kísérletileg meghatározható tulajdonságai a mérete, tömege, elektromos töltése, a nukleonok eloszlása, a töltéseloszlás sugara, kötési energiája, spinje, paritása.
Az atommagok különböző, diszkért energiájú állapotokban létezhetnek. A legalacsonyabb energiájú állapot az alapállapot. Az elektromos töltés és a tömegszám azonos az alap és gerjesztett állapotokra, más tulajdonságok általában különböznek. A rendszám megegyezik a protonok számával, jele **Z**. A tömegszám egyenlő a protonok számának és a neutronok számának összegével:

$$\mathbf{Z} + \mathbf{N} = \mathbf{A}$$

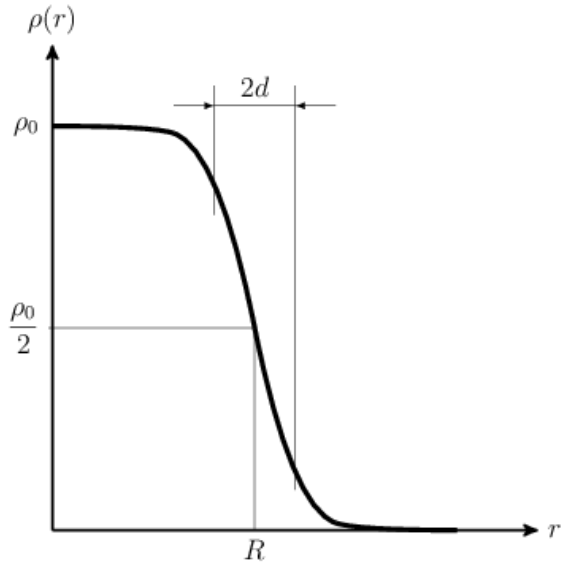
Az izotópoknak megegyezik a rendszámuk, de különböző a tömegszámok azaz a bennük található neutronok száma. Az izotónok azonos számú neutront tartalmaznak, de eltérő számú protont.
Az atommag véges kiterjedésére több kísérleti bizonyíték van:

- Rutherford-szórás
- α-bomló magok
- gyors neutronok diffrakciós szórása

A Rutherford-kísérlet csak felső korlátot tudott adni az atommagok méretére, megállapította, hogy az atommagok legalább tízezerszer kisebb sugarúak, mint maga az atom. Későbbi kísérletek alapján kiderült, hogy az atommag nem egy éles határvonallal rendelkező objektum, amelynek sugara pontosan definiálható lenne. Az atommagban lévő anyagsűrűség eloszlására viszonylag jó modellt ad a két paraméteres Fermi-függvény

$$\rho\left(r\right) = \rho_0 \cdot \frac{1}{1 + e^{\frac{r-R}{d}}}$$

Az atommag sugarán tehát az az R sugarat érthetjük, amelynél a középponti sűrűség a felére csökken. A felület diffuzitását a d paraméter mutatja meg. Az atommag nagyon kicsiny, ezért a sugár meghatározásának egyik



Az atom anyagának sűrűsége a sugár függvényében

módja az, hogy mikrorészecskéket, pl. elektront, alfa-részecskét stb., szóratunk az atommagon és a szórásképből következtetünk az atommag méretére. Itt mindenképp figyelembe kell venni a részecskék hullámtermészetét. A mérés felbontóképességét az alkalmazott részecske $\lambda = \frac{h}{p}$ de-Broglie hullámhossza korlátozza.
Az atommagon belüli töltések eloszlását legrészletesebben először Hofstädter vizsgálta nagy energiájú elektronok szórásával az '50-es évek második felében. A nagy energiájú, $(E > 100MeV)$, elektronok de-Broglie

hullámhossza a mag méreténél kisebb, ezért a szórás a töltéseloszlás részleteire is érzékeny. Hofstädter megállapította, hogy a stabil atommagok belsejében a töltések eloszlása jól leírható egy Fermi-eloszlással, amelynek az R sugárparamétere az atommag tömegszámával van szoros kapcsolatban:

$$R = r_0 \cdot \sqrt[3]{A}$$

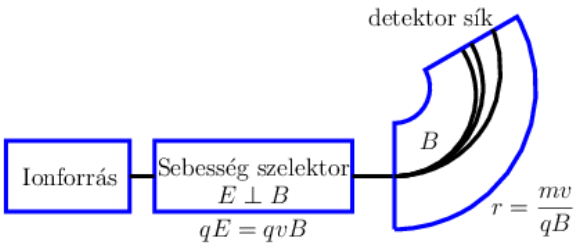
ahol $r_0 = 1,23 \cdot 10^{-15} m$ A 10^{-15} nagyságrendet az SI-rendszer femto előtaggal jelölik, a magfizikusok azonban Enrico Fermi tiszteletére ferminek nevezik.
Az atommagok tömegének ismerete alapvető elméleti és kísérleti jelentőségű. Egy (A, Z) összetételű atommag tömege kisebb, mint az őt alkotó protonok és neutronok tömegének összege.

$$M(A, Z) = Z \cdot m_{proton} + (A - Z) \cdot m_{neutron} - \Delta m$$

A Δm különbség, a tömeghiány, abból adódik, hogy az atommagban lévő részecskék kötött állapotban vannak és onnan a részecskéket kiszabadítani csak a kötési energia befektetésével lehet. Az Einstein-féle $E = m \cdot c^2$ összefüggésnek megfelelően a tömeghiány szoros kapcsolatban van a kötési energiával

$$E_{kotesi} = \Delta m \cdot c^2$$

Az atommagok tömegének pontos megmérésével tehát az atommagok kötési energiáját is meg lehet határozni. Részecskék tömegének meghatározási módszerét tömegspektroszkópiának, a meghatározásra alkalmas berendezéseket pedig tömegspektrográfnak nevezzük. Az ionforrásban a vizsgálandó anyagot ionizáljuk, majd egy



Tömegspektrográf vázlatos rajza

kihúzó feszültséggel az ionokat felgyorsítjuk, nyalábot formálunk belőle. A nyaláb egy ún. sebességszelektorba kerül, amely lényegében egymásra merőleges, homogén elektromos és mágneses térből áll. Azok a részecskék haladnak át irányváltoztatás nélkül, amelyekre:

$$qE = qvB$$

amiből:

$$v = \frac{E}{B}$$

tömegtől és töltéstől függetlenül, ezért hívják ezt az elrendezést sebességszelektornak. Az így beállított sebességű nyaláb egy szektor-mágneses térbe kerül, ahol a Lorentz-erő hatására a töltött részecskék körpályára állnak. A centripetális erőt a Lorentz-erő biztosítja, amiből

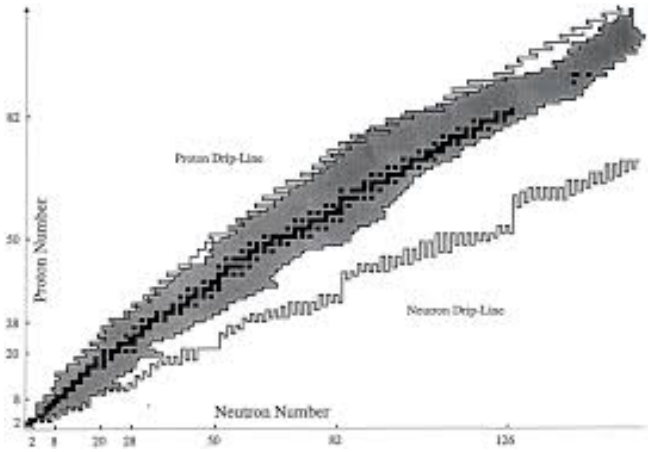
$$r = \frac{mv}{qB}$$

Egyes elrendezésekben a sebességszelektor a szektor mágneses tér kezdeti szakaszán van, azaz a sebességszelektorban használt mágneses tér kezdeti szakaszán van azaz a sebességszelektorban használt mágneses tér ugyanakkora, mint a részecskéket eltérítő tér. Ekkor kapjuk:

$$m = \frac{rqB^2}{E}$$

így a pályasugár mérésével a tömeg meghatározható. A jelenleg ismert több, mint 2000 atommag két nagy csoportra osztható: a stabil atommagok és a radioaktív atommagok csoportjára. Stabilnak nevezzük azokat az atommagokat, amelyek nem bomlanak el, pontosabban élettartama olyan hosszú, hogy a jelenlegi eszközeinkkel nem tudjuk bomlásukat kimutatni. A radioaktívak pedig azok, amelyek rövidebb-hosszabb idő alatt kimutathatóan elbomlanak.
Az atommagok kötött nukleon-rendszerek és csak bizonyos kötési energia befektetésével bonthatók szét. Mivel ez az energia nem áll rendelkezésre, ez akadályozza meg, hogy az atommagok létrejöttük után azonnal szétessenek összetevőikre.

Egy részecske kötési energiáján azt az energiát értjük, amit ahhoz kell befektetni, hogy az adott részecskét a kötésből kiszakítsuk és onnan végtelen távolra vigyük.
Az atommag kötési energiája az az energia, amit ahhoz kell befektetni, hogy az atommagot tejesen szétbontsuk alkotó elemeire és ezeket egymástól végtelen távolra elvigyük.
Az összes eddig ismert atommag rendszerezésére az izotóptérképet hívhatjuk segítségül. Ennek vízszintes tengelyén a neutronok száma, függőleges tengelyén a protonok száma van felmérve. Osszuk kis négyzetekre a síkot úgy, hogy az egész proton és neutronszámokhoz tartozzanak a négyzetek. Így minden izotóp egy négyzetben foglal helyet. Egy sorban mindig egy elem izotópjai helyezkednek el, egy függőleges oszlopban az azonos neutronszámot tartalmazó atommagok, az izotonok.



Izotóptérkép

A legnagyobb rendszámú elem melynek felezési ideje hosszabb a Föld életkoránál a 238-as U. Az izotóptérkép felső végét egyre alakítják napjaink magfizikai kísérletei. Az egyes izotópokhoz stabilitásuk mértékét rendelve (térben), megfigyelhető az ún. instabilitás völgye. Az izotóptérkép egy adott pontja, ahonnan fúziós reakciókkal nem jöhetnek létre nehezebb elemek, mivel:

- energetikailag itt a legstabilabbak az atommagok
- legkisebb az egy részecskére jutó tömeg
- legnagyobb az egy részecskére jutó kötési energia

13.2. Energia és tömegekvivalencia, tömegdefektus

Az atommag tömegét fentebb definiáltuk. A Δm különbség, tömeghiány vagy idegen szóhasználattal élve tömegdefektus abból adódik, hogy az atommagban lévő részecskék kötött állapotban vannak és onnan a részecskéket kiszabadítani csak a kötési energia befektetésével lehet. A tömeghiány és a kötési energia a már említett módon kapcsolatban állnak.
Egy Z rendszámú és A tömegszámú atommag tömeghiánya:

$$\Delta m = Z \cdot m_{proton} + (A - Z) \cdot m_{neutron} - m\,(A, Z) = \frac{E_{kotesi}}{c^2}$$

ahol az E_{kotesi} az adott atommag teljes kötési energiája.

13.3. A cseppmodell és a félempirikus kötési formula

A cseppmodellben az atommagot elektromosan töltött folyadékcsepphez hasonlítjuk. A folyadékcsepp és az atommag összehasonlításából kiderül, hogy mindkettő rövid hatótávolsággal rendelkezik $10^{-10} valamint 10^{-15} m$ és mindkét esetben vonzó kölcsönhatásról beszélhetünk, amely nem tesz különbséget a molekulák között és rövid távon taszítóvá válik. A folyadékcseppek esetén ez a Van der Waals kh., míg az atommag esetében a magerők. A kölcsönhatás hasonlósága tehát az oka a két objektum nagyfokú hasonlóságnak. A hasonlóságok egyik érdekes következménye az atommag anyagának, az ún. maganyagnak az atommag méretétől független, állandó sűrűsége. A maganyag sűrűsége:

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{A \cdot m_{nukleon}}{\frac{4}{3}R^3}$$

Használjuk ki az atommag sugarára és tömegszámára vonatkozó összefüggést, ekkor kapjuk:

$$\rho = \frac{m_{nukelon}}{\frac{4}{3}r_0^3}$$

Látható, hogy a tömegszám kiesik a képletből, az $m_{nukleon}$ pedig egyetlen nukleon tömegét jelenti. A maganyag sűrűségére nagyságrendi becslés is adható. A nukleontömeg $m_{nukleon} = 1,67 \cdot 10^{-27}kg$ és $r_0 = 1,2 \cdot 10^{-15}m$. Behelyettesítve azt kapjuk, hogy $\rho \approx 23 \cdot 10^{16}kg/m^3$. Az atommag sűrűsége tehát 13 nagyságrenddel nagyobb, mint az egyik legsűrűbb szilárd anyag, a platina.
Az atommag energiáját a cseppmodell alapján határozzuk meg, annak figyelembevételével, hogy az atommag energiáját az egy nukleonok energiájának összege adja meg.
A csepp belsejében minden részecskének több szomszédja van, több részecskéhez tud kötődni, ezért erősebben kötött állapotban van, mint a felszínen lévő részecskék.(Ilyen oka van a folyadékok felületi feszültségének is.) Ha minden nukleon "belső" nukleon lenne, akkor azonos energiával lenne kötve az atommagban, hiszen a rövid hatótávolságú magerők miatt csak a közvetlen környezetével áll kölcsönhatásban. Legyen egy ilyen nukleon kötési energiája e_b! A nukleon energiája tehát $-e_b$ Egy A nukleont tartalmazó atommag energiája tehát A-szor ekkora lenne. Az atommag energiájának ezen részét térfogati energiának nevezzük, mivel a benne lévő részecskék száma a mag térfogatával arányos. Azaz $E_V = -e_b \cdot A$. A negatív előjel mutatja, hogy ez az energia tag erősíti a kötést.
Az atommag felszínén lévő nukleonok száma az atommag felszínével arányos, ezért a felszín miatt bekövetkező energianövekedés nagysága

$$E_F = b_f \cdot 4\pi R^2$$

Ez a tag pozitív előjelű, hiszen a térfogati energiában a felszíni nukleonokat is belső nukleonként vettük száma, ezért a kötésüket túlbecsültük.
A protonok elektromos töltésüknél fogva taszítják egymást és így az atommag energiájának meghatározásakor a nukleáris energiatagok mellett egy Coulomb-energia is fellép. Felhasználva, hogy $Q = Ze$

$$E_C = b_C \frac{(Ze)^2}{R}$$

A Coulomb-energia gyengíti a kötést, tehát pozitív előjelű.
Még a cseppmodellben is figyelembe kell venni, hogy az atommag nem klasszikus objektum, hiszen a benne lévő részecskék de Broglie-hullámhossza az objektum méretével összemérhető, valamit, hogy a protonokra és a neutronokra érvényes a Pauli-elv. Utóbbi miatt egy energiaszinten legfeljebb két részecske lehet, ezért a protonok és neutronok számának eltérése többletenergiát eredményez. Egy N neutront és Z protont tartalmazó atommagban a protonoknál magasabb szintre szorult neutronok száma $(N - Z)$. Ugyancsak $(N - Z)$-vel arányos az egy neutronra jutó átlagos többletenergia is, mivel $(N - Z)$-vel arányosan magas szintig töltődnek be a többlet energiaszintek. Ezt a többletenergiát aszimmetria-energiának nevezzük és a következő módon tudjuk felírni:

$$E_A = e_a \frac{(N - Z)^2}{A} = e_a \frac{(A - 2Z)^2}{A}$$

A neutron-proton aszimmetria gyengíti a kötést, ezért az aszimmetria energia pozitív előjelű.
Az atommagok kötési energiájának tapasztalati vizsgálatából leszűrhető, hogy azok az atommagok, amelyekben valamelyik nukleon fajta páros számú, erősebben kötöttek, mint amelyekben páratlan számú található.
Párosság szempontjából a következő csoportokba sorolhatjuk az atommagokat:

- páros-páros magok: páros Z és páros N $\delta = 1$
- páros-páratlan magok $\delta = 0$
- páratlan-páratlan magok $\delta = -1$

itt Z a protonok számát, N pedig a neutronok számát jelenti. A pánenergia felléptének az az oka, hogy az atommagokban az azonos fajta nukleonok párokba kapcsolódnak. Ennek a párkölcsönhatásnak az az eredménye, hogy a több száz stabil atommag közül mindössze négy van olyan, amelyikben mindkét komponens páratlan számú. A pánenergia felléptét a cseppmodell nem tudja megmagyarázni, ennek kvantummechanikai oka van. Az energia számításakor azonban a következő tapasztalati képletet szoktuk használni:

$$E_P = e_p \cdot \delta \cdot A^{\frac{-1}{2}}$$

A tapasztalati e_p konstans negatív, mert páros-páros atommagok esetén a kötést erősíteni, páratlan-páratlanok pedig gyengíteni kell.

Az atommagok teljes energiáját tehát az öt tag összegeként kaphatjuk meg, amelyek az atommagok összetételének valamint az atommag sugarának függvényei:

$$E\left(Z,A,R\right)=-e_V\cdot A+b_F\cdot 4\pi R^2+b_C\cdot\frac{e^2Z^2}{R}+e_a\cdot\frac{\left(A-2Z\right)^2}{A}+e_p\cdot\delta\cdot A^{\frac{-1}{2}}$$

Felhasználva az $R=r_0\cdot\sqrt[3]{A}$ összefüggést az R-től való függést kiküszöbölhetjük:

$$E\left(Z,A\right)=-e_V\cdot A+e_F\cdot A^{\frac{2}{3}}+e_C\cdot\frac{Z^2}{A^{\frac{1}{3}}}+e_a\cdot\frac{\left(A-2Z\right)^2}{A}+e_p\cdot\delta\cdot A^{\frac{-1}{2}}$$

A képletben található konstansok empirikus úton meghatározottak, mindegyik $10^{-12}J$ nagyságrendbe esnek. Az atommag kötési energiája a fentiek alapján:

$$B\left(Z,A\right)=-E\left(Z,A\right)$$

Az 5 képletet Weizsäcker-féle félempirikus kötési energia formulának nevezik.

13.4. Maghasadás, magfúzió, radioaktivitás

Maghasadáskor egy nehéz atommag két közepes méretű atommagra hasad szét. Ez bekövetkezhet magától, ilyenkor spontán maghasadásról beszélünk vagy valamilyen külső behatásra pl. neutron elnyelését követően. A folyamatot úgy képzelhetjük el, hogy a kezdetben kissé deformált nehéz atommag megnyúlik majd befűződik és végül két részre szakad. A keletkezett részeket hasadványoknak nevezzük. A folyamatot nagy energia felszabadulása és néhány neutron kilépése szükségszerűen kíséri.
A magfizikában a makroszkopikus világban megszokott energiáknál sok nagyságrenddel kisebb energiák fordulnak elő. Ezért nem a szokásosan használt J egységet alkalmazzák, hanem egy jóval kisebb egységet az elektronvoltot. 1 eV energiát kap egy elemi töltésű részecske ha 1 V potenciálkülönbségen halad át.

$$1eV=1,6\cdot 10^{-19}J$$

A maghasadás energiaviszonyainak megértéséhez gondoljunk az atommagok energia-felületére. Amikor az anyag nagyot ugrik az energiavölgyön azaz a nehéz atommagokból maghasadással közepes tömegű atommagok keletkeznek, akkor minden nukleon mélyebben fekvő, erősebben kötött állapotba jut. Bár a völgynek ez a része lankás azaz egy-egy nukleonnak csak viszonylag kis, kb. 1 MeV energianyeresége származik az ugrásból, de a több mint 200 nukleon együttesen mégis jelentős energianyereséget jelent.
Tegyük fel, hogy egy Z rendszámú A tömegszámú atommag két egyenlő részre hasad. Ha $E\left(Z,A\right)$ jelenti a kiindulási atommag energiáját, akkor a maghasadás létrejöttének energia-feltétele az, hogy :

$$E\left(Z,A\right)-2E\left(\frac{Z}{2},\frac{A}{2}\right)>0$$

Felírva ezt a kifejezést, azonnal látható, hogy csak a felületi energia és a Coulomb-energia ad járulékot a különbségbe, a többi tag kiesik. Az eredmény:

$$e_C\left(\frac{Z^2}{A^{\frac{1}{3}}}\right)\left(1-2^{\frac{-2}{3}}\right)-e_FA^{\frac{2}{3}}\left(2^{\frac{1}{3}}-1\right)>0$$

Átrendezve kapjuk, hogy

$$\frac{Z^2}{A}>\frac{e_F}{e_c}\cdot\frac{2^{\frac{1}{3}}-1}{1-2^{\frac{-2}{3}}}$$

behelyettesítve a numerikus értékeket:

$$\frac{Z^2}{A}>18$$

Mivel a könnyű atommagoknál $A\approx 2\cdot Z$ ezért nagyjából a $Z>36$ rendszámtól kezdve a maghasadás energiafelszabadulással jár.
A maghasadáson alapuló energiatermelés folyamatosságát, önfenntartó képességét az biztosítja, hogy a maghasadás során egynél több neutron keletkezik, emiatt a neutronos láncreakció megvalósítható. A neutronokon alapuló láncreakció ötlete Szilárd Leótól származik.
A maghasadáson alapuló energiatermelés mellett a nukleáris energia felszabadításának másik útja a magfúzió. A fúzió során a periódusos rendszer elején lévő, kis rendszámú elemek egyesülnek, ami energiafelszabadulással

jár. Nagyobb tömegszámú, erősebben kötött atommag jön létre, és ezáltal kötési energia szabadul fel. A fúziót az atommagok elektrosztatikus taszítása gátolja, ezért csak valamekkora aktiválási energia befektetésével hozható létre. A Coulomb-gát a hidrogénizotópok esetén a lehető legkisebb, ezért ezeknek a fúziója aktiválható a legkönnyebben. A fúzió létrejöttét segíti az alagúteffektus és ezért kis valószínűséggel a Coulomb-gát alatti energiáknál is végbemehet.
A fúzióhoz két atommag szükséges, amelyek elegendően nagy sebességgel mozognak egymás felé. Sebességükből eredő mozgási energiájuknak kell fedezni a Coulomb-gát megmászásához szükséges energiát. Makroszkopikus méretű, láncreakcióra alkalmas módon történő mozgás csak hőmozgással tűnik megvalósíthatónak. Ezért a fúziós energiatermelés egyedüli járható útja jelenleg a termikus aktiválás. A termikus aktiváláshoz mintegy $10^7 - 10^8 K$ körüli hőmérséklet szükséges. Ezen a hőmérsékleten az anyag már teljesen ionizált állapotba kerül. Ezt az állapotot nevezzük plazmának. A plazma kifelé elektromosan teljesen semleges, mivel egyenlő számban tartalmaz elektronokat és pozitív ionokat. A plazma sok szempontból a közönséges gázokhoz hasonlítható, lényeges különbség azonban az, hogy a plazma jól vezeti az elektromosságot, míg a semleges gázok nem. A fúziós energiatermelés szempontjából legértékesebb reakciók a következők: A termikusan aktivált fúzió létrehozásához

$$
\begin{aligned}
{}^2_1\mathrm{H} + {}^2_1\mathrm{H} &\rightarrow {}^3_2\mathrm{He} + \mathrm{n} + 3,25\ \mathrm{MeV} \\
{}^2_1\mathrm{H} + {}^3_1\mathrm{H} &\rightarrow {}^4_2\mathrm{He} + \mathrm{n} + 17,6\ \mathrm{MeV}.
\end{aligned}
$$

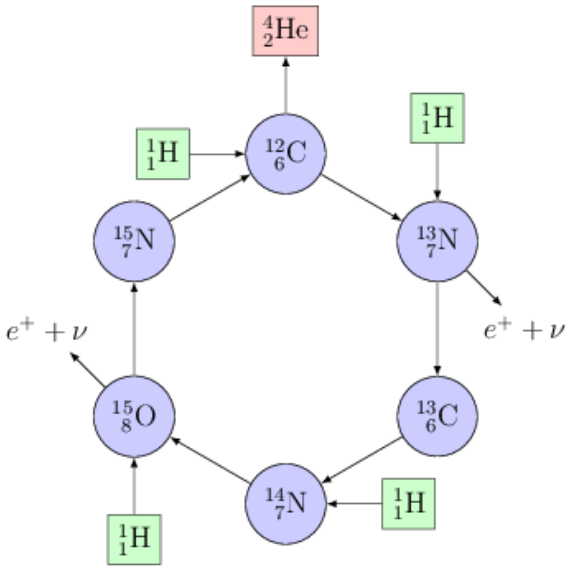
Fúziós reakciók

magas hőmérséklet $10^7 - 10^8 K$ szükséges. A csillagok belsejében az összegyűlt, hatalmas mennyiségű anyag gravitációs nyomása ellensúlyozni képes a sűrű, magas hőmérsékletű plazma nyomását. A csillag egyensúlyi módon, folyamatosan termeli az energiát a belsejében, hidrogénatomok fúziójával.
Elsőre lehetetlennek tűnik, hogy könnyű hidrogénnel fúziót lehessen megvalósítani, mert magfizikai okoknál fogva, két proton nem tud kötött állapotot létrehozni. A gyenge kölcsönhatás azonban segítségünkre van. Kis valószínűséggel az alatt a rövid idő alatt, amíg a két proton egymás közelében van végbemehet az egyik proton neutronná alakulása és a proton-neutron párból egy deutérium atommag létrejötte. A keletkezett pozitron szinte azonnal annihilál egy elektronnal. A keletkezett deuteron már gyorsan találkozik egy protonnal és fuzionál.Végül két trícium atommag fúziója fejezi be a hélium felépítését. Összegezve ezeket a folyamatokat végeredményben négy protonból lesz egy hélium atommag, közben két pozitron és két neutrínó is keletkezik:

$$
4\left({}^1_1\mathrm{H}\right) \rightarrow {}^4_2\mathrm{He} + 2e^+ + 2\nu,
$$

P-P ciklus összegzése

A csillagokban lévő, nagyobb rendszámú elemek a hidrogénfúzióban katalizátor szerepet kapnak.X A CNO ciklus és annak lépései: A körfolyamat végén visszakapjuk a szén-magot, de közben négy könnyű hidrogénből



A CNO ciklus

$$
\begin{aligned}
{}^{12}_{6}\mathrm{C} + {}^{1}_{1}\mathrm{H} &\rightarrow {}^{13}_{7}\mathrm{N} \\
{}^{13}_{7}\mathrm{N} &\rightarrow {}^{13}_{6}\mathrm{C} + e^+ + \nu \\
{}^{13}_{6}\mathrm{C} + {}^{1}_{1}\mathrm{H} &\rightarrow {}^{14}_{7}\mathrm{N} \\
{}^{14}_{7}\mathrm{N} + {}^{1}_{1}\mathrm{H} &\rightarrow {}^{15}_{8}\mathrm{O} \\
{}^{15}_{8}\mathrm{O} &\rightarrow {}^{15}_{7}\mathrm{N} + e^+ + \nu \\
{}^{15}_{7}\mathrm{N} + {}^{1}_{1}\mathrm{H} &\rightarrow {}^{12}_{6}\mathrm{C} + {}^{4}_{2}\mathrm{He}
\end{aligned}
$$

A CNO ciklus lépései

egy hélium és két neutrínó keletkezett.
Becquerel francia kutató felfedezte, hogy egyes elemek külső behatás és külső energiaforrás nélkül- energiát hordozó sugárzást bocsátanak ki. Ez egyszerre mondott ellen az addigi kémiai ismereteknek és az energia-megmaradásnak, hiszen ennek az átalakulásnak a során látszólag a semmiből keletkezik energia, amelyet az anyag nagy energiájú részecskék formájában kisugároz. Ezt a különleges jelenséget nevezték el radioaktivitásnak. 1895-ben Röntgen felfedezte, hogy léteznek olyan sugárzások, amelyek anyagokon áthatolnak. Ezt követően a kutatók azt kezdték keresni, hogy vajon vannak-e olyan foszforeszkáló ill. fluoreszkáló anyagok, amelyek ilyen nagy áthatolóképességű sugarakat bocsátanak ki magukból? Becquerel uránsók foszforeszkáló tulajdonságait vizsgálta és nagy áthatolóképességű sugárzást keresett. Azt a meglepő felfedezést tette, hogy az urán külső behatás és energiaforrás nélkül is nagy áthatolóképességű sugárzást bocsát ki, amely a fekete papírba csomagolt fényképezőlemezt is megfeketíti.
A radioaktív anyagok mennyisége időben fokozatosan csökken, hiszen a bomlásra képes atommagok egy része elbomlik. Az időegység alatt bekövetkezőbomlások számát aktivitásnak nevezzük. Jelöljük $N(t)$-vel a bomlásra képes atommagok számát a t időpillanatban, ekkor

$$\alpha = -\frac{N}{t}$$

A bomlásra képes atommagok száma csökken ezért a negatív előjel. A fenti definícióval az α aktivitás pozitív értékű. Az aktivitás egysége becquerel. A radioaktív forrás aktivitása egyenesen arányos az anyagban lévő,

bomlásra képes atommagok számával:

$$\alpha = \lambda \cdot N$$

Ahol λ a bomlás állandó, mértékegysége $\frac{1}{s}$. A mag- és részecskefizikában gyakran használják a bomlásállandó reciprokát:

$$\tau = \frac{1}{\lambda}$$

amely a bomló magok átlagos élettartamát adja meg. Az aktivitás az élettartammal is kifejezhető is kifejezhető:

$$\alpha = \frac{N}{\tau}$$

. Mivel a bomlásállandó kapcsolatban van a T felezési idővel az aktivitás a következőképpen is írható:

$$\alpha = \frac{ln2}{T} \cdot N$$

A radioaktív bomlás statisztikus jelenség, ezért törvényei gyakorlatilag csak nagyszámú atommag bomlására alkalmazhatók, egyes atommagok bomlására csak valószínűségi kijelentéseket tehetünk. Annak a valószínűsége, hogy egy kiszemelt atommag T felezési idő alatt elbomlik éppen $1/2$. Újabb T idő alatt bekövetkező bomlás valószínűsége ismét $1/2$ függetlenül attól, hogy az atommag mióta vár a bomlásra. A korábbi egyenletekből az el nem bomlott atommagok N számára elsőrendű differenciálegyenletet kapunk:

$$-\frac{dN}{dt} = \lambda \cdot N(t)$$

Ennek a megoldása:

$$N(t) = N_0 \cdot e^{-\lambda t}$$

Az N_0 konstans értelmezése: a függvény értéke a $t = 0$ kezdeti időpontban azaz a kezdetben meglévő atommagok száma.
Az exponenciális bomlástörvény egy másik, gyakran használt alakját úgy kapjuk meg, ha az e alapró 2-es alapra térünk át:

$$N(t) = N_0 \cdot 2\frac{-t}{T}$$

Az ebben az alakban szereplő T felezési idő és az előző képletben szereplő λ bomlásállandó nem függetlenek egymástól:

$$T = \frac{ln2}{\lambda}$$

13.5. Sugárzás és anyag kölcsönhatása

A radioaktív sugárzások energiája általában sokkal nagyobb, mint az anyagban lévő atomok vagy molekulák ionizáláshoz szükséges energia. Ezért ezek a sugárzások az anyagban megtett útjuk során ionokat keltenek, keltheetnek. Ionizáló sugárzásoknak nevezzük mindazokat a sugárzásokat, amelyek az anyagban ionokat hozhatnak létre. Az elektromosan töltött részecskék az anyagban haladva közvetlenül ionizálnak. Az elektromos töltés nélküli részecskék, pl. röntgen- vagy gamma-sugárzás csak közvetett módon ionizálnak: először valamilyen kölcsönhatás révén elektromosan töltött részecskéket keltenek, illetve ilyeneknek adják át az energiájukat és ezek ionizálják tovább az anyagot.
Az anyagok szerkezete elektromosan töltött részecskékből áll: pozitív elektromos töltésű, kis kiterjedésű atommagok, amelyeket negatív töltésű elektronok vesznek körül. Az atommagok térfogata a teljes térfogatnak mindössze 10^{-15} része. Ebből jól látszik, hogy bár a töltött részecskék az atommagokkal is kölcsönhatásba lépnek ez a kölcsönhatás azonban elhanyagolható valószínű az elektronokkal való kölcsönhatáshoz képest. Ha egy nagy energiájú elektromosan töltött részecske behatol az anyagba, a Coulomb-kölcsönhatás révén energiát ad át az anyagban lévő elektronoknak.
Az energia megmaradása miatt bejövő részecske energiája csökken, miközben energiát ad át az anyagnak. Minél messzebb hatolt egy részecske az anyagban, annál kisebb lesz a részecske energiája. Ez az energiacsökkenés addig folytatódik amíg a részecske végül meg nem áll, ill. amíg hőmérsékleti egyensúlyba nem kerül a közeggel.
Az energiaátadásnak a következő formái lehetnek:

- gerjesztés (at atomokban, molekulákban egyes elektronok magasabb energiájú állapotba kerülnek)
- ionizáció (elektronokat leszakít, ionok jönnek létre)
- rugalmas ütközés az atomokkal (az atomok mozgási energiát nyernek a bejövő részecskétől, a közeg felmelegszik)

- fékezési sugárzás (nehéz atommagok terében a könnyű töltött részecskék nagy gyorsulásra tesznek szert és ennek következtében elektromágneses sugárzást bocsátanak ki)

A legnagyobb energiaátadás centrális egyenes ütközéskor történik, ezért tegyük fel, hogy egy E_{kin} mozgási energiájú, M tömegű részecske tökéletesen rugalmasan, egyenesen ütközik egy m tömegű elektronnal. Az energia és lendületmegmaradás:

$$p(M) = p'(M) + p(m)$$

$$E_{kin}(M) = \frac{p(M)^2}{2M} = \frac{p'(M)^2}{2M} + \frac{p(m)^2}{2m} = E'_{kin}(M) + E_{kin}(m)$$

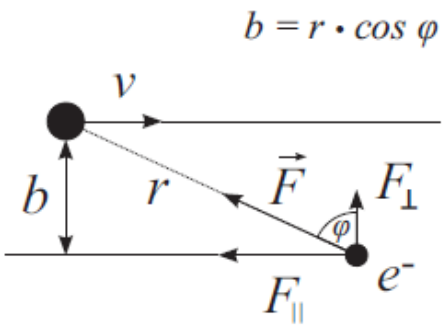
Ebből kapjuk, hogy a részecske mozgási energiájának megváltozása:

$$\Delta E_{kin}(M) = E_{kin}(M) - E'(M) = E_{kin}\frac{4Mm}{(M+m)^2}$$

Mivel $M >> m$ ezért $\Delta E_{kin} \approx \frac{4m}{M}$. Egy kb. 5 MeV energiájú alfa-részecske ezek szerint egyetlen ütközéskor legfeljebb 2,7 keV energiát képes veszíteni. Ebből a következőket vonhatjuk le:

- egy-egy ütközéskor átadott energia kicsi
- kicsi a lendületváltozás, ezért a részecske pályája az anyagban többé-kevésbé egyenes
- mivel a Coulomb-erő hosszú hatótávolságú, ezért a részecske egyszerre sok elektronnal áll kölcsönhatásban, ennek következtében az energiáját folytonos ütemben adja át
- az atomok, molekulák ionizációs energiája 10-100 eV tartományba esik
- sok olyan kölcsönhatás is van, amelyben az átadott energia kisebb, mint az atom ionizációs energiája, ennek következtében az anyagban gerjesztett atomok keletkeznek

A nehéz töltött részecskék az anyag elektronjainak adják át energiájukat. Tekintsük a következő ábrát és számítsuk ki, az elektron mellett elhaladó részecske mennyi energiát veszít. Az ionizációs energiaveszteség



Nehéz töltött részecske energia vesztesége

kiszámításához a következő közelítésekkel élünk:

- a nehéz részecske pályája egyenes
- a sebessége állandó $\Delta v << v$
- az elektron nem mozdul el $\Delta r_e << b$

Az ábra alapján felírhatjuk:

$$F = \frac{\Delta p}{\Delta t} \rightarrow \Delta p = F\Delta t \rightarrow \int \vec{F} dt = \Delta \vec{p}$$

Mivel azt feltételeztük, hogy a nehéz részecske sebessége állandó, így a párhuzamos komponens integrálja zérus.

$$p_e = \int F_\perp dt = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{ke^2 Z_\alpha}{r^2} \cdot cos(\phi)\, dt =$$

$$= \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} \frac{ke^2 Z_\alpha}{r^2} \cdot \frac{r}{v} d\phi = \frac{ke^2 Z_\alpha}{v} \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} \frac{1}{r} d\phi =$$

$$= \frac{ke^2 Z_\alpha}{v \cdot b} \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} cos\left(\phi\right) d\phi = \frac{2ke^2 Z_\alpha}{v \cdot b}$$

A meglökött elektron energiája:

$$E_e = \frac{p_e^2}{2 \cdot m_e} = \frac{4\left(ke^2\right)^2 Z_\alpha^2}{2m_e v^2 b^2} = \frac{2\left(ke^2\right)^2 Z_\alpha^2}{m_e v^2 b^2}$$

Tegyük fel, hogy az anyagban az elektronok közel homogén módon oszlanak el, ez esetben az anyagon áthaladó nehéz részecskéktől különböző távolságra lévő atomok különböző mértékben ionizálódnak. Adott b távolságra lévő elektronok egy hengerpalást mentén helyezkednek el, így tehát az elektronok száma b impakt paraméternél:

$$N\left(b\right) = n \cdot 2\pi b \cdot db \cdot dx$$

Ezek alapján a nehéz részecske energiavesztesége dx úthossz-egységenként:

$$dE\left(b\right) = -N\left(b\right) \cdot E_e = n \cdot 2\pi b \cdot db \cdot dx \cdot \frac{2\left(ke^2\right)^2 Z_\alpha^2}{m_e v^2 b^2}$$

Ekkor a teljes energiaveszteség megtett úthossz-egységenként:

$$\frac{dE}{dx} = -\frac{n \cdot 4\pi k^2 e^4 Z_\alpha^2}{m_e v^2} \int_{b_{max}}^{b_{min}} \frac{1}{b} db =$$

$$= -\frac{n \cdot 4\pi k^2 e^4 Z_\alpha^2}{m_e v^2} \cdot ln \frac{b_{max}}{b_{min}}$$

Minthogy $b_{max}/b_{min} = \sqrt{E_{min}/E_{max}}$ így:

$$\frac{dE}{dx} = -\frac{n \cdot 4\pi k^2 e^4 Z_\alpha^2}{m_e v^2} \cdot \frac{1}{2} \cdot ln \frac{E_{min}}{E_{max}}$$

Mivel E_{min} a legkisebb impakt-paraméterhez tartozó energiaátadás, megállapíthatjuk, hogy $E_{min} = 2m_e \cdot v^2$, hiszen az elektronnak az ütközés után legfeljebb 2v sebessége lehet. Hasonlóan állíthatjuk, hogy $E_{max} = I$, ionizációs energia, mert ennél kisebb energiát nem lehet átadni. Így a Bethe-Bloch formula:

$$\frac{dE}{dx} = -\frac{n \cdot 4\pi k^2 e^4 Z_\alpha^2}{m_e v^2} \cdot \frac{1}{2} \cdot ln \frac{2m_e v^2}{I}$$

Az elektromos töltés nélküli részecskék anyaggal történő kölcsönhatására jellemző, hogy ezek a részecskék csak igen kis valószínűséggel lépnek kölcsönhatásba az anyagban lévő részecskékkel. Ennek következtében az anyagban hosszú utat tudnak megtenni anélkül, hogy ütköznének vagy, hogy energiát vesztenének. Emiatt ezeknek a részecskéknek nagy a hatótávolsága, akár sokmillió atomréteg vastagságú anyagon is számottevő veszteség nélkül át tudnak haladni. A gamma-sugarak elsősorban az anyagban lévő elektronokkal lépnek kölcsönhatásba, azoknak adnak át energiát és az így előállt elektronok már töltött részecskeként adják át energiájukat a detektornak. Minden gamma-detektor csak a gamma-sugárzás által meglökött elektronok energiáját érzékeli. A gamma-sugárzás és az anyagban lévő elektronok kölcsönhatásában a következő három folyamat szerepe a legnagyobb:

- Compton-szórás
- fotoeffektus
- párkeltés

A Compton-szórás és fotoeffektus jelensége más tételben már említésre került.
A párkeltés az a folyamat, amikor egy nagy energiájú foton egy részecske-antirészecske párt kelt. Leggyakoribb az elektron-pozitron pár. Az energiaviszonyok párkeltéskor:

$$E_\gamma = \left(E_{kin}\left(e^+ + mc^2\right)\right) + \left(E_{kin}\left(e^- + mc^2\right)\right)$$

Az első zárójel a pozitron mozgási és nyugalmi energiáját tartalmazza, a második az elektronra ugyanezeket. Látható, hogy a bejövő foton energiájának legalább két részecske nyugalmi tömegével ekvivalens energiát kell fedeznie. A párkeltés létrejöttéhez a fotonon kívül szükség van még egy atommagra is, amelynek a Coulomb-terében jön létre a párkeltés. A bekövetkezés valószínűsége a rendszám négyzetével arányos.
A neutronok elektromosan semleges részecskék és ezért számukra az anyagban lévő sűrű elektronfelhő láthatatlan azaz szabadon áthatolnak rajta. A neutronok csak az anyagban lévő atommagokkal lépnek kölcsönhatásba többkevesebb valószínűséggel. A kölcsönhatás lehet rugalmas szóródás vagy atommag-reakció.

13.6. Radioaktív bomlások, magátalakulások

Ma már tudjuk, hogy radioaktív bomláskor az atomok középpontjában lévő atommagok alakulnak át. Az őket alkotó protonok és neutronok átrendeződnek és erősebben kötött állapotba kerülnek. A radioaktív sugárzás részecskéi az átalakulás során felszabaduló kötési energiából nyerik hatalmas energiájuk. Ezekben az átalakulásokban bizonyos fizikai mennyiségekre megmaradási törvények állnak fenn. Egy fizikai mennyiségre vonatkozó megmaradási törvény azt jelenti, hogy a végállapotban a részecskék megfelelő fizikai mennyiségeit összeadva ugyanannyit kell kapjunk, mint amennyi a kezdőállapotban volt. A következő háromnak jelentős szerepe van a radioaktív bomlások leírásakor:

- az elektromos töltés megmaradása
- a nehéz-részecske szám (barionszám) megmaradása
- a könnyű-részecske szám (leptonszám) megmaradása

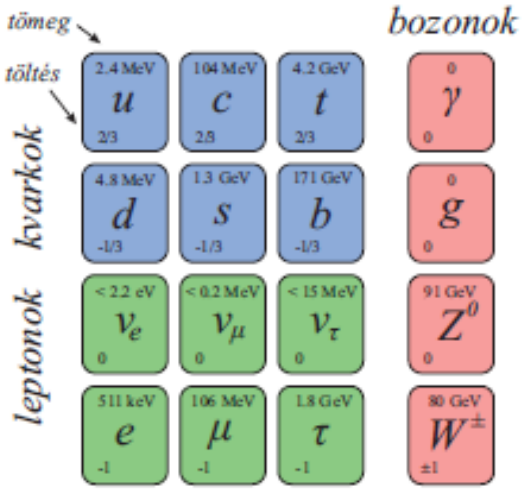
Az alfa-bomláskor kibocsátott részecskét alfa-részecskének nevezzük. Ez tulajdonképpen hélium-atommag, melyben 2 proton és 2 neutron van. Elektromos töltése tehát $+2$ és összesen 4 nehéz részecske van benne. Ezért az alfa-bomlás során egy Z protont és A nehéz részecskét tartalmazó atommagból $Z-2$ proton és $A-4$ bariont tartalmazó atommag jön létre. Ezek valamennyien nehéz részecskék, a leptontöltést tehát nem változtatják meg.
A béta-bomlásoknak három fajtája van: negatív és pozitív béta-bomlás valamint elektron-befogás. A negatív béta-bomlás során elektron keletkezik a könnyűrészecske szám megmaradási törvény miatt pedig ki kell bocsátódjon egy olyan könnyű részecske, amely elektromosan semleges viszont a leptonszáma -1. Ilyen tulajdonságai az anti-neutrínónak vannak.
Pozitív béta-bomlás során pozitron keletkezik és elektromosan semleges könnyű részecske, neutrínó.
Földi világunkban az atommagot sűrű elektronfelhő veszi körül. Ezért energetikailag kedvező esetben az atommag be tud fogni egy elektront az atomi elektronhéjból. A megmaradási törvények miatt egy neutrínó is kibocsátódik a folyamatosan tovább. Mivel a neutrínót roppant nehéz érzékelni, tehát ezt a folyamatot közvetlenül nem tudjuk megfigyelni. Közvetett megfigyelésre azáltal nyílik lehetőség, hogy az atommag által elnyelt elektron helye üresen marad az atomi elektronhéjban. Ebbe egy külső pályáról beugrik egy elektron és közben az atom a többlet energiát karakterisztikus röntgen-sugárzás formájában kisugározza. Ekkor az atommag töltése már $Z-1$ tehát a karakterisztikus röntgensugárzás hullámhossza is ilyen rendszámú atomra lesz jellemző.
A gamma-bomlás során az atommag elektromágneses sugárzást bocsát ki. Mivel a kisugárzott fotonnak mind az elektromos-, mind a barion-, mind pedig a leptontöltése (száma) nulla, ezért a gamma-bomlás során az atommag semmilyen összetevője nem változik meg. A kiindulási atommag egy magasabb energiájú állapotból egy alacsonyabb energiájú állapotba megy át és az energiakülönbséget elektromágneses sugárzás formájában kibocsátja. A sugárzás frekvenciájára érvényes a Planck-összefüggés:

$$h\nu = E_m - E_n$$

ahol $E_m > E_n$, az atommag kezdeti és végállapotának energiája.

13.7. Elemi részecskék és alapvető kölcsönhatások

A Standard Modellben jelenleg tizenkét alapvető építőelem szerepel, hat kvark és hat lepton. A különböző kvarkokat azok íznek nevezett kvantumszáma különbözteti meg egymástól. Ha a kvarkokat tömegük szerint növekvő sorrendbe állítjuk akkor a következő sorrendet kapjuk: up (u), down (d), strange (s), charm (c), bottom (b) és top (t). A leptonok pedig az elektron, müon és tau illetve ezek neutrínója.



A Standard Modell elemi részecskéi

Ezekből a részecskékből minden jelenleg ismert összetett részecske felépíthető. Az íz mellett a kvarkok rendelkeznek más kvantumszámokkal is, például a szín kvantumszámmal. Ennek ízenként 3 komponense lehet: piros, kék és zöld. A természetben csak olyan részecskéket detektálhatunk, melyek "színsemlegesek" azaz a bennük lévő színek a színkeverés szabályai alkalmazva fehéret adnak.
Az összetett részecskéket megkülönböztethetjük aszerint, hogy két vagy három kvarkból épülnek fel. A két kvarkból felépülő részecskéket mezonoknak, míg a három kvarkból felépülőket barionoknak nevezzük. A kvarkokból felépülő részecskék összefoglaló neve a hadron. A színsemlegesség miatt a mezonokban mindeg egy szín-antiszín páros található, míg a barionok esetén egy piros, egy kék és egy zöld kvark.
Az elemi részecskék között különböző kölcsönhatások léphetnek fel. A négy ismert kölcsönhatást közvetítő részecskét is az elemi részecskék közé sorolhatjuk: foton, gluon, W bozon, Z bozon.
Négy alapvető kölcsönhatás szerepel a Standard Modellben. Az erős kölcsönhatás a színes részecskék (kvarkok és gluonok) között hat és a gluonok közvetítik. E kölcsönhatást a kvantumszíndinamika írja le, mely egy lokális SU(6) szimmetriával rendelkező nem-Abeli mértékelmélet. Az erős kölcsönhatás jellegénél fogva bezáró kölcsönhatás, azaz a kvarkok között ható erő a távolsággal növekszik. Ez az oka a kvarkbezárás jelenségének, azaz hogy ma már nem találunk szabad kvarkokat. Nagyenergiás nehézion-ütközésekben azonban a kvarkok kiszabadulhatnak, ezt a színes állapotot kvark-gluon-plazmának nevezzük.
Az elektromágneses kölcsönhatást a foton közvetíti és minden elektromosan töltött részecske részt vesz benne.
A gyenge kölcsönhatást a W^+,W^- és Z^0 bozonok közvetítik és minden fermionra hat. A kölcsönhatást közvetítő részecskék nagy tömegűek így a kölcsönhatás rövid hatótávolságú. Ez az egyetlen kölcsönhatás amely képes a kvarkok ízét megváltoztatni és a neutrínók csak ebben a kölcsönhatásban vesznek részt.
A gravitációs kölcsönhatást a kvantumtérelméleti leírásokban a graviton közvetíti és minden tömeggel rendelkező részecske részt vesz benne. Az elmélet azonban feltehetően nem működik kis távolságokon és a hipotetikus gravitont sem fedezték még fel, így e kölcsön hatást nem szokták a Standard Modell kölcsönhatásai közé sorolni.

13.8. Kísérleti eszközök

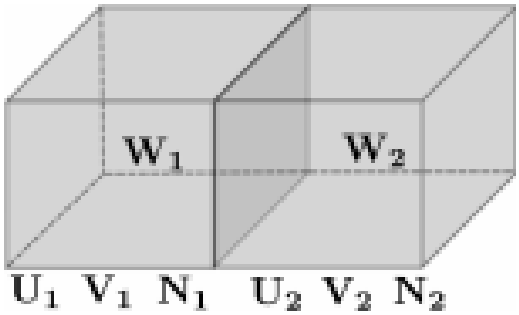
A mag- és részecskefizika kísérletek elvégzéséhez általában különleges eszközökre van szükségünk. E fejezetben elsősorban a különféle detektorok ismertetése olvasható. A deteketorokat működési elvük alapján többféle csoportba oszthatjuk.
A gáztöltésű detektorok általános működési elve: a detektoron áthaladó részecske a detektorban lévő gázt ionizálja. Az ionizáció során leszakadt elektronok ezután a detektor elektromos terében az anódszálra gyűlnek, ahol elektromos impulzusként észlelhetjük őket. Attól függően, hogy a detektorra kapcsolt feszültség mekkora, és ennek következtében milyen további folyamatok zajlana a detektorban, különböző típusú gáztöltésű detektorokat említhetünk. Az ionizációs kamra esetén a detektorra kapcsolt feszültség kicsi, így a leszakadt

elektronok nem tudnak tovább ionizálni. Ekkora a jel arányos az ionizációval. A proporcionális kamrák esetén a nagyobb feszültség következtében elektron-lavina alakul ki a szál közelében, melyet aztán érzékelni tudunk. A Geiger-Müller-cső esetén a detektorra akkora feszültséget kapcsolunk, hogy az egész hengerben önfenntartó lavina jön létre, azaz mindig egy adott nagyságú jelet kapunk. E detektortípus nem alkalmas energiamérésre, csak érzékeny számlálásra.
A félvezető detektorok esetén az áthaladó részecske hatására elektron-lyuk párok keletkeznek, melyek a rákapcsolt feszültség hatására kimennek az elektródákra, ahol aztán detektálhatjuk őket. Ezen detektorok hátránya, hogy a hőmozgás csökkentése érdekében hűteni kell őket.
A szcintillációs detektorok esetén az áthaladó töltött részecske a szcintillációs lapon fényvillanást kelt, melyet azután fotoelektron-sokszorozók segítségével erősíthetünk mérhető jellé. Fontos, hogy a szcintillátor anyaga a saját kibocsátott fotonjaival szemben átlátszó kegyen.
A vizuális detektorok közé sorolhatjuk a ködkamrát és a buborékkamrát. A ködkamrában az áthaladó ionizáló részecskék ionokat hoznak létre, melyek jó kondenzációs magvak, így a túltelített víz- vagy alkoholgőz ezeken a részecskéken csapódik ki, láthatóvá téve útjukat. A buborékkamrában folyadék található kicsivel a forráspont alatt, majd egy dugattyúval csökkentjük a nyomást, aminek következtében a folyadék a forráspont fölé kerül. Az áthaladó részecskék ionizálnak, körülöttük buborékok keletkeznek. Előnye, hogy 100 %-os detektálási hatékonysággal rendelkezik, hátránya a lassúsága.

14. A termodinamika statisztikus alapozás(Grajzel Dániel)

14.1. Mikrokanonikus, kanonikus, nagykanonikus sokaság

Egyazon makroszkopikus állapot összes lehetséges mikroszkopikus állapotainak halmazát sokaságnak nevezzük. Ha egy termodinamikai rendszer U, V, N értékeit lerögzítjük, azt mondjuk, hogy a rendszer mikrokanonikus sokaságban van, az ilyen rendszert hívjuk zárt rendszernek. Alapvetése az egyenlő valószínűségek elve, azaz hogy a rendszer az összes megengedett állapotot azonos valószínűséggel veszi fel. A statisztikus fizika segítségével keressük a választ arra kérdésre, hogy az S entrópia hogyan függ az U, V, N értékektől azaz $S = S(U, V, N)$ függvényt. Ha ezt a kapcsolatot ismerjük, akkor a rendszer minden makroszkopikus jellemzőjét ki tudjuk számítani.
Legyen W azon mikroállapotok száma, amelyek az adott U, V, N sokaságban megengedettek a 6N dimenziós állapotérben. Mivel a sokaság összes pontja ugyanolyan valószínűséggel látogatott az entrópia értéke csak a lehetséges mikroállapotok számától függhet: $S = f(W)$. Határozzuk meg ezt a függvényalakot, ehhez vizsgáljuk a következő rendszert: Mivel U, V, N extenzív mennyiségek ezért: $U = U_1 + U_2$, $N = N_1 + N_2$, $V = V_1 + V_2$,



A vizsgált rendszer

ugyanez igaz az entrópiára is $S = S_1 + S_2$. Mindkét alrészre igaz lesz, hogy $S_i = f(W_i)$.
Itt W_i a termodinamikai rendszer azon mikroállapotainak a száma, amelyet rögzített U_i, V_i, N_i értékek esetén kapunk. A teljes rendszer mikroállapotainak a száma: $W = W_1 \cdot W_2$.

$$S = f(W) = f(W_1 \cdot W_2) = f(W_1) + f(W_2)$$

által egy feltételt kapunk a keresett függvényünkre. Deriváljuk W_1 majd W_2 szerint a másik változót konstansnak tartva mindig.

$$W_2 f'(W_1 W_2) = f'(W_1)$$
$$W_1 f'(W_1 W_2) = f'(W_2)$$

A két egyenletet osszuk el egymással és szorozzunk át:

$$W_2 f'(W_2) = W_1 f'(W_1)$$

Tegyük fel, hogy $W_1 = 1$ és $W_2 = W$, ebből adódik :

$$W f'(W) = f'(1) = konst. = k$$

ez pedig egy elsőrendű szétválasztható differenciálegyenlethez vezet:

$$df(W) = k\frac{dW}{W}$$

ennek megoldása:

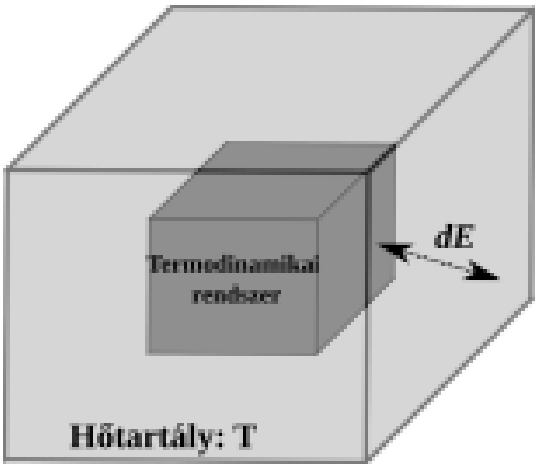
$$f(W) = k \cdot lnW + C$$

ahol C egy határozatlan integrálási állandó, aminek értéke az entrópia additivitása miatt 0 kell legyen. Megkaptuk tehát a keresett összefüggést a releváns termodinamikai potenciál és a rendszerben megengedett mikroállapotok száma között:

$$S = k \cdot lnW$$

Ez a Boltzmann-képlet, k a Boltzmann-állandó, értéke $k = 1,38 \cdot 10^{-23} J/K$. A Boltzmann-képlet kivételes fontosságú a statisztikus fizika számára. Ez az első olyan általánosan érvényes képlet, amely a rendszer mikroszkopikus tulajdonságait jellemző mennyiséget összeköti egy makroszkopikus mennyiséggel. Mikrokanonikus

sokaságban lévő rendszer esetén azt kell tehát meghatározni, hogy a lerögzített U, V, N paraméterek mellett, mennyi a megengedett állapotok W száma.
A mikrokanonikus sokaság esetén említettük, hogy a megengedett mikroállapotok egyenértékűek (azonos valószínűséggel realizálódnak) és a mikroállapotok száma a rögzített energiaérték miatt korlátozott. A mikrokanonikus sokaság azonban nem a leghasznosabb ugyanis gyakran nehéz lerögzített energia mellett a mikroállapotok számát meghatározni. A leghasznosabb sokaság az amelyben a (T, V, N) értékeket rögzítjük, ezt hívjuk kanonikus sokaságnak, ez tulajdonképpen a hőtartály statisztikus fizikai modellje. Kanonikus sokaságban a releváns termodinamikai potenciál a szabadenergia, F. Ilyen esetben is egy összefüggést keresünk a rendszer mikroszkopikus tulajdonságai és a szabadenergia között.
Tekintsünk egy zárt termodinamikai rendszert, amely kanonikus sokaságban van vagyis kapcsolatban van egy hőtartállyal, amely állandó T értéken tartja a rendszer hőmérsékletét. A hőtartály jóval nagyobb, mint a vizsgált rendszer vagyis hőcsere során a hőtartály hőmérséklete nem változik, így a hőtartályból és a vizsgált rendszerből álló, elszigetelt együttes rendszer mikrokanonikus sokaságba kerül. Vezessük be a következő jelöléseket:



A vizsgált rendszer kanonikus sokaságban

- V_0: a hőtartály és a termodinamikai rendszer együttes térfogata
- E_0: a hőtartály és a t. rendszer együttes energiája
- T: a hőtartály hőmérséklete
- V: a rendszer térfogata
- N: a termodinamikai rendszerben lévő részecskék száma
- E: a t. rendszer energiája
- E_h: a hőtartály energiája

A részecske szám és a térfogat mind a t. rendszerben, mind a hőtartályban állandó. Ami fluktuálhat az a termodinamikai rendszer energiája. A t. r. és a hőtartály belső energiája külön-külön nem állandó, viszont az összegük igen. Tegyük fel, hogy a hőtartály sokkal nagyobb, mint a t.r. $E << E_h$.
Tekintsük az egyszerűség kedvéért azt, hogy az energiák csak egy diszkrét halmazból vehetnek fel értékeket. Számítsuk ki, mi annak a valószínűsége, hogy a t. r. energiája egy adott E érték, jelöljük $P(E)$-vel. Annak a valószínűsége, hogy a t. rendszer energiája E, ugyanakkora, mint annak a valószínűsége, hogy a hőtartály energiája $E_0 - E$ legyen:

$$P(E) = P_h(E_0 - E)$$

mivel a két véletlenszerű esemény egy és ugyanaz. Mivel a hőtartály+t. r.-ből álló rendszer mikrokanonikus, ez a valószínűség arányos az ennek az esetnek megfelelő mikroállapotok számával:

$$P(E) = P_h(E_0 - E) \sim W(E, E_0 - E) = W_{t.r.}(E) \cdot W_h(E_0 - E)$$

ahol $W(x)$-el jelöltük a hőtartály+t.r azon mikroállapotainak a számát, amikor a rendszer energiája x, $W_{t.r.}(x)$ a t. r. azon mikroállapotainak száma, amikor az energiája x és $W_h(x)$ a hőtartály azon mikroállapotainak a

száma, mikor az energiája x. Mivel a hőtartály közel mikrokanonikus, alkalmazhatjuk a Boltzmann-képletet és következik, hogy

$$ln\left[W_h\left(E_0-E\right)\right]=\frac{S_h\left(E_0-E\right)}{k}$$

$$W_h\left(E_0-E\right)=e^{\frac{S_h(E_0-E)}{k}}$$

Mivel $E << E_0$, az entrópia sorba fejthető az E_0 pont körül:

$$S_h\left(E_0-E\right)\approx S_h\left(E_0\right)-\frac{\partial S_h\left(E_0\right)}{\partial E_0}E+\frac{\partial^2 S_h\left(E_0\right)}{\partial E_0^2}E^2$$

Használjuk fel, hogy $\left(\frac{\partial S}{\partial U}\right)_{V,N}=\frac{1}{T}$ és hanyagoljuk el az elsőrendűnél magasabb tagokat:

$$S_h\left(E_0-E\right)\approx S_h\left(E_0\right)-\frac{E}{T}$$

ezt helyettesítsük vissza a hőtartály mikroállapotainak számát kifejező egyenletbe:

$$W_h\left(E_0-E\right)=e^{\frac{S_h(E_0)}{k}-\frac{E}{kT}}$$

Annak a valószínűsége, hogy a t. r. E energiával rendelkezzen egy adott pillanatban:

$$P\left(E\right)\sim W_{t.r.}\left(E\right)\cdot e^{\frac{S_h(E_0)}{k}}\cdot e^{\frac{-E}{kT}}$$

Több olyan mikroállapot is létezhet, ahol a t. rendszer energiája E, így a kapott valószínűség arányos kell legyen ezen mikroállapotok számával, ami nem más, mint $W_{t.r.}\left(E\right)$. Ebből megkapható az a P_i valószínűség, hogy a termodinamikai rendszer egy konkrét, i. mikroállapotban van:

$$P_i\left(E_i\right)=\frac{P\left(E_i\right)}{W_{t.r.(E_i)}}\sim e^{-\frac{E_i}{kT}}$$

mivel az $e^{\frac{S_h(E_0)}{k}}$ konstans.
Mivel az az esemény, hogy a t. r. valamelyik lehetséges mikroállapotban van biztos esemény ezért:

$$\sum_{i=1}^{W}P_i\left(E_i\right)=1$$

A normálási feltételt felhasználva megkapjuk az arányossági tényezőt a valószínűséget kifejező képletben.

$$\sum_{i=1}^{W}C\cdot e^{-\frac{E_i}{kT}}=1$$

A C kiemelhető a szumma elé és egyszerű osztással megkapjuk, így a P_i-ra már nem csak egy közelítő képletünk lesz:

$$P_i\left(E_i\right)=\frac{1}{\sum_{i=1}^{W}e^{-\frac{E_i}{kT}}}\cdot e^{-\frac{E_i}{kT}}$$

A nevezőt Z-vel szoktuk jelölni és állapotösszegnek nevezzük. Ennek hasonló szerepe lesz, mint a W mikroállapotok számának a mikrokanonikus sokaságban.
A kanonikus sokaságban a különböző energiaértékekhez tartozó mikroállapotok valószínűsége nem ugyanaz, ezért nem elegendő, ha tudjuk a mikroállapotok számát. A keresett függvénykapcsolat az $F=F\left(Z\right)$, mivel az állapotösszeg tartalmazza a mikroállapotok számát és valószínűségét. A szabadenergia kiszámításához szükséges a belső energia és az entrópia:

$$F=U-TS=<E>-TS$$

A belső energia nem más, mint a rendszer energiájának időbeli átlaga, amely kiszámítható:

$$<E>=\sum_{i=1}^{W}P_iE_i=\sum_{i=1}^{W}\frac{1}{Z}E_ie^{-\beta E_i}$$

Az entrópia kiszámítására használjuk a Neumann v. Shannon-féle entrópia képletet:

$$S=-k\sum_{i=1}^{W}P_i\cdot lnP_i$$

helyettesítsük be a P_i valószínűségek alakját:

$$S = -k \sum_{i=1}^{W} \frac{1}{Z} e^{-\beta E_i} \cdot ln \left(\frac{e^{-\beta E_i}}{Z} \right)$$

használjuk ki a logaritmus tulajdonságait:

$$S = -\frac{k}{Z} \sum_{i=1}^{W} (-\beta E_i) e^{-\beta E_i} + \frac{k}{Z} \cdot ln(Z) \sum_{i=1}^{W} e^{-\beta E_i}$$

Használjuk fel az állapotösszeg és $< E >$ definícióját és a következő alakra jutunk:

$$S = \frac{1}{T} < E > + k \cdot lnZ$$

Az entrópia segítségével kiszámítható a szabadenergia:

$$F = U - TS = < E > - T \left(\frac{1}{T} < E > + k \cdot lnZ \right) = -kT \cdot lnZ$$

Ez tehát a keresett összefüggés a rendszer makroszkopikus tulajdonságait jellemző termodinamikai potenciál és a mikroszkopikus tulajdonságokból kiszámított állapotösszeg között.
Ha a hőátadáson kívül még a részecskék is kicserélődhetnek a rendszer és környezete között, akkor egy Legendre-transzformációval adódik az úgynevezett nagykanonikus potenciál:

$$\phi(T, V, \mu) = E - TS - \mu N = -pV$$

megváltozása:

$$d\phi = -SdT - PdV - \mu dN$$

Ω a mikroállapotok számát jelöli egy E körüli energiasávban:

$$\Omega(E, \delta E) = \omega_0(E + \delta E) - \omega_0(E) = \frac{1}{h^{3N} N!} \int_{E \leq H \leq E + \delta E} dq^{3N} dp^{3N}$$

Legyen $\rho_N(q, p)$ annak a valószínűsége, hogy a rendszerben részecske van és a (q,p)-vel jelzett fáziscellának megfelelő mikroállapotban van:

$$\rho_N(q, p) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_N(q,p) - \alpha N}$$

Ahol Z a nagykanonikus állapotösszeg folytonos esetben:

$$Z = \sum_{N=0}^{\infty} \int \frac{dpdq}{h^{3N} N!} e^{-\beta E_N(q,p) - \alpha N} = \sum_{N=0}^{\infty} e^{-\alpha N} Z_N$$

ahol Z_N az N részecskét tartalmazó rendszer kanonikus állapotösszege és megjelent a környezet hőmérsékletére és kémiai potenciáljára jellemző:

$$\beta = \frac{1}{k_B T}$$

és

$$\alpha = -\beta\mu = \frac{\mu}{k_B T}$$

Diszkrét esetben pedig:

$$Z = \sum_{i=1}^{N} e^{-\beta E_i - \alpha N_i}$$

A nagykanonikus potenciált megadó összefüggés egykomponensű rendszer esetén:

$$\phi = U - TS - \mu N = < E > - TS - \mu < N >$$

Ismerve a mikroállapotok valószínűségét és energiáit:

$$< E > = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{Z} E_i \cdot e^{-\beta E_i - \alpha N_i}$$

A mikroállapotok valószínűségeinek az ismeretében az entrópia kiszámítására a Shannon-képletet felhasználva és a valószínűségeket behelyettesítve:

$$S = -k \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{Z} e^{-\beta E_i - \alpha N_i} \cdot ln \frac{e^{-\beta E_i - \alpha N_i}}{Z}$$

Az átlagos energiához hasonlóan az átlagos részecskeszám is kiszámítható:

$$< N >= \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{Z} N_i e^{-\beta E_i - \alpha N_i}$$

Behelyettesítve ezeket a kifejezéseket a nagykanonikus potenciál alakjába:

$$\phi = -kT \cdot lnZ$$

14.2. Mikroállapotok fogalma, Boltzmann-entrópia, egyszerű alkalmazások

A mikroszkopikus állapotok a teljes részletességgel leírt állapotai a rendszernek. Tulajdonképpen adott makroszkopikus állapottal kompatibilis belső állapotot jelentenek. Kvantummechanikai rendszerek esetén, például független lineáris oszcillátorok rendszere, a mikroállapot megadása az az oszcillátorok kvantumszámai összességének a megadását jelenti. Ilyenkor amikor választok egy mikroállapotot akkor kiválasztok ezzel egy hullámfüggvényt is. Definiálható ilyen rendszereknél a multiplicitás Ω: hány mikroállapottal tudok megvalósítani egy adott energiaszintet, azaz megadja egy adott energiaszint elfajultságának a számát. Egy klasszikus mechanikai rendszer mikroállapota a 6N dimenziós állapottér vagy fázistér bármely megengedett pontja. Egy mikroállapotban adott az összes részecske helyzete és impulzusa. A fázisteret felosztjuk fáziscellákra, azaz a mikroállapotok folytonos halmazát diszkretizáljuk. A fáziscella mérete becsülhető a Heisenberg-féle határozatlansági relációval, a q és p koordináta és impulzus el van kenve: $\Delta p \Delta q \sim h$, tehát a fáziscellát Planck-állandónak választjuk. A makroállapotok a makroszkopikusan mérhető mennyiségek értékei által adottak (pl. nyomás, térfogat). Nagyon sok mikroállapotot nem lehet makroszkopikusan megkülönböztetni egymástól, ennélfogva egy makroállapotnak nagyon sok mikroállapot felelhet meg. A 6N dimenziós cellák méretét úgy választjuk meg, hogy a formulák később összhangban legyenek a kvantummechanikai képletekkel. Ehhez a cellatérfogatot h^{3N}-nek célszerű választani.
A fázistérfogat a következőképpen írható fel, olyan állapotokra, melyek energiája kisebb, mint E:

$$\Gamma(E) = \int ... \int dq_1 ... dq_f dp_1 ... dp_f$$

Így az adott energiánál kisebb energiájú mikroállapotok száma: $\frac{1}{h^f}\Gamma(E)$. A multiplicitás klasszikus megfelelője:

$$\Omega(E, \Delta E) = \frac{1}{h^f} \left[\Gamma(E + \Delta E) - \Gamma(E)\right]$$

A Boltzmann-entrópia a mikrokanonikus sokaságnál le van írva.

14.3. Az egyensúly stabilitása, fluktuációk

A Boltzmann-entrópia definíciójából következik, hogy kanonikus sokaság esetén az állapotsűrűség:

$$\Omega(E) = e^{\frac{S}{k_B}}$$

Az állapotösszeget az állapotsűrűséggel is kifejezhetjük:

$$Z = \int_0^\infty e^{-\beta E} \Omega(E) \, dE$$

ezeket, valamint a szabadenergia definícióját ($F = -k_B T lnZ$) felhasználva felírhatjuk az állapotösszeget az állapotsűrűség segítségével:

$$Z = e^{-\beta F} = \sum_l e^{-\beta E_l} = \int_0^\infty e^{-\beta E} \Omega(E) \, dE = \int_0^\infty e^{-\beta E + \frac{S}{k_B}} dE$$

Az integrandus egy tüskeszerű függvény ami azt jelenti, hogy gyakorlatilag csak a maximum környéke ad járulékot az integrálba. Legyen E^* az integrandus maximuma! Fejtsük sorba másodrendig a maximum körül:

$$e^{-\beta F} = \int_0^\infty e^{-\beta(E-E^*+E^*)+\frac{S(E-E^*+E^*)}{k_B}} dE$$

$$\approx e^{-\beta E*+\frac{S(E^*)}{k_B}} \int_0^\infty e^{\frac{1}{2k_B}S''(E^*)(E-E^*)^2}$$

Az integrandus értéke 0-nál kicsi, mivel E^* nagy, ezért az integrál alsó határa $-\infty$-nek is választható.
Az entrópia második deriváltja:

$$\frac{\partial^2 S}{\partial E^2} = -\frac{1}{T^2}\frac{\partial T}{\partial E} = -\frac{1}{T^2}\cdot\frac{1}{C_v}$$

Helyettesítsük be ezt a fenti integrálba és egy $T^2C_vk_B$ szórású Gauss-eloszlást kapunk. Az eloszlás szórása éppen az energia szórása egy T hőmérsékletű rendszerben:

$$\sigma_E^2 =< H^2 > - < H >^2 = T^2C_vk_B$$

Az ideális gáz fajhője, rögzített részecskeszám mellett, konstans:

$$C_v = \frac{3}{2}Nk_B$$

Ez azt jelenti, hogy az ideális gáz energiájának szórása a részecskeszám négyzetgyökével arányos, relatív szórása pedig: $\frac{E}{\sigma_E} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}$. Tehát az ideális gáz energiájának eloszlása annál élesebb, minél nagyobb a részecskeszám, másképp kifejezve minél több részecskéből áll a gáz, annál stabilabb az egyensúlyi állapota.

14.4. Maxwell-féle sebességeloszlás

A Maxwell-féle sebességeloszlás megadja, hogy néz ki a molekulák sebességének $f(\vec{v})$ valószínűségi sűrűségfüggvénye. Tegyük fel, hogy a molekulák sebességkomponenseinek eloszlása egymástól független, így a sűrűségfüggvény három, a v_x, v_y, v_z sebességkomponensekre vonatkozó sűrűségfüggvény szorzataként áll elő, azaz $f(\vec{v}) = f_1(v_x)\cdot f_2(v_y)\cdot f_3(v_z)$, A kinetikus gázelmélet harmadik felvetését felhasználva, mely szerint a molekuláknak nincs kitüntetett mozgási iránya, azaz a mozgásuk izotrop, f csak a sebesség nagyságától függhet. Variációs elv segítségével belátható, hogy mindhárom komponens sűrűségfüggvénye $f_i = \varphi(\xi)$ ahol $\varphi(\xi) = Ae^{-\alpha\xi^2}$ így a teljes sűrűség függvény e három szorzata lesz: $f(v_x, v_y, v_z) = A^3e^{-\alpha v^2}$, ez pedig valóban csak a sebesség nagyságának a függvénye.
A függvény két állandót tartalmaz, melyeket meg kell határoznunk. Az A-t a normálási feltételből határozhatjuk meg, ami azt fejezi ki, hogy a molekulák egyes sebességkomponensei valamilyen értéket biztosan felvesznek a $-v_{max}$ és v_{max} között. Felhasználva, hogy a $\varphi(\xi)$ függvény exp. levág, kiterjeszthetjük az integrálási határokat.

$$\int_{-\infty}^{\infty} Ae^{-\alpha v_x^2}dv_x = A\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = 1$$

A másik állandót, α-t onnan kapjuk meg, ha vesszük sebesség várhatóértékét és összevetjük a kinetikus energia átlagával.

$$\bar{v^2} = \bar{v_x^2} + \bar{v_y^2} + \bar{v_z^2} = 3\bar{v_x^2}$$

mivel nincs kitüntetett irány.

$$\bar{v_x^2} = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha v_x^2}v_x^2dv_x = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}2\frac{\sqrt{\pi}}{4\sqrt{\alpha}\alpha} = \frac{1}{2\alpha}$$

$$\alpha = \frac{1}{2\bar{v_x^2}} = \frac{3}{2}\frac{1}{\bar{v^2}} = \frac{3}{2}\frac{m}{3kT} = \frac{m}{2kT}$$

Ezzel a sűrűségfüggvény:

$$f(v_x, v_y, v_z) = f(v) = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} e^{\frac{-mv^2}{2kT}}$$

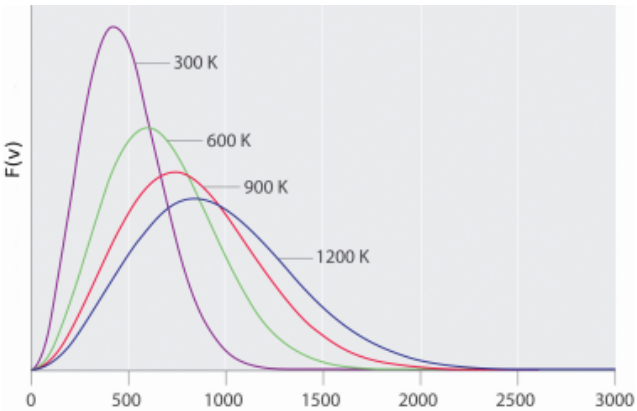
A $\vec{v}$ sebességgel rendelkező molekulák száma tehát: $dN = Nf(v)\,dv_xdv_ydv_z$. Ha arra vagyunk kíváncsiak mennyi azon molekulák száma amelyek adott nagyságú sebességgel rendelkeznek akkor össze kell adnunk azokat a molekulákat, amelyek sebességének iránya különbözik, de nagyságuk ugyanaz. Ezek a sebességtérben egy v sugarú gömb dv vastag gömbhéjában helyezkednek el. A gömbhéj nagysága $4\pi v^2dv$ vagyis a v és $v + dv$ tartományban sebességgel rendelkező molekulák száma:

$$dN_v = Nf(v)\,4\pi v^2dv = NF(v)\,dv$$

ahol

$$F(v) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m}{2kt}\right)^{3/2} v^2 e^{\frac{-mv^2}{2kt}}$$

Ez a sebesség nagysága szerinti sűrűségfüggvény a Maxwell-féle sebességeloszlás, megadja annak a valószínűségét, hogy egy molekula sebességének nagysága v és $v + dv$ közé esik, a hőmérséklet és a gázmolekulák tömegének a függvényében.



A Maxwell-féle sebességeloszlás

15. Kvantumstatisztikák(Berki Péter)

A "klasszikus" állapotszámlálás abban az esetben nem alkalmazható, ha a fázistérben olyan nagy a sűrűség, hogy emiatt egy "fáziscellába" több részecske kerülne. Ilyenkor

$$\frac{d^f q \cdot d^f p}{N! \cdot h^f}$$

nem egyenlő az állapotok számával. Bosonokra megnő, Fermionokra lecsökken az olyan állapotok súlya, amikor egy fáziscellába több részecske kerül. N darab részecske esetén megadhatunk egy becslést a fáziscellák betöltöttségére, azaz a fázistér-sűrűségre. Az adott koordinátában elfoglalt térfogat V, az impulzusban pedig ${p_T}^3$, ahol az ekvipartíció-tétele szerint ${p_T}^3 = \overline{p^2}/2m = k_B T/2$. A fázistérbeli cellák számát megadhatjuk a $V{p_T}^3/h^3$ formulával. Ebből a fázistér-sűrűség:

$$\rho = \frac{N}{V{p_T}^3/h^3} = \frac{N}{V}{\lambda_T}^3 = \left(\frac{\lambda_T}{r_0}\right)^3$$

Ez egy dimenziótlan mennyiség, ahol $\lambda_T = h/p_T$ a deBroglie-hullámhossz, ${r_0}^3 = V/N$ pedig a részecskék átlagos távolsága. Ezek alapján azt mondhatjuk, hogy $\rho \ll 1$ esetén a klasszikus, Maxwell-Boltzmann gázról beszélhetünk, ellenkező esetben pedig $\rho \gtrsim 1$ "elfajult-gázról", vagy kvantumgázról. A fázistérben tehát akkor beszélhetünk nagy sűrűségről, ha maga az anyag nagyon sűrű, vagy az alacsony hőmérséklet miatt $p_T \sim 0$. Példa ezekre fermionok esetén az elektronok fémekben, neutroncsillag és a 3He folyadék, bosonok esetén pedig a csapdázott alkáli atomok, 4He folyadék és excitonok félvezetőkben.

15.1. Bose - Einstein és Fermi - Dirac - eloszlások

Írjuk le egy ideális kvantumgáz állapotát nagykanonikus sokasággal számolva. Az alábbi módszerrel csak kölcsönhatás nélküli, ideális gázra lehet számolni. Legyen egy adott $|i\rangle$ állapot energiája ε_i és betöltési száma n_i (hány részecske van az $|i\rangle$ állapotban). Ekkor a rendszer összenergiája és összes részecskeszáma:

$$E = \sum_i n_i \varepsilon_i$$

$$N = \sum_i n_i$$

Nagykanonikus sokasággal számolva:

$$Z = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{n_i} e^{-\beta(\sum_i n_i \varepsilon_i - \mu \sum_i n_i)} = \sum_{n_1, n_2, \ldots}^{n_{max}} \prod_i e^{-\beta(\varepsilon_i - \mu) n_i} = \sum_{\{n_i\}}^{n_{max}} e^{-\beta(\varepsilon_1 - \mu) n_1} \cdot e^{-\beta(\varepsilon_2 - \mu) n_2} \cdot \ldots =$$

$$= \prod_i \sum_{n_i=0}^{n_{max}} e^{-\beta(\varepsilon_i - \mu) n_i}$$

Bosonok esetében $n_i = 0, 1, 2, \ldots$ és $n_{max} = \infty$, így (lsd.: mértani sor)

$$Z_{bsn} = \prod_i \frac{1}{1 - e^{-\beta(\varepsilon_i - \mu)}}$$

Fermionok esetében pedig $n_i = 0, 1$ és $n_{max} = 1$, mivel azonos fermionokból legfeljebb egy lehet egy adott állapotban (lsd.: Pauli-elv), ekkor

$$Z_{frm} = \prod_i \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon_i - \mu)}\right)$$

Ezekből az általános egyenlet a nagykanonikus potenciálra:

$$\Phi(T, V, \mu) = -pV = \mp k_B T \sum_i ln\left(1 \pm e^{-\beta(\varepsilon_i - \mu)}\right)$$

(felső előjel: fermion, alsó előjel: boson)
Az így kapott egyenletből megadható az $< n_i >$ átlagos betöltés:

$$N = -\left.\frac{\partial \Phi}{\partial \mu}\right|_{T,V} = \pm k_B T \sum_i \frac{1}{1 \pm e^{-\beta(\varepsilon_i - \mu)}} \cdot (\pm 1) \cdot e^{-\beta(\varepsilon_i - \mu)} \beta =$$

$$= \sum_i \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} \pm 1}$$

A korábbi definíció alapján megadható az átlagos betöltés:

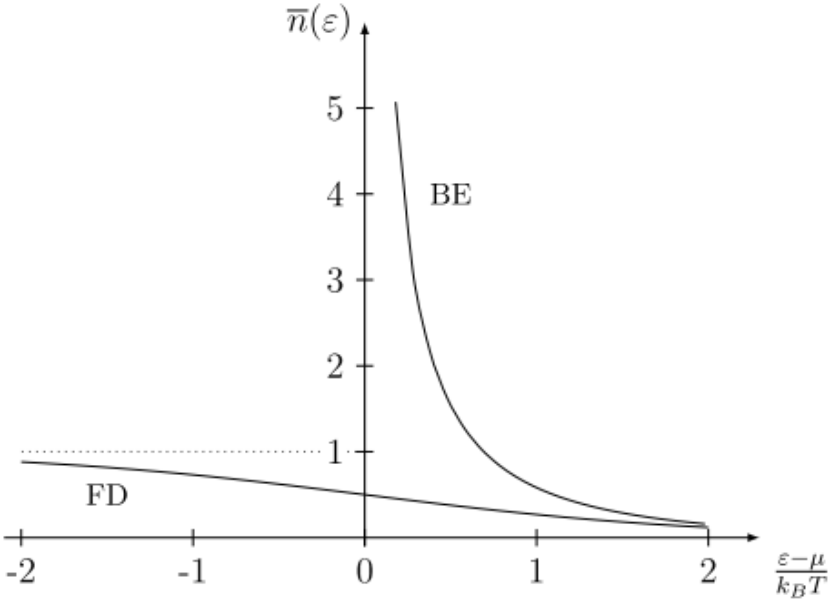
$$N = \sum_i n_i$$

$$< n_i >= \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} \pm 1}$$

Így eljutottunk a FD és BE eloszlásokig:

$$\overline{n}_F(\varepsilon) = f_{FD}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} + 1} \quad \text{és} \quad \overline{n}_B(\varepsilon) = f_{BE}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} - 1}$$

Ezek alapján azt mondhatjuk, hogy az egyes (független) egyrészecske-állapotok egyensúlyi betöltése tehát a Fermi-Dirac illetve a Bose-Einstein-statisztikát követi. A betöltési számok lefutását az alábbi ábra szemlélteti:



15.1 ábra: A FD és BE statisztika betöltési számai

Látható, hogy a szabad bosonokra $n(\varepsilon \longrightarrow \mu)$ divergál, tehát $\varepsilon > \mu$ minden energiára teljesül. Ahhoz, hogy meghatározhassuk $\overline{N}$ és $\overline{E}$ mennyiségeket, a továbbhaladás szempontjából érdemes meghatározni az egyrészecske állapotsűrűséget($\rho(\varepsilon)$) olyan esetben, amikor ε_i folytonos spektrum, pl. szabad gázok esetén. Számoljuk ki egy adott ε és $\varepsilon + d\varepsilon$ energiahélyban lévő állapotok számát d=3 esetben:

$$d\Omega_0(\varepsilon) = g \frac{d^3q \cdot d^3p}{h^3} \quad \text{ahol} \quad g = 2S + 1 \quad \text{(spin, polarizáció)}$$

$$\varepsilon(\underline{p}) = \frac{\underline{p}^2}{2m} \quad \text{energia esetén} \quad \Omega_0(\varepsilon) = g \frac{V}{h^3} \frac{4\pi R^3}{3} = \frac{V}{h^3} \frac{4\pi}{3} (2m\varepsilon)^{3/2}$$

Így az állapotsűrűség definíciójából:

$$\rho(\varepsilon) = \frac{d\Omega_0(\varepsilon)}{d\varepsilon} = A \cdot V \sqrt{\varepsilon} \quad \text{ahol} \quad A = g \cdot 2\pi \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2}$$

Ezt felhasználva szabad gáz esetén az egyrészecske-állapotokra való összegzést energiaintegrálokkal is helyettesíthetjük:

$$\sum_i \quad ... \quad \rightarrow \quad g\frac{V}{h^3}\int \quad ... \quad d^3p \quad \rightarrow \quad \int_0^\infty \rho(\varepsilon) \quad ... \quad d\varepsilon$$

Ezt csak abban az esetben tehetjük meg, ha a Hamilton-operátor spinfüggetlen, mivel ekkor az egyes spin-állapotokra való összegzés csak egy g faktort (spindegenerációt) eredményez. Ennek segítségével fermionokra:

$$\overline{N} = \sum_i < n_i >= \int_0^\infty \rho(\varepsilon) f_{FD}(\varepsilon) d\varepsilon = \int_0^\infty \rho(\varepsilon)\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}d\varepsilon$$

$$\overline{E} = \sum_i \varepsilon_i < n_i >= \int_0^\infty \varepsilon\rho(\varepsilon) f_{FD}(\varepsilon) d\varepsilon = \int_0^\infty \varepsilon\rho(\varepsilon)\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}d\varepsilon$$

Míg bosonokra a Fermi-függvényt a Bose-függvénnyel helyettesítjuk:

$$\overline{N} = \int_0^\infty \rho(\varepsilon)\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1}d\varepsilon, \quad \overline{E} = \int_0^\infty \varepsilon\rho(\varepsilon)\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1}d\varepsilon$$

Elegendően alacsony hőmérsékleten a kvantummechanika illetve a kvantumstatisztika határozza meg bármilyen ideális gáz viselkedését. A fermionok és bozonok viselkedése azonban ezeken az alacsony hőmérsékleteken gyökeresen eltér egymástól: fermionok esetén a gáz véges kompresszibilitással rendelkezik még $T = 0$ hőmérsékleten is és Fermi-folyadékot képez, míg a bosongáz egy kritikus hőmérséklet alatt összeomlik és Bose-kondenzálódik.

15.2. Klasszikus határesetek

A rendszer akkor viselkedik klasszikusan, ha a Δp és Δq kvantummechanikai bizonytalanságokra fennáll a $\Delta p \ll p_T$ és $\Delta q \ll r_0$, miközben $\Delta p \Delta q \sim h$, azaz $p_T r_0 \gg h$. Tehát ha két részecske kis valószínűséggel tartózkodik ugyanabban a kvantumállapotban, akkor a részecskék megkülönböztethetetlenségéből származó kvantumkorrekciók nem jelentősek, és a bozonok illetve fermionok közötti statisztikus eltérés elhanyagolhatóvá válik. Ez definiálja az un. *Kalsszikus határesetet*, amikor a betöltési számokra teljesül az $< n_i > \ll 1$ feltétel. Ilyenkor az átlagos betöltési szám formulájában az exponenciális tag dominál, ezért mind fermionokra, mind bosonokra:

$$< n_i > \approx e^{-\beta(\varepsilon_i-\mu)} \ll 1$$

azaz a klasszikus határeset abban az esetben valósul meg, ha $\beta\mu$ egy nagy negatív szám. A nagykanonikus potenciál ebben az esetben az alábbi formulával (Boltzmann-statisztika) közelíthető:

$$\Phi(T,V,\mu) = -pV = \pm k_B T \sum_i ln\left(1 \mp < n_i >\right) \approx -k_B T \sum_i e^{-\beta\varepsilon_i} e^{\beta\mu} \approx -k_B T \sum_i Z_i e^{\beta\mu}$$

15.3. Ideális Fermi-gáz

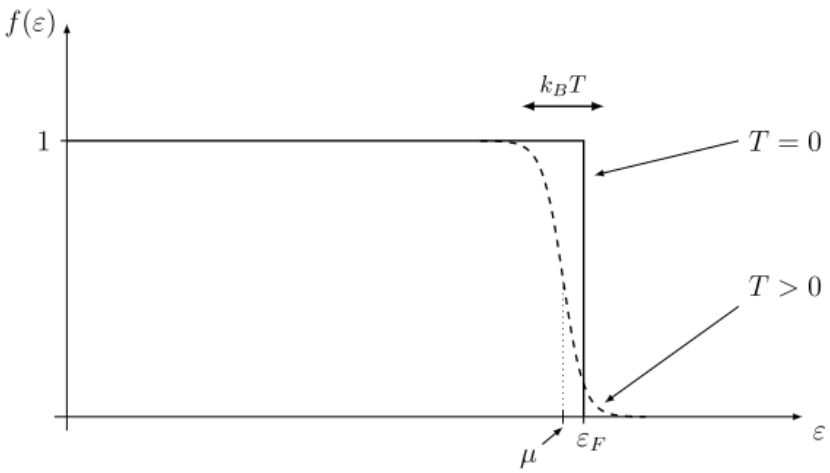
Vizsgáljuk először a Fermi-gáz alapállapotát és induljunk ki a részecskeszám kifejezésből:

$$\overline{N} = \sum_i < n_i >= \int_0^\infty \rho(\varepsilon) f_{FD}(\varepsilon) d\varepsilon = \int_0^\infty \rho(\varepsilon)\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}d\varepsilon$$

Látható, hogy $T \rightarrow 0$ határesetben $f_{FD}(\varepsilon)$ egy egységugrás-fügvénnyé válik, $f_{FD}(\varepsilon) \rightarrow \Theta(\varepsilon_F - \varepsilon)$, ahol $\varepsilon_F \equiv \mu(T=0)$ a $T = 0$ hőmérséklethez tartozó kémiai potenciál, az úgynevezett *Fermi-energia*. Alapállapotban a Fermi-energia alatti állapotok mind be vannak töltve, a felette lévőek viszont mind üresek, hiszen a Pauli-féle kizárási elv figyelembevételével így minimalizálható a fermionrendszer energiája. Ezt az állapotot Fermi-tengernek is szokták nevezni.

Izotrop diszperziós reláció esetén a betöltött állapotok az impulzustérben egy p_F Fermi-impulzus sugarú gömbön belül helyezkednek el, a gömb felülete pedig a Fermi-felület. A fermionrendszerek viselkedésében meghatározó szerepet kap a Fermi-felület és annak környezete.

Kvadratikus diszperziós reláció esetén a Fermi-impulzus egyszerűen függ össze a Fermi-energiával, $p_F = \sqrt{2m\varepsilon_F}$. A Fermi-impulzus és Fermi-energia segítségével további karakterisztikus hossz- és hőmérsékletskálák definiálhatóak, pl. a $k_F \equiv p_F/\hbar$ Fermi-hullámszám és az ennek megfelelő $\lambda_F = 2\pi/k_F$ Fermi-hullámhossz, illetve a $T_F \equiv \varepsilon_F/k_B$ Fermi-hőmérséklet.



15.2 ábra: A Fermi-függvény zérus és véges hőmérsékleten

Az összes így bevezetett karakterisztikus mennyiség valójában egyetlen paraméternek, a fermiongáz $n = \overline{N}/V$ részecskesűrűségének a függvénye, hiszen

$$\overline{N} = g \sum_{|p| \leq p_F} 1 = g \frac{V}{h^3} \frac{4\pi}{3} p_F^3$$

ahonnan így

$$p_F = \hbar k_F = \hbar (6\pi^2 n/g)^{1/3}$$

$$\lambda_F = (3n/4\pi g)^{-1/3} \sim d$$

$$\varepsilon_F = \frac{p_F^2}{2m} = \frac{\hbar}{2m} \left(\frac{6\pi^2}{g} n \right)^{2/3}$$

Az utóbbi eredményt az energiatétel segítségével is megkaphatjuk:

$$\overline{N} = \int_0^\infty \rho(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon = \int_0^{\varepsilon_F} \rho(\varepsilon) d\varepsilon = g \frac{V}{h^3} 4\pi \sqrt{2} m^{3/2} \frac{2}{3} \varepsilon_F^{3/2} = A \frac{2}{3} \varepsilon_F^{3/2}$$

ahol A az állapotsűrűségből származó prefaktorok összességét jelöli. Hasonlóan kell a fermionrendszer alapállapoti energiáját is meghatározni:

$$\overline{E} = \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon \rho(\varepsilon) d\varepsilon = A \frac{2}{5} \varepsilon_F^{5/2} = \frac{3}{5} \varepsilon_F \overline{N}$$

Az állapotegyenletből pedig megkaphatjuk a gáz nyomását:

$$p = \frac{2}{3V} \overline{E} = \frac{2}{5} \varepsilon_F n \propto n^{5/3}$$

A Fermi-gáznak tehát $T = 0$ hőmérsékleten is nagy nyomása és véges kompresszibilitása van. A kapott eredmények közelítőleg érvényesek maradnak véges hőmérsékleten is, amíg a Fermi-gáz elfajult, azaz $\lambda_T \gg n^{-1/3} \sim \lambda_F$. Mivel $T_F \sim \hbar^2/m\lambda_F^2$ és $T \sim \hbar^2/m\lambda_T^2$, ez azt jelenti, hogy a Fermi-gáz akkor degenerált, ha a hőmérséklet jóval alacsonyabb, mint a Fermi-hőmérséklet.

$$T_F \gg T$$

Miután egy tipikusan jól vezető fémben az elektronok sűrűsége rendkívül nagy, $n \sim 10^{23} cm^{-3}$, így a Fermi-energia

$$\varepsilon_F = \frac{p_F^2}{2m} = \frac{\hbar}{2m} \left(\frac{6\pi^2}{g} n \right)^{2/3} \sim 10^{-18}\text{J} \sim 7\text{eV}$$

az ennek megfelelő Fermi-hőmérséklet

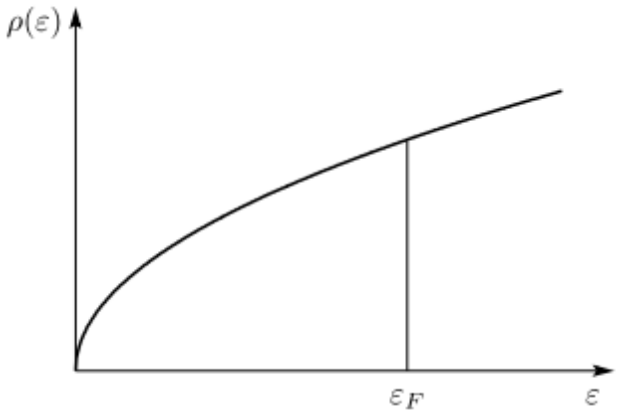
$$T_F = \varepsilon_F/k_B \sim 80000\text{K} \gg T \sim 300\text{K}$$

A fémbeli elektronok hőmérséklete tehát jellemzően két nagyságrenddel kisebb, mint a Fermi-hőmérséklet, így a vezetési elektronok degenerált Fermi-gázt képeznek.

15.4. Elektronfajhő

Klasszikus esetben a fajhő $C_V = 3/2Nk_B$, vagyis nem függ a hőmérséklettől, hanem egy konstans érték. Vizsgáljuk meg, hogy alacsony hőmérsékleten $T \ll T_F$, degenerált (elfajult) Fermion-gáz (elektrongáz) esetében milyen viselkedést mutat! Az alábbi levezetés csak egy becslés, pontosabb számítást a *Bethe-Sommerfeld-sorfejtés* alkalmazásával lehet kivitelezni (lsd.: forrásban megjelölt jegyzetek). Vizsgáljuk meg a $\rho(\varepsilon)$ függvényt:

$$\rho(\varepsilon) = AV\sqrt{\varepsilon}$$



15.3 ábra: A Fermi-gáz energia szerinti sűrűségeloszlása

Mivel csak betöltöttből üres egyrészecske-állapotba lehet gerjeszteni, gerjeszthető fermionokat csak az ε_F Fermi-energia k_BT környezetében lehet találni. (A Fermi-energia alatt minden állapot betöltött, felette betöltetlen) Ennek megfelelően a gerjeszthető fermionok száma $\sim \rho(\varepsilon_F)k_BT$. Ekkor az energia (görbe alatti terület):

$$E(T) = E_0 + \rho(\varepsilon_F)k_BT \cdot k_BT = E_0 + \rho(\varepsilon_F)k_B^2T^2$$

Innen a fajhő

$$C_V = \left.\frac{\partial E}{\partial T}\right|_V = 2k_B \cdot \rho(\varepsilon_F)k_BT = \frac{3}{2}Nk_B\frac{2k_BT}{\varepsilon_F}, \quad \text{mivel} \quad \rho(\varepsilon_F) = \frac{3}{2}N\frac{1}{\varepsilon_F}$$

Látható, hogy alacsony hőmérsékleten a Fermi-gáz hőkapacitásában megjelenik egy T/T_F függés, azaz a fajhő a hőmérséklet függvényében *lineáris*. Klasszikusan értelmezve tehát azt mondhatjuk, hogy a Fermi-gáz szabadsági fokai alacsony hőmérsékleten kifagynak. Ez a termodinamika III. főtételének megjelenése egy konkrét kvantumrendszerben.

15.5. Ideális Bose-gáz, Bose-Einstein kondenzáció

Ideális, szabad Bose-gáz esetén az energiafüggő betöltési számot a 15.1 ábrán látható Bose-függvény határozza meg. Háromdimenziós, kvadratikus diszperziójú gázt feltételezve, az állapotsűrűséget $\rho(\varepsilon) = A\sqrt{\varepsilon}$ alakban írhatjuk fel. Ekkor bevezetve az $x = \varepsilon/K_BT$ változót,

$$\overline{N} = \int_0^\infty \rho(\varepsilon)\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1}d\varepsilon = A\int_0^\infty \sqrt{\varepsilon}\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1}d\varepsilon = A(k_BT)^{3/2}\int_0^\infty \sqrt{x}\frac{1}{e^{x+\alpha}-1}dx$$

Ahol $\alpha = -\mu/k_BT$. Rögzített sűrűség és hőmérséklet mellett ez a kifejezés egy implicit egyenletet jelent a $\mu(T)$ kémiai potenciál hőmérsékletfüggésére. Az egyenlet mindkét oldalát elosztva V-vel valamint felhasználva a termikus deBroglie hullámhossz $\lambda_T = h/\sqrt{2\pi mk_BT}$ definícióját, kifejezhetjük a gáz sűrűségét μ illetve T függvényében:

$$n = \frac{g}{\lambda_T^3}\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty \sqrt{x}\frac{1}{e^{x+\alpha}-1}dx$$

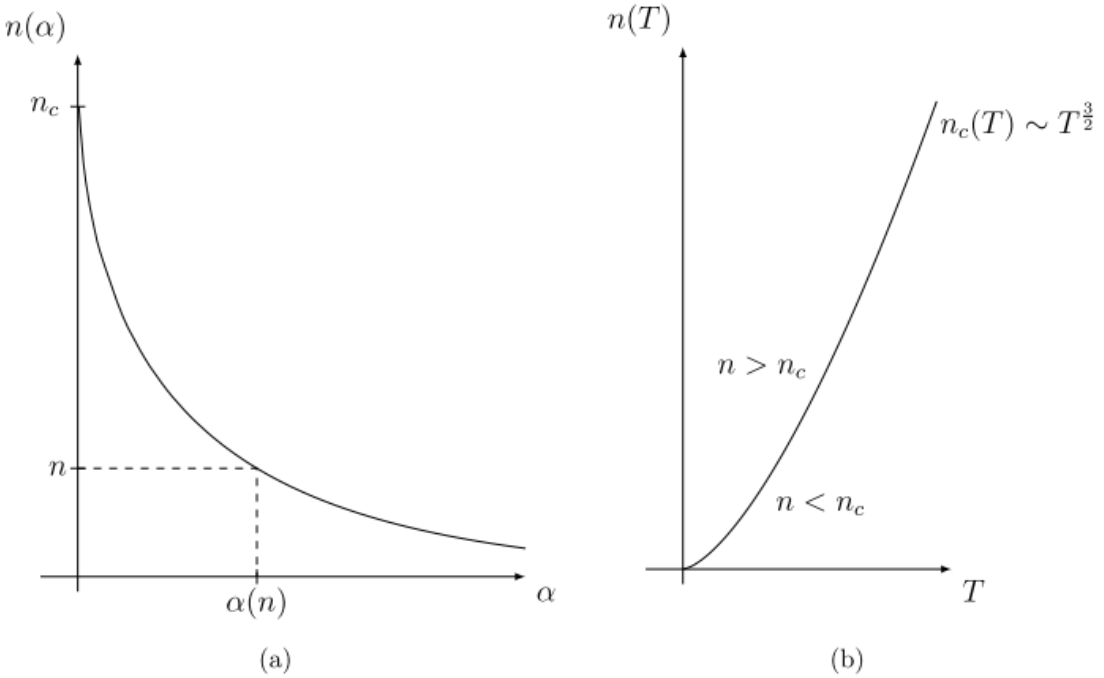
A fenti integrál μ-nek monoton növekvő függvénye, azonban csak akkor jól definiált, ha a kémiai potenciál nem pozitív, $\mu \leq 0 (\alpha \geq 0)$. Ebből azonban következik, hogy negatív kémiai potenciálokra a gázt alkotó részecskék száma nem lehet nagyobb, mint a $\mu = 0$ kémiai potenciál által meghatározott $n_c(T)$ sűrűség,

$$n_c(T) \equiv \frac{g}{\lambda_T^3} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \sqrt{x} \frac{1}{e^x - 1} dx$$

Az integrál kifejezhető gamma- és zeta-függvényekkel, a végeredmény pedig:

$$n_c(T) = 2,612 \frac{g}{\lambda_T^3}$$

Amennyiben $n < n_c(T)$, akkor a gáz sűrűségére adott egyenletnek van $\alpha > 0$ megoldása. A Bose-gázt izotermikusan összenyomva (azaz $T = \text{const}$ mellett az n sűrűséget növelve) azonban μ fokozatosan növekszik, míg el nem éri a kritikus $\mu = 0$ értéket, amikor is n éppen $n_c(T)$. Ekkor érvényét veszti a formula!



15.4 ábra: (a) A kémiai potenciál függése a részecskesűrűségtől adott T hőmérsékleten, $n > n_c(T)$-re nincs olyan α ami kielégítené az egyenletet. (b) A kritikus sűrűség hőmérsékletfüggése

Mi történik $n > n_c(T)$ esetén? A fenti számítás azt sugallja, hogy ekkor a termodinamikai limeszben a kémiai potenciál 0-vá válik, $\mu \to 0$. Ilyenkor viszont az $\varepsilon = 0$ energiájú módussal illetve az állapotokra való összegzéssel óvatosan kell bánnunk, hiszen ekkor az $\varepsilon = 0$ állapotban makroszkopikusan sok részecske lehet. Látható, hogy

$$\overline{N}_0 = g n_0 = \frac{g}{e^\alpha - 1}$$

az $\alpha \to 0$ határesetben divergál. Ennek a nívónak a járuléka az energiaintegrálokra való áttéréskor elvész, így az átlagos részecskeszámra felírt képletünk csak az $\varepsilon \neq 0$ állapotban tartózkodó részecskék számát adja vissza helyesen. A kritikus sűrűségeknél nagyobb sűrűségekre tehát $\overline{N}_0 \approx V$, azaz a részecskék makroszkopikus hányada az $\varepsilon = 0$ állapotba "kondenzálódik". Ennek megfelelően a részecskék száma és a sűrűség két részre bontható:

$$\overline{N} = \overline{N}_0 + \overline{N}_{\varepsilon>0}, \quad n = n_0 + n_{\varepsilon>0}$$

Itt n_0 a kondenzátum sűrűsége. Ha tehát $n > n_c(T)$, akkor $\alpha = 0$, és ennek megfelelően $n_{\varepsilon>0} = n_c(T)$, a kritikus részecskeszámon felüli rész pedig az $\varepsilon = 0$ állapotba kondenzálódik az impulzustérben, $n_0 = n - n_c(T) > 0$. Ezt a jelenséget nevezzük Bose-Einstein-kondenzációnak.

Tegyük most fel, hogy a Bose-gáz $n = \overline{N}/V$ sűrűsége rögzített, és vizsgáljuk a hőmérséklet függvényében a jelenséget. A hőmérséklet csökkenésével azon a T_c hőmérsékleten kezd makroszkopikussá válni az alapállapot betöltöttsége, ami teljesíti az

$$n = n_c(T_c)$$

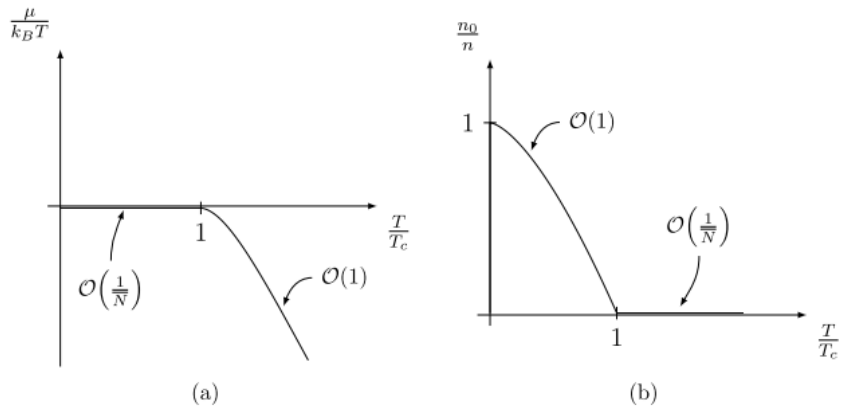
implicit egyenletet. A kritikus T_c hőmérséklet felett $n < n_c(T_c)$, és ennek megfelelően a kémiai potenciál véges negatív értéket vesz fel. Ekkor tehát $n_{\varepsilon>0} = n$ a termodinamikai limeszben és $n_0 \to 0$. Ha viszont $T < T_c$, akkor

$$n_{\varepsilon>0} = n_c(T) = n\left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}$$

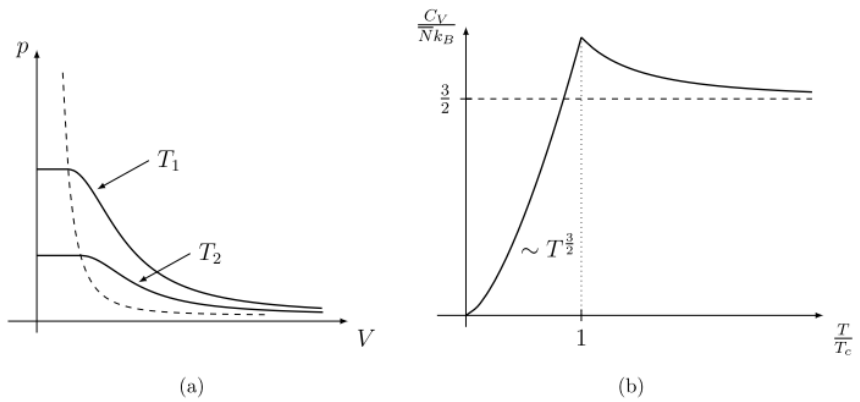
Így a kondenzátum sűrűsége

$$n_0 = n - n_{\varepsilon>0} = \left[1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}\right]$$

A kémiai potenciál (pontosabban $-\alpha = \beta\mu$) lefutását és a kondenzált atomok n_0/n hányadának hőmérsékletfüggését mutatja az alábbi két ábra:



15.5 ábra: (a) A dimenziótlanított kémiai potenciál hőmérsékletfüggése. (b) Az n_0/n alapállapoti hányad hőmérsékletfüggése



15.5 ábra: (a) Ideális Bose-gáz izotermái. (b) Fajhő alacsony hőmérsékleten és a kondenzációs hőmérséklet felett.

Megmutatható továbbá, hogy a T_c kritikus hőmérséklet alatt a nyomás nem függ a térfogattól, csak a hőmérséklettől. A gázt állandó T hőmérsékleten összenyomva a nyomás fokozatosan nő, majd a hőmérséklet-függő kritikus sűrűséget elérve megindul a kondenzáció, és a nyomás változatlan marad. Ez azt jelenti, hogy a Bose-kondenzált fázisban végtelenné válik a gáz kompresszibilitása, akárcsak egy folyadék valós térbeli kondenzációjakor: egy egyensúlyi folyadék-gőz elegyben a térfogat izotermikus változtatásakor a gőznyomás változatlan marad, csak az egyes komponensek aránya változik. Egy hoszabb számítás segítségével megmutatható, hogy a fajhő T_c-nél folytonos marad, viszont meredeksége előjelet vált. A fajhőben ennek eredményeként $T = T_c$-nél fázisátalakulásokra jellemző csúcs jelenik meg.

15.6. Hőmérsékleti sugárzás, Stefan-Boltzmann törvény

A feketetest hőmérsékleti sugárzásának tulajdonságait megérthetjük, ha a fotongázt mint egy üregbe zárt ideális bozonrendszert írjuk le. A sugárzási törvény levezetéséhez induljunk ki abból a tényből, hogy egy V térfogatú üregben az elektromágneses sugárzási tér előállítható oszcilláló harmonikus elektromágneses módusok összegeként. Ezeket a módusokat kvantálva kapjuk a fotonmódusokat: egy ω körfrekvenciájú oszcillátor n-edik gerjesztett állapota felfogható úgy is, mintha n darab, egyenként $\hbar\omega$ energiájú részecske tartózkodna egy az oszcillátornak megfelelő kvantumállapotban. Ezeket a gerjesztéseket nevezzük fotonoknak. A foton spinje $S = 1$, így Bose-statisztikát követnek. A $(2S + 1) = 3$ spinállapot közül egy azonban nem megengedett, így szabad térben egy hullámszámhoz kétféle lehetséges polarizáció tartozik, és minden frekvencia degenerációja $g = 2$. A foton nyugalmi tömege zérus, így energiája

$$\varepsilon(\boldsymbol{p}) = |\boldsymbol{p}|\, c = \frac{h}{\lambda} c = h\nu(\boldsymbol{p}) = \hbar\omega(\boldsymbol{p})$$

ahol ν a foton frekvenciája, ω a körfrekvenciája, λ a hullámhossza, c pedig a fénysebesség. A feketetest-sugárzást kibocsátó üreg fala egyensúlyban is elnyel és kibocsát fotonokat, ezért az N fotonszám nem állandó, átlagos értékét T és V határozzák meg. Abból, hogy a fotonok száma nem megmaradó mennyiség következik az is, hogy a kémiai potenciál azonosan eltűnik, $\mu = 0$. Ekkor ugyanis a legnagyobb valószínűségű fotonszám az állandó fotonszám mellett számított $F(T, V, N)$ feltételes szabadenergia szélsőértékéből határozható meg. Ez azonnal a

$$\left.\frac{\partial F}{\partial N}\right|_{T,V} = \mu = 0$$

feltételre vezet. Egy ν frekvenciájú állapot átlagos betöltési száma így

$$\overline{n}(\nu) = \frac{1}{e^{\beta h\nu} - 1}$$

A dp impulzushéjba eső állapotok száma pedig

$$g\frac{V}{h^3} 4\pi^2 dp = \frac{8\pi V}{c^3}\nu^2 d\nu$$

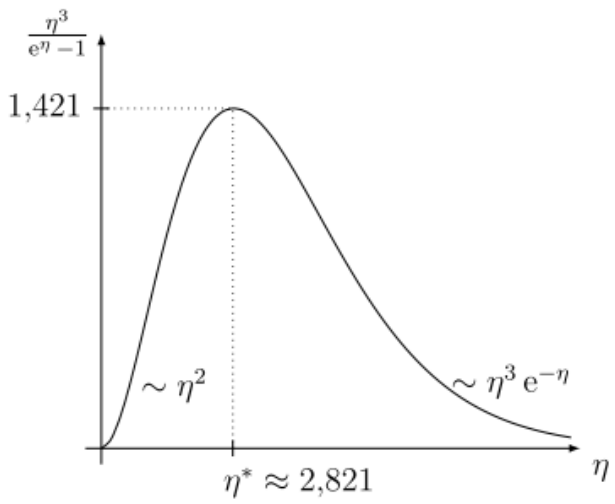
amiből rögtön adódik a (térfogategységre jutó) energia $u(\nu)$ spektrális sűrűsége, ugyanis a $d\nu$ frekvenciasávba eső és egy térfogategységbe eső energiajárulék

$$\frac{1}{V} d\overline{E}(\nu) = u(\nu) d\nu = \frac{8\pi}{c^3} \frac{h\nu^3}{e^{\beta h\nu} - 1} d\nu$$

azaz

$$u(\nu) = \frac{8\pi}{c^3} \frac{h\nu^3}{e^{\beta h\nu} - 1}$$

ami a *Planck-féle sugárzási törvény*.



15.6 ábra: A Planck-féle sugárzási törvényben szereplő univerzális függvény

Bevezetve az $\eta = \beta h\nu$ dimenziótlan változót

$$u(\nu)d\nu = \frac{8\pi}{c^3}\frac{(k_BT)^4}{h^3}\frac{\eta^3}{e^\eta - 1}d\eta$$

a spektrális eloszlás alakját tehát egy univerzális függvény határozza meg. nyilvánvaló, hogy az utóbbi eloszlás $\eta^* = \frac{h\nu^*}{k_bT^*}$ maximumhelye hőmérsékletfüggetlen, amiből rögtön adódik a *Wien-féle eltolódési törvény* az energiaspektrum maximumára, $\lambda_{max}T = const$.

A Planck-féle spektrumból következnek azok a törvények is, melyek már a sugárzási törvény megfogalmazása előtt is ismertek voltak. Az alacsony frekvenciás (nagy hullámhosszú) $h\nu \ll k_BT(\eta \ll 1)$ esetben például

$$u(\nu)d\nu = k_BT\frac{8\pi}{c^3}\nu^2 d\nu$$

ami a *Rayleigh-Jeans-törvény*. Ezek szerint a nagy energiájú fotonok klasszikus ideális gázként viselkednek, és a $h\nu$ energiájú fotonállapot betöltését a klasszikus $\sim e^{-\beta h\nu}$ Boltzmann-statisztika határozza meg. A fotongáz általános energiáját a

$$\overline{E} = V\int_0^\infty u(\nu)d\nu = \frac{8\pi}{c^3}\frac{(k_BT)^4}{h^3}\int_0^\infty \frac{\eta^3}{e^\eta - 1}d\eta$$

amiből következik a *Stefan-Boltzmann-törvény*

$$\frac{\overline{E}}{V} = \frac{4\sigma}{c}T^4$$

alakja, ahol σ az un. Stefan-Boltzmann-állandó. Hasonlóan belátható, hogy $\overline{N} \propto T^3$, tehát

$$\overline{E} \sim \overline{N}k_BT$$

de most $\overline{N}$ erősen függ a hőmérséklettől. Az ideális fotongáz nyomásának meghatározásához használjuk az ultrarelativisztikus határesetben érvényes formulát, $pV = \overline{E}/3$ ekkor a sugárzási nyomás

$$p = \frac{4\sigma}{3c} = T^4$$

A fotongáz nyomása tehát nem függ a térfogattól, és izotermikus kompresszibilitása ennek megfelelően végtelen, összhangban a Bose-Einstein-kondenzátum esetében érvényes eredménnyel. Mivel a kémiai potenciál azonosan eltűnik, így a szabadenergia $F = \mu\overline{N} - pV = -pV$ azaz

$$F = -\frac{4\sigma}{3c}VT^4$$

Ebből az entrópia illetve a hőkapacitás differenciálással adódik,

$$S = -\left.\frac{\partial F}{\partial T}\right|_V = \frac{16\sigma V}{3c}T^3$$

$$C_V = \left.\frac{\partial \overline{E}}{\partial T}\right|_V = \frac{16\sigma V}{c}T^3 \sim \overline{N}(T)k_B$$

Mindkettő zérushoz tart a III. főtétellel összhangban.

15.7. Fononok

A fenti termodinamikai mennyiségek hőmérsékletfüggése alapvetően az $\omega(\boldsymbol{P}) \sim |p|$ lineáris diszperzióból következik. Szilárd testekben a hanghullámok (kvantált formában: fononok) ugyancsak lineáris diszperzióval rendelkeznek és bosonstatisztikát követnek. Bár diszperziójuk anizotrop, és a fotonoktól eltérően minden hullámszámhoz három, általában különböző energiájú akusztikus módus tartozik, a fononok termodinamikai tulajdonságai rendkívül hasonlítanak a fotongáz termodinamikai tulajdonságaihoz. Példaként a fotonokhoz hasonlóan a rácsrezgések fajhőjáruléka is $\sim T^3$ viselkedést mutat alacsony hőmérsékleten.

Forrás:
http://cserti.web.elte.hu/, Statisztikus fizika jegyzetek

16. Mágneses rendszerek(Novák Martin)

A kristályos anyagok különösen érdekes osztályát alkotják azok, amelyekben nemcsak az atomok térbeli elhelyezkedésében találunk szabályszerűséget, de az atomok mágneses momentuma is rendezetten áll. Tudjuk, hogy egy egyedül álló atomban vagy ionban a le nem zárt héjon levő elektronok **L** pálya-impulzusmomentuma és **S** spinje egy $-g_J\mu_B\mathbf{J}$ nagyságú mágneses momentumot eredményez, ahol **J** a dimenziótlan teljes impulzusmomentum.

16.1. Ising modell

Az Ising modell egy a ferro- illetve antiferromágneses *(ezekről később)* anyagokat bizonyos fokig leírni tudó modell. Ez a modell figyelembe veszi a szomszédos spinek közötti kölcsönhatásokat. A rendszer energiája a következő módon írható:

$$E = -H\sum_i s_i - J\sum_{i,j} s_i s_j$$

Itt az $s_i = \pm 1$ a spin irányultságától függően. Az első tag az egyedi spinek állásából származó energia, a második pedig a szomszédos spinek kölcsönhatásából van. A H a mágneses tér nagysága, J pedig a csatolási állandó. Ha $J > 0$ akkor az azonos spinbeállású állapotok a kedvezőek, hiszen ekkor csökkentik a rendszer energiáját, ekkor ferromágnesről beszélünk, ha pedig $J < 0$, akkor az ellentétes irányú beállások a kedvezőek, ekkor antiferromágnesről beszélünk. A valóságban valójában a távolabbi spinek is beállása is számít, de az Ising modell nagy előnye, hogy egy illetve két dimenzióban egzaktul megoldható.

16.1.1. Egy dimenzió

Használjunk periodikus határfeltételt, képzeljük el úgy, mintha a spinek egy gyűrűn helyezkednének el. Az energia így

$$E = -H\sum_{i=1}^{N} s_i - J\sum_{i=1}^{N} s_i s_{i+1}$$

Lenyűgöző statisztikus fizikai ismerteink alapján felírhatjuk a következő csodálatos képletünket az állapotösszegre:

$$Z = \sum_i e^{-\beta E_i} = \sum_{\{s_i\}} exp\left(\beta H\sum_{i=1}^{N} s_i + \beta J\sum_{i=1}^{N} s_i s_{i+1}\right)$$

Itt használjuk a szokásos $\beta = \frac{1}{k_B T}$ jelölést, az összegzést pedig az összes, N spinből álló lehetséges spinösszeállítás sorozatra kell elvégezni. Egy ilyen "spinsorozat" esetén az exponenciális függvény argumentumában egy N tagú összeg jelenik meg.

$$Z(\beta) = \sum_{s_1\ldots s_N} e^{\beta H s_1} e^{\beta J s_1 s_2} e^{\beta H s_2} e^{\beta J s_2 s_3} \ldots e^{\beta H s_N} e^{\beta J s_N s_1} = \sum_{s_1\ldots s_N} V_{s_1,s_2} V_{s_2,s_3} \ldots V_{s_N,s_1}$$

Vezessük be a következő transzfermátrixot:

$$V_{s_i,s_j} = e^{\beta J s_i s_j} e^{\frac{\beta H}{2} s_i} e^{\frac{\beta H}{2} s_j}$$

Mivel a spinek értéke ± 1 lehet, így a transzfermátrix:

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} e^{\beta J + \beta H} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J - \beta H} \end{pmatrix}$$

Ezzel az állapotösszeg

$$Z(\beta) = Sp\left(V^N\right) = \lambda_1^N + \lambda_2^N = \lambda_1^N\left[1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^N\right] \approx \lambda_1^N$$

Itt egyrészt kihasználtuk, hogy a mátrix szimmetrikus, így ha diagonalizálnánk, akkor a főátlóban a sajátértékek jelennének meg, valamint a végén azt a közelítést alkalmaztuk, hogy $\lambda_1 > \lambda_2$, így a szögletes zárójelben levő második tag nagy N esetén elhagyható. A nagyobb sajátérték a következő:

$$\lambda_1 = e^{\beta J} ch\left(\beta H\right) + \sqrt{e^{\beta J} sh^2\left(\beta H\right) + e^{-2\beta J}}$$

Az állapotösszeg tehát:

$$Z(\beta) = \lambda_1^N = (e^{\beta J} ch\left(\beta H\right) + \sqrt{e^{\beta J} sh^2\left(\beta H\right) + e^{-2\beta J}})^N$$

Ebből a mágnesezettség megkapható*(Mathematica-val számoltam, de más mint egy netes jegyzetben)*.

$$M = \frac{\partial lnZ}{\partial H} = \frac{N\left(\beta e^{\beta J}\sinh(\beta H) + \frac{\beta e^{\beta J}\sinh(\beta H)\cosh(\beta H)}{\sqrt{e^{\beta J}\sinh^2(\beta H)+e^{-2\beta J}}}\right)}{\sqrt{e^{\beta J}\sinh^2(\beta H)+e^{-2\beta J}}+e^{\beta J}\cosh(\beta H)}$$

16.1.2. Két dimenzió

A modell két dimenzióban is megoldható egzaktul, de ez bonyolult, ezért itt átlagtér közelítést használunk. Adjuk hozzá és vonjuk is le a spinváltozók várható értékét az energiakifejezésben.

$$s_i s_j = (m + (s_i - m))(m + (s_j - m)) = m(s_i + s_j) - m^2 + (s_i - m)(s_j - m)$$

Az utolsó tag az átlagtól való eltérések szorzata, amit a továbbiakban elhanyagolunk, így nem lesz két spin szorzatát tartalmazó tagunk, a rendszer úgy kezelhető, mint egy szabad spinrendszer, amire az átlagos térnek megfelelő külső tér hat.

$$E = \frac{1}{2}Jqm^2N - (H + Jqm)\sum_i s_i$$

Itt q az első szomszédok száma, amit koordinációs számnak neveznek. Felírva az állapotösszeget:

$$Z = e^{-\beta Jqm^2N/2}\sum_{\{s_i\}} e^{\beta(qJm+H)\sum_i s_i} = e^{-\beta Jqm^2N/2}\prod_i\sum_{i=\pm1} e^{\beta(qJm+H)s_i} = e^{-\beta Jqm^2N/2}\left(2ch\left(\beta\left(qJm+H\right)\right)\right)^N$$

Ebből a mágnesezettség várható értéke:

$$m = th\left(\beta\left(qJm + H\right)\right)$$

A számolás alatt végig felhasználtunk egy m paramétert, mint átlagos mágnesezettséget, de ennek az értéke nem tetszőleges, hanem olyan, hogy a fenti egyenletet kielégíti. Az egyenletet érdemes grafikusan megoldani. Mindkét oldalt m függvényében ábrázolva, a baloldal egy 45° meredekségű egyenes, a jobb oldal egy tangens hiperbolikusz függvény. A két görbe metszéspontjai az egyenlet megoldásai. A tangensfüggvény meredeksége viszont függ a hőmérséklettől is, így egy kritikus hőmérséklet felett csak egy, alatta viszont három megoldás van. A kritikus hőmérséklet alatt az anyag viselkedése ferromágneses, felette paramágneses, a kritikus hőmérsékleten másodrendű fázisátalakulás játszódik le. Ha a külső tér 0, akkor az egyik megoldás mindig az origóban van, a másik két megoldás pedig szimmetrikusan helyezkedik el. Ha a külső tér nem 0, akkor a megoldások eltolódnak, elég nagy tér mellett már a ferromágneses fázisban is csak egy megoldás lesz. A fázisátalakulás hőmérsékletét az határozza meg, hogy ott a th függvény meredeksége az origóban (a biztos metszéspontban) éppen 1, így még csak egy metszéspont létezik. Ekkor $\beta_C = 1qJ$ vagyis $T_C = \frac{qJ}{k_B}$.

16.2. Atomi para- és diamágnesség

A ferromágneses anyagokon kívül ismerünk még dia- és paramágneses anyagokat is. Ezeknek sajátossága az, hogy csak külső mágneses tér hatása mellett mutatkozik meg a mágneses tulajdonságuk. A diamágnesek egy külső tér hatására indukált mágneses teret hoznak létre, amelynek iránya ellentétes a kívülről alkalmazott térrel, tehát a külső mágneses térbe helyezett diamágneses anyag esetében taszítást tapasztalunk. Ezek az anyagok kis negatív szuszceptibilitással jellemezhetők. A paramágneses anyagok esetében az indukálódott mágneses tér iránya megegyezik a külső térével, így enyhe vonzást tapasztalunk. Ezeknek a szuszceptibilitása pedig kis pozitív szám. Az ilyen mágnesességek a spinek/mágneses momentumok mágneses tér hatására bekövetkező rendeződésével írhatók le. Vegyük egy elektromos és mágneses térbe helyezett elektron Hamilton-függvényét:

$$H = \frac{1}{2m_e}\left(\mathbf{p} + e\mathbf{A}\right)^2 + e\phi(\mathbf{r})$$

Mivel statikus esetet vizsgálunk, dolgozzunk Coulomb mértékben, azaz $\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{A} = 0$, valamint tudjuk, hogy $\boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{A} = \mathbf{B}$. Ezekből könnyen*(indexes deriválással kiírva)*, hogy ezeknek a következő vektorpotenciál tesz eleget:

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}\left(\mathbf{B}\times\mathbf{r}\right)$$

Helyettesítsük be ezt a Hamilton-függvénybe, valamint hagyjuk el az elektromos potenciált, mivel az a mágnesség szempontjából nem lényeges.

$$H = \frac{1}{2m_e}\left(\mathbf{p} + \frac{e}{2}\mathbf{B}\times\mathbf{r}\right)^2 = \frac{1}{2m_e}p^2 + \frac{e}{2m_e}\mathbf{p}\left(\mathbf{B}\times\mathbf{r}\right) + \frac{e^2}{8m_e}\left(\mathbf{B}\times\mathbf{r}\right)^2$$

A második tagot alakítsuk át: $\mathbf{p}\left(\mathbf{B}\times\mathbf{r}\right)=\mathbf{B}\left(\mathbf{r}\times\mathbf{p}\right)=\mathbf{BL}$, valamint az utolsó tagban vezessük be az $\mathbf{r}_\perp$ jelölést, az $\mathbf{r}$-nek $\mathbf{B}$-re merőleges komponensére. Így a Hamilton-függvény a következő alakú:

$$H=\frac{1}{2m_e}p^2+\frac{e}{2m_e}\mathbf{B}\cdot\mathbf{L}+\frac{e^2}{8m_e}\mathbf{r}_\perp^2\mathbf{B}^2$$

Tegyünk a második tag együtthatójába egy $\hbar$ szorzót és mondjuk azt, hogy az így megjelenő $\mathbf{L}$ az valami más dimenziójú mennyiség lesz mint eddig volt. Ekkor viszont az együttható éppen a Bohr-magneton. Ha figyelembe vesszük a spint is, akkor a pályaimpulzus-momentum helyett megjelenik a teljes impulzusmomentum, mivel $\mathbf{J}=\mathbf{L}+2\mathbf{S}$. Végső soron a teljes Hamilton-függvény a következő módon írható*(Ez megint ilyen elég ad-hoc volt Gromától, érdemes hozzá megnézni valami tisztességes levezetését pl. a Pauli-egyenletnek, az ehhez teljesen hasonló)*:

$$H=\frac{1}{2m_e}p^2+\mu_B g_J\mathbf{JB}+\frac{e^2}{8m_e}\mathbf{r}_\perp^2\mathbf{B}^2$$

A kifejezés első tagja leírja a paramágnességet, a második pedig a diamágnességet. Vizsgáljuk először a diamágneses tagot. Tudjuk, hogy egy mágneses momentum energiája:

$$E=-\mathbf{mB}$$

Ebből pedig látszik:

$$\mathbf{m}_i=-\frac{dE_i(\mathbf{B})}{d\mathbf{B}}$$

Írjuk fel $\langle m_i\rangle$ várható értéket:

$$\langle m_i\rangle=\frac{\sum_i m_i e^{-\frac{E_i}{k_BT}}}{\sum_i e^{-\frac{E_i}{k_BT}}}$$

Statisztikus fizikai ismereteink alapján számoljuk ki az állapotösszeg logaritmusának a mágneses tér szerinti deriváltját:

$$\frac{\partial}{\partial B}ln\left(Z(B)\right)=\frac{\partial}{\partial B}ln\left(\sum_i e^{-\frac{E_i(B)}{k_BT}}\right)=\frac{-\frac{1}{k_BT}\sum_i\frac{dE_i}{dB}e^{-\frac{E_i(B)}{k_BT}}}{\sum_i e^{-\frac{E_i(B)}{k_BT}}}=\frac{-\frac{1}{k_BT}\sum_i m_i e^{-\frac{E_i(B)}{k_BT}}}{\sum_i e^{-\frac{E_i(B)}{k_BT}}}$$

Vagyis

$$\langle m\rangle=k_BT\frac{\partial}{\partial B}ln\left(Z(B)\right)$$

A mágnesezettség pedig

$$M=\frac{\langle m\rangle}{V}$$

Hozzuk más alakra a következő függvényt:

$$ln\left(\sum_i e^{-x_i}\right)\approx ln\left(\sum_i\left(1-x_i\right)\right)=ln\left(N\left(1-\frac{\sum_i x_i}{N}\right)\right)=ln\left(N\left(1-\langle x\rangle\right)\right)=lnN+ln\left(1-\langle x\rangle\right)\approx lnN-\langle x\rangle$$

Ez alapján

$$lnZ=ln\left(\sum_i exp\left(-\frac{e^2r_i^2B^2}{8m_ek_BT}\right)\right)\approx-\frac{e^2}{8m_e}\frac{1}{k_BT}B^2\left\langle r_\perp^2\right\rangle+lnN$$

A mágnesezettség tehát:

$$M=-\frac{1}{V}\frac{e^2}{4m_e}\left\langle r_\perp^2\right\rangle B$$

A szuszceptibilitás pedig:

$$\chi_d=\frac{dM}{dB}=-\frac{1}{V}\frac{e^2}{4m_e}\left\langle r_\perp^2\right\rangle$$

Vizsgáljuk a paramágnességet először klasszikusan. Zárjon be egy mágneses momentum θ szöget a külső mágneses térrel. Ennek az energiája: $E=-mBcos\left(\theta\right)$. Mivel itt az állapotok folytonosan oszlanak el, ezért az állapotösszegben integrálni kell:

$$Z=2\pi\int_0^\pi e^{\frac{mBcos(\theta)}{k_BT}}sin\left(\theta\right)d\theta=2\pi\int_{-1}^1 e^{\frac{mBx}{k_BT}}dx=2\pi\frac{k_BT}{mB}\left[e^{\frac{mB}{k_BT}}-e^{\frac{-mB}{k_BT}}\right]=4\pi\frac{k_BT}{mB}sh\left(\frac{mB}{k_BT}\right)$$

Tudjuk, hogy

$$F(B) = -k_BTln\left(Z\right) = -k_BTln\left(4\pi\frac{k_BT}{mB}sh\left(\frac{mB}{k_BT}\right)\right)$$

$$\frac{dF}{dB} = -MV$$

Vezessük be az $x = \frac{mB}{k_BT}$ jelölést, így a mágnesezettséget a következő módon kapjuk:

$$M = \frac{1}{V}m\frac{d}{dx}\left(ln\left(4\pi\frac{1}{x}sh\left(x\right)\right)\right)$$

A deriváltas tagot a következőképpen írjuk:

$$\frac{d}{dx}\left(ln\left(4\pi\frac{1}{x}sh\left(x\right)\right)\right) = L(x) = cth\left(x\right) - \frac{1}{x}$$

és Langevin-függvénynek nevezzük. Így a mágnesezettség:

$$M = \frac{NmL\left(\frac{mB}{k_BT}\right)}{V}$$

Végezzük el az állapotösszeg sorfejtését:

$$\frac{sh\left(x\right)}{x} \approx 1 + \frac{x^2}{6} \Rightarrow ln\left(\frac{sh\left(x\right)}{x}\right) \approx \frac{x^2}{6}$$

Így a mágnesezettség a sorfejtett alakban:

$$M \approx \frac{N}{V}m\frac{1}{3}\frac{mB}{k_BT} \Rightarrow \chi_p = \frac{dM}{dB} = \frac{N}{V}\frac{m^2}{3k_BT}$$

Ezt az összefüggést Curie-törvénynek nevezik. Azt fejezi ki, hogy 0-hoz közeli hőmérsékleten már jelentőssé tud válni a paramágnesség. A kvantumos tárgyalásmódban a következó módon jutunk eredményre:
Tudjuk, hogy $E_i = \mu_Bg_jBJ$, ahol $J \in [-j; j]$. Ezzel felírva az állapotösszeget:

$$Z = \sum_i e^{-\frac{E_i}{k_BT}} = \sum_{J=-j}^{j} e^{-\frac{\mu_Bg_jBJ}{k_BT}}$$

Ez egy geometriai sor, aminek az összegét tudjuk:

$$Z = exp\left(\frac{\mu_Bg_jBj}{k_BT}\right)\frac{exp\left(\frac{\mu_Bg_jB(2j+1)}{k_BT}\right) - 1}{exp\left(\frac{\mu_Bg_jB}{k_BT}\right) - 1} =$$

$$= \frac{exp\left(\frac{\mu_Bg_jBj}{k_BT}\right)exp\left(-\frac{\mu_Bg_jB(j+\frac{1}{2})}{k_BT}\right)}{exp\left(-\frac{\mu_Bg_jB}{2k_BT}\right)}\frac{exp\left(-\frac{\mu_Bg_jB(j+\frac{1}{2})}{k_BT}\right) - exp\left(\frac{\mu_Bg_jB(j+\frac{1}{2})}{k_BT}\right)}{exp\left(-\frac{\mu_Bg_jB}{2k_BT}\right) - exp\left(\frac{\mu_Bg_jB}{2k_BT}\right)} = \frac{sh\left(\frac{\mu_Bg_j}{k_BT}\left(j+\frac{1}{2}\right)B\right)}{sh\left(\frac{\mu_Bg_j}{2k_BT}B\right)}$$

A mágnesezettséget az előzőhöz hasonlóan kapjuk meg:

$$F = -k_BTlnZ$$

$$M = -\frac{1}{V}\frac{dF}{dB} = \frac{N}{V}g_j\mu_BjB_j\left(\frac{g_j\mu_BjB}{k_BT}\right)$$

Itt

$$B_j(x) = \frac{2j+1}{2j}cth\left(\frac{2j+1}{2j}x\right) - \frac{1}{2j}cth\left(\frac{x}{2j}\right)$$

úgynevezett Brillouin-függvény. Ezen láthatjuk, hogy ha $j \to \infty$ akkor a Langevin-függvényt kapjuk vissza. Nézzük meg itt is, hogy mi történik a Brillouin-függvény kis értékeire. Ekkor a $B_j = \frac{j+1}{j}\frac{x}{3}$ sorfejtés használható, így a mágnesezettség és a szuszceptibilitás:

$$M = \frac{N}{V}g_j\mu_Bj\frac{j+1}{j}\frac{1}{3}g_j\frac{\mu_B}{k_BT}Bj = \frac{N}{V}g_j^2\mu_B^2\frac{(j+1)j}{3}\frac{B}{k_BT} \Rightarrow \chi_p = \frac{N}{V}g_j^2\mu_B^2\frac{j(j+1)}{3k_BT}$$

16.3. Pauli szuszceptibilitás, Landau diamágnesség

Wut???

16.4. Ferro-, antiferro-, ferrimágneses anyagok, Curie-Weiss törvény

16.4.1. Ferromágneses anyagok

Ferromágnesesnek nevezünk egy anyagot, ha az azonos nagyságú atomi mágneses momentumok a közöttük fellépő kölcsönhatás miatt azonos irányban állnak. Alapállapotban ez tökéletesen igaz, magasabb hőmérsékleten viszont már csak átlagosan teljesül az azonos irányú beállás. A Curie-hőmérsékletnek nevezett kritikus hőmérséklet felett pedig teljesen meg is szűnik a momentumok rendezettsége. Mivel a rendezett állapotban minden atom mágneses momentuma azonos irányban áll, a rács eltolási szimmetriája nem változik meg a mágneses rend megjelenésekor. A mágneses szerkezet szimmetriája mégis alacsonyabb a nemmágneses kristály szimmetriájánál, hiszen a mágneses momentumok iránya kijelölnek egy egy kitüntetett irányt, így elvész az eddig meglevő forgási vagy tükrözési szimmetriák egy része.

16.4.2. A ferromágnesség átlagtérelmélete

A ferromágnesség egyik egyszerű modellje egy átlagtér elmélet. Bontsuk fel ehhez a mágneses teret egy külső, $\mathbf{B}_0$ és egy $\lambda\mathbf{M}$ belső mágneses tér összegére:

$$\mathbf{B}_{eff} = \mathbf{B}_0 + \lambda\mathbf{M}$$

Egyébként a belső mágneses teret nem tudjuk, Weiss ötlete volt az, hogy tekintsük azonosnak a mágnesezettséggel. Kapcsoljuk ki a külső teret, és tekintsük az alapállapotot, mikor a momentumok eleve rendezetten állnak. Emiatt használhatjuk a paramágneses rendszerek mágnesezettségére kapott összefüggést, csak a mágneses térnek a $\mathbf{B}_{eff}$-et kell használni, valamint mivel az anyagban minden momentum egy irányban áll, így elhagyhatjuk a vektoros jelölést is.

$$M = \frac{N}{V} g_j \mu_B j B_j \left(\frac{g_j \mu_b j}{k_B T} \lambda M \right)$$

Mivel a fent említett, tökéletes rendezettség csak kis hőmérsékleten alakul ki, ezért használhatjuk az alacsony hőmérsékletű sorfejtést.

$$M = \frac{N}{V} g_j^2 \mu_B^2 \frac{j(j+1)}{3Tk_B} \lambda M$$

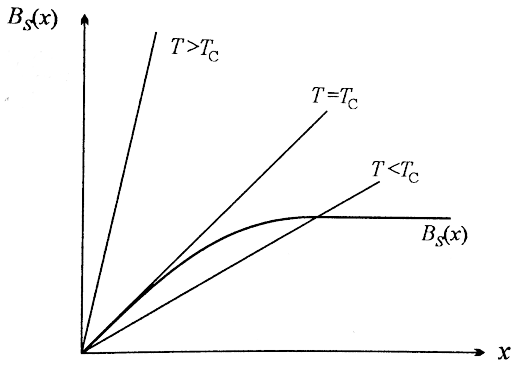
Egyszerűsítsünk M-el és rendezzük a megmaradó kifejezést a hőmérsékletre:

$$T = \frac{N}{V} \frac{j(j+1)}{3k_B} g_j^2 \mu_B^2 \lambda = T_C$$

Ez a Curie-hőmérséklet, ez alatt jelenik meg a ferromágneses fázis, efelett pedig eltűnik. Ez onnan is látszik, hogy ha tekintjük a még sorba nem fejtett mágnesezettség kifejezését, és a bal oldalt tisztán a Brillouin-függvényre, és a Brillouin-függvény argumentumát elnevezzük x-nek, akkor a következőt kapjuk:

$$\frac{V}{N} \frac{k_B T}{g_j^2 \mu_B^2 j \lambda} x = B_j(x)$$

Ennek az egyenletnek a megoldását grafikusan megkaphatjuk.



16.1 ábra: Grafikus megoldás

A bal oldali kifejezés meredeksége a hőmérséklettel arányosan változik, ezért egy bizonyos T_C hőmérséklet felett már csak a triviális $x = 0$ megoldás marad. A triviális megoldás T_C alatt is megmarad, de megjelenik egy véges mágnesezettséghez tartozó megoldás is.
Ha bekapcsoljuk a külső mágneses teret, akkor is használható a paramágnesekre kapott eredmény, hiszen itt is hasonló történik: a mágneses tér rendezi az addig esetleg rendezetlen mágneses momentumokat, ezért a spinrendszer paramágnesesen viselkedik.

$$M = \frac{N}{V} g_j \mu_B j B_j \left(\frac{g_j \mu_b j}{k_B T} \left(\mu_0 H + \lambda M \right) \right) \approx \frac{N}{V} g_j \mu_B j \left[\frac{j+1}{3j} \left(\mu_0 H + \lambda M \right) \frac{j g_j \mu_B}{k_B T} \right]$$

Felbontva a zárójelet a következőt kapjuk:

$$M = \frac{N}{V} \frac{j+1}{3j} g_j^2 \mu_B^2 j^2 \frac{\lambda}{k_B T} M + \frac{N}{V} g_j^2 \mu_B j^2 \frac{j+1}{3j} \frac{\mu_0 H}{k_B} T$$

Vegyük észre, hogy a jobb oldal első tagjában a $\frac{M}{k_B T}$-t éppen $k_B T_C$ szorozza. Ezt vigyük át a bal oldalra és emeljük ki a mágnesezettséget:

$$\left(1 - \frac{T_C}{T} \right) M = \frac{T - T_C}{T} M = \frac{N}{V} g_j^2 \mu_B^2 \frac{j(j+1)}{3} \frac{\mu_0 H}{k_B T}$$

Ebből azt olvashatjuk le, hogy külső mágneses tér esetén

$$M \propto \frac{1}{T - T_C} H \qquad T > T_C \tag{66}$$

$$\chi \propto \frac{1}{T - T_C} \qquad T > T_C \tag{67}$$

Ezt Curie-Weiss törvénynek nevezik. Láthatóan a ferromágneses átalakulás T_C hőmérséklete felé közeledve a szuszceptibilitás divergál. T_C alatt, de annak közelében a spontán mágnesezettség hőmérsékletfüggésére is explicit kifejezést kaphatunk, ha a Brilloin-függvény sorfejtésében a lineáris tag utáni első korrekciót is figyelembe vesszük. Ekkor

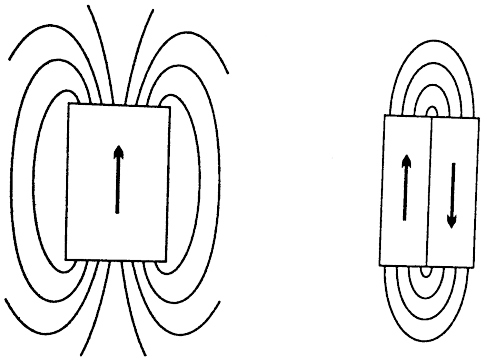
$$M \propto (T_C - T)^{\frac{1}{2}}$$

16.4.3. Antiferromágneses és ferrimágneses anyagok

Louis Eugéne Néel mutatott rá 1932-ben arra, hogy a makroszkopikus mágnesezettséggel rendelkező ferromágnesek mellett létezhetnek olyan anyagok, melyek a rendezetten álló lokalizált mágneses momentum ellenére nem rendelkeznek eredő spontán megánesezettséggel, mert a mágneses momentumok fele a többivel ellentétes irányban állnak és emiatt a momentumok egymást kompenzálják. Léteznek olyan anyagok *(ritkaföldfémek)*, amik ferromágneses és antiferromágneses fázissal is rendelkeznek. Ezekben a paramágneses fázis először egy spontán mágnesezettség nélküli antiferromágneses fázisba alakul át, majd egy alacsonyabb hőmérsékleten bekövetkező újabb fázisátalakkulás révén jelenik meg a véges mágnesezettségű, ferromágneses fázis.
Ferrimágnesesnek nevezzük azokat a mágnesesen rendezett kristályos anyagokat, amik több különböző fajtájú mágneses ionból épülnek fel és azok különböző nagyságú mágneses momentuma antiferromágnesesen csatolódik, ellentétesen áll be. Ezek létezésére is Néel mutatott rá, 1948-ban. A mágneses momentum hordozói lehetnek ritkaföldfémek, vagy a vas három vegyértékű ionjai, de ilyen mágneses anyagokat kaphatunk úgy is, hogy egy bonyolult szerkezetben az egyik típusú rácshelyen két, a másikon pedig három vegyértékű ionok találhatóak. A momentumok különböző nagysága miatt a momentumok az ellentétes beállás ellenére még akkor sem kompenzálják egymást teljesen, ha a különböző ionokból azonos számú van a mágneses elemi cellában, de gyakran nem is azonos számban vannak jelen.

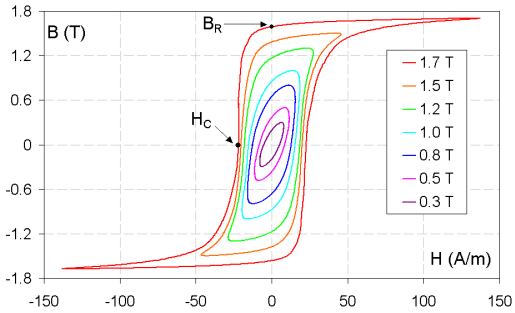
16.5. Ferromágneses domének, hiszterézis

Az eddigi számolások során nem törődtünk a véges minta körül létrejövő mágneses tér energiájával, pedig az energiamérleg szempontjából ez nem hagyható el.



16.2 ábra: Egydoménes és kétdoménes anyag által keltett mágneses tér

Ahogy az az ábrán látszik, a minta által keltett külső tér, és ezzel az energia is jelentősen eltér, az energia lecsökken, ha a minta nem homogénen van mágnesezve, hanem benne ellentétesen polarizált domének találhatók. A két domén határán lesz egy olyan tartomány ahol a spinek rosszul illeszkednek, s emiatt a domének közötti fal kialakulása energiaveszteséget jelent. Ez a fal felületével arányos, míg a térenergia csökkentésével elérhető csökkenés a minta térfogatával lesz arányos. Nagy minta esetén tehát ez a csökkenés a domináns, kedvező lesz a doménszerkezet, kis méretű minták azonban lehetnek egydoménesek. A hiszterézis a ferromágneses anyagoknak az átmágnesezéssel szemben mutatott ellenállása. Másképpen megfogalmazva, amikor átakarjuk mágnesezni az anyagot, akkor az valamennyire emlékszik korábbi állapotára, ezért adott irányú és mértékű átmágnesezés után kapott remanens mágnesség különböző lehet az anyag előzetes mágnesezettségének függvényében. Legszemléletesebben ezt akkor láthatjuk ha teljesen átmágnesezzük az anyagot egyik, majd másik irányba. A bejárt út különbözik a H-M-síkon.



16.3 ábra: Hiszterézisgörbe(Wikipédia)

Itt külön névvel illetjük a külső tér megszűnésekor hátrahagyott mágnesezettséget és az anyag terét éppen kompenzáló külső térerősséget*(koercitív erő)*. A hiszterézis jelenségét tulajdonképpen az átmágnesezés során történő doménfalmozgás váltja ki. A hiszterézis miatt különböző alkalmazáshoz különböző tulajdonságú anyag kell. Transzformátorhoz például lágymágneses anyagot kell használni, hogy minél kisebb legyen a veszteség. Ennek a hiszterézisgörbéje keskeny. Ilyen anyag például a lágyvas. Ebben "oldva" van a szén, így a domén falak nem tudnak mozogni, mert fennakadnak a "szennyező" szén atomokon. Memóriákhoz pedig keménymágneses anyagot kell használni.

16.6. Spinüveg, mágneses ellenállás, szupravezetés

Spinüvegnek nevezik az olyan anyagokat, amikben a mágneses szennyezők koncentrációja elég nagy ahhoz, hogy a mágneses momentumok közötti Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida*(RKKY)* kölcsönhatást ne hagyhassuk el, de túl kicsi ahhoz, hogy rendezett mágneses szerkezet alakuljon ki. Az RKKY kölcsönhatás egy csatolási mechanizmus a magmágneses momentumok, vagy a belső d és f héjakon levő elektronspinek és a vezetési elektronok között. Az alacsony hőmérsékleten ilyenkor kialakuló, mágnesesen rendezetlen, de mereven befagyott fázist nevezik spinüvegnek. Kísérleti tapasztalatok, ha rézbe vagy aranyba néhány százaléknyi mangánt vagy vasat teszünk:

- Magas hőmérsékleten a hőmérséklet csökkenésekor a nulla mágneses térerű határesetben mért szuszceptibilitás a rendezetlen paramágneses ionok Curie-jellegű viselkedésének megfelelően növekszik, majd egy jellegzetes T_g hőmérsékleten anélkül, hogy ott divergálna, antiferromágnesekre emlékeztető módon elkezd hirtelen csökkenni.
- A mágnesezettségben jelentőssé válnak a nemlineáris járulékok

- A szuszceptibilitásnak nulla mágneses térben mért csúcsa folyamatosan "lekerekedik", ha a szuszceptibilitást nem statikus térben, hanem véges frekvencián mérjük
- T_g alatti hőmérsékleten a spinek semmilyen rendeződése nem mutatható ki szerkezetvizsgálati módszerekkel.
- A fajhőben T_g-nél semmilyen anomália nincs
- T_g alatt a mágneses térre adott válasz függ a minta előéletétől
- Ha külső mágneses térben hűtött mintáról lekapcsoljuk a teret, a mágnesezettség gyorsan lecsökken a remanens mágnesezettség értékére, majd ezután lassan, nem exponenciálisan csökken nullára.

A magyarázata részben a vegyes ferro- és antiferromágneses kötések üvegszerű amorf elhelyezkedésében rejlik.Amúgy meg baromi bonyolult és Groma se beszélt róluk. A 3. Sólyom könyv végén bentvan.
Ferromágneses és nemmágneses rétegek szendvicselésével speciális vezető eszköz készíthető, amelynek ellenállása nagyban függ a külső mágneses tértől: ha külső mágneses térben van, akkor igen kicsi az ellenállása, ha azonban nincs jelen tér, akkor igen nagy ellenállást mutat. Az effektus mértéke akár több 100% is lehet. A jelenség oka, a különböző spinű elektronokkal szemeben mutatott ellenállás, amely mögött az RKKY magspin és vezetési elektron hiperfinom mágneses csatolása áll.

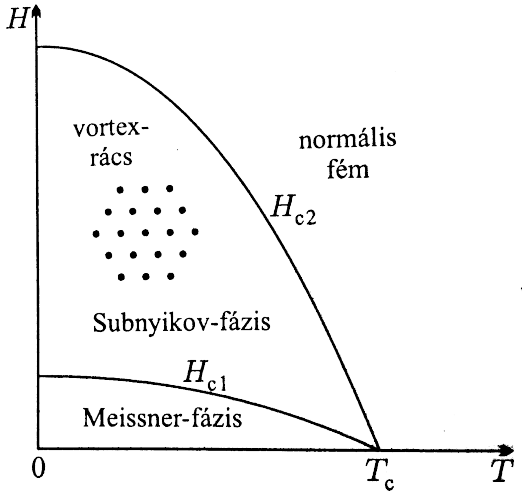
16.6.1. Szupravezetés

A fémek elektromos ellenállása azért csökken a hőmérséklet csökkenésekor, mert csökken a rácsrezgéseken való szórásból adódó elektron visszaszórási járulék. $T = 0$-n a nullapontrezgés ellenére ez a járulék eltűnik. Ideális kristályrácsú fém vezetőképessége ilyenkor végtelenné válna, véges hőmérsékleten viszont mindig véges ellenállást kellene tapasztalni. Valójában a mintában jelenlevő szennyezések, inhomogenitások miatt normális körülmények között az elektronok az abszolút nulla hőmérsékleten is véges élettartammal rendelkeznek, s emiatt a vezetőképesség itt is véges.
1911-ben Heike Kamerlingh Onnes holland fizikus megfigyelte, hogy a folyékony halmazállapotban könnyen tisztítható, ezért a legtisztább fémnek tekintett higany ellenállása a hőmérséklet csökkentésekor nem fokozatosan csökkent, hanem $4,2K$ körül ugrásszerűen, nagyon kicsi, mérési pontosságon belül nullának tekinthető értékre csökkent. Ezt később más fémeknél is megfigyelték. A legtöbb anyagnál ez nagyon alacsony hőmérsékleten következik be, de ma már több olyan anyagcsalád is ismert, ahol az átalakulás hőmérséklete közel van a $100K$-hez. Az eltűnő ellenállás következménye az ún. perzisztens áram. Gyűrű alakú szupravezető mintában az ellenállás miatt időtlen időkig keringene. Az eddigi mérések alapján az áram legalább 10^5 évig megmaradna. Azonban ez az áram nem a minta belsejében, hanem a felület közelében folyik. Nem lehet azonban tetszőleges nagy áramot szállítani szupravezetőkön. Egy J_c kritikus érték felett a minta megszűnik szupravezetőként viselkedni. Ez a kritikus áram $1mm$-es átmérőjű drótban akár $100A$ is lehet. Az áram által a minta körül keltett mágneses tér az ami önpusztító hatásként lerombolja a szupravezetést. A kritikus áram nagysága függ az izotóp összetételtől is.
A végtelen vezetőképesség miatt a szupravezetőt ideális vezetőnek is tekinthetnénk, amikben csak úgy folyhat véges áram, ha az elektromos tér eltűnik: $\mathbf{E} = 0$. Ekkor viszont a Maxwell-egyenletek alapján tudjuk, hogy a minta belsejében a mágneses tér nem változhat. Ha külső mágneses teret kapcsolunk be, az nem tud az ideálisan vezető tartományba behatolni. Ha a mintát normális állapotában helyeznénk mágneses térben, s ezután változna ideális vezetővé, az átalakulás ellenére a normális állapotban behatolt mágneses térnek változatlanul fenn kell maradnia, azaz a tér befagyna a mintába, tehát a vezetőben megfigyelhető mágneses tér nagyságának függnie kellene a minta előéletétől. Ezzel szemben Walther Meissner és Robert Ochsenfeld azt tapasztalta, hogy a szupravezető belsejében mindig nulla a mágneses indukció. A szupravezetőt mágneses térbe téve a tér nem tud behatolni a mintába, ha pedig a normális minta mágneses térben válik szupravezetővé, akkor a tér kiszorul belőle. Ezt Meissner-Oschenfeld effektusnak nevezik. Ezt a jelenséget úgy értelmezhetjük, hogy a mágneses tér hatására a minta felületén egy keskeny, de az atomi méreteknél jóval nagyobb vastagságú tartományban felületi áram indukálódik. Ez rontja le a tér hatásár, és tartja fenn azt az állapotot, amiben a mágneses indukció a minta belsejében eltűnik:

$$\mathbf{B} = \mu_0 (\mathbf{H} + \mathbf{M}) = 0 \Rightarrow \mathbf{M} = -\mathbf{H}$$

Azaz $\chi_m = -1$, ami ideális diamágnesnek felel meg.
A Meissner-Oschenfeld jelenség általában csak viszonylag gyenge terekben figyelhető meg. Elég erős, bizonyos anyagokban már $H \approx 10^2 - 10^3$ oersted nagyságú tér teljesen lerombolhatja a szupravezetést és ekkor a minta normális fémekre jellemző viselkedést mutat. Attól függően, hogy hogyan következik be a normális fázisba való átalakulás, a szupravezetőket két nagy csoportba lehet besorolni:
Elsőfajú szupravezetők esetében a külső mágneses tér erősségének növelése közben a minta belsejében $\mathbf{B}$ mindaddig nulla értéket vesz fel, amíg a külső mágneses tér egy hőmérsékletfüggő $H_c(T)$ értéket el nem ér. Ennél az

értéknél a minta teljes egészében normálissá válik. Ezt azért nevezik elsőfajú szupravezetésnek, mert a kritikus érték elérésekor bekövetkező átalakulás elsőrendű.
Másodfajú szupravezetők esetén a mágneses tér egy H_{c1}-nek nevezett alsó kritikus értéknél kezd el behatolni a mintába, de nem ugrásszerűen, hanem folytonosan. A tér teljes behatolása azonban csak a H_{c2} felső kritikus térnél következik be, a szupravezetés ekkor szűnik meg. Tehát a másodfajú szupravezetőket az jellemzi, hogy bennük a mágneses tér behatolása előbb történik meg, minthogy az elektromos árammal szembeni ellenállás megjelenne.



16.4 ábra: Másodfajú szupravezetők fázisdiagramja

Az alsó kritikus térnél gyengébb térben a minta ideális diamágnesként viselkedik, ez a Meissner-fázis. A felső kritikus érték felett pedig normális viselkedést tapasztalunk. A kettő között az úgynevezett Subnyikov-fázisban a minta inhomogénné válik, belsejében váltakozva normális és szupravezető tartományokat találunk. A normális fázis a külső mágneses tér irányában álló, csőszerű tartományokban jelenik meg, ide be tud hatolni a mágneses tér. A csőben található mágneses indukció akkora, hogy a csövön éppen egy fluxuskvantumnyi mágneses fluxus halad át. A csövek felületén körbefolyó áram leárnyékolja ezt a fluxust, s a csövek közötti tartomány szupravezető. Az örvényszerű áramok miatt ezeket a csöveket vortexeknek nevezzük. A kristályos rend hibái megakadályozzák, hogy a vortexek elmozduljanak, ezért külső áram ellenállás nélkül folyhat a mintának ebben az állapotában is.
Fritz és Heinz London egy egyszerű egyenletet javasolt a szupravezetők elektromos és mágneses tulajdonságainak leírására. Azt tették fel, hogy a Maxwell-egyenletek továbbra is változatlanul érvényesek, csupán az anyagi egyenleteket kell módosítani. Tekintsük úgy a szupravezetőt, mintha abban a normális elektronok mellett, $-e^*$ töltésű és m^* tömegű töltéshordozók is jelen lennének, n_s^* sűrűséggel. Nevezzük ezeket szupravezető elektronoknak. Az általuk vitt áramsűrűség, valamint mozgásegyenlet:

$$\mathbf{j}_s = -e^* n_s^* \mathbf{v}_s$$

$$m^* \frac{d\mathbf{v}_s}{dt} = -e^* \mathbf{E}$$

Behelyettesítve a mozgásegyenletbe az áramsűrűség kifejezését:

$$\frac{d\mathbf{j}_s}{dt} = \frac{n_s^* e^{*2}}{m^*} \mathbf{E}$$

Ez az úgynevezett első London-egyenlet; ez fejezi ki a végtelen vezetőképességet. Egy további összefüggést kapunk, ha ezt beírjuk a $\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$ egyenletbe:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{m^*}{n_s^* e^{*2}} \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{j}_s\right) = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$$

Ezt átrendezve:

$$\frac{d}{dt}\left(\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{j}_s + \frac{n_s^* e^{*2}}{m^*} \mathbf{B}\right) = 0$$

Egyszer integrálva idő szerint:

$$\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{j}_s = -\frac{n_s^* e^{*2}}{m^*} \mathbf{B}$$

Ez a második London-egyenlet. Ha a mágneses indukciót felírjuk vektorpotenciálos alakba, akkor a rotációktól is megszabadulhatunk:

$$\mathbf{j}_s = -\frac{n_s^* e^{*2}}{m^*}\mathbf{A}$$

Bevezetve a $\lambda_L^2 = \frac{m^*}{n_s^* e^{*2}\mu_0}$ hosszúság dimenziójú mennyiséget, a két London egyenlet:

$$\mathbf{E} = \mu_0 \lambda_L^2 \frac{d\mathbf{j}_s}{dt} \qquad \mathbf{B} = -\mu_0 \lambda_L^2 \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{j}_s$$

Jóval bonyolultabb számolásokból kijön, hogy a szupravezető elektronok valójában a normális elektronok kötött párjai, az ún. Cooper-párok. Ahhoz, hogy a fenti elméletet össze lehessen egyeztetni a mérési eredményekkel, az $e^* = 2e$, $m^* = 2m$ és $n_s^* = \frac{n_s}{2}$ paraméterválasztással kell élnünk. A Maxwell-egyenletek szerint statikus esetben

$$\frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{B} = \mathbf{j}_s$$

képezzük mindkét oldal rotációját:

$$\boldsymbol{\nabla} \times (\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{B}) = \mu_0 \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{j}_s = -\mu_0 \frac{n_s^* e^2}{m}\mathbf{B} = -\frac{1}{\lambda_L^2}\mathbf{B}$$

Adjuk meg az egyenlet megoldását egy speciális esetre, mikor az $x > 0$ térfelet szupravezető anyag tölti ki, az $x <$ tartományban pedig normális fém vagy vákuum van, a külső mágneses tér pedig homogén és z irányú, de előbb alakítsuk az egyenlet bal oldalát:

$$\boldsymbol{\nabla} \times (\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{B}) = \boldsymbol{\nabla}(\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{B}) - \triangle \mathbf{B}$$

De tudjuk, hogy $\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{B} = 0$, így a megoldandó teljes egyenlet:

$$\triangle \mathbf{B} = \frac{1}{\lambda_L^2}\mathbf{B}$$

Ez a z komponensre oldandó csak meg, a megoldás egyszerűen adódik:

$$B_z(x) = \begin{cases} B_0 & x < 0 \\ B_0 e^{-\frac{x}{\lambda_L}} & x > 0 \end{cases}$$

Látható tehát, hogy λ_L szabja meg, hogy milyen mélyen tud behatolni az anyagba a mágneses tér. Ezt London-féle behatolási mélységnek nevezik.
Abból, hogy a szupravezető belsejében az áramnak el kell tűnnie, közvetlenül következik, hogy a gyűrűn áthaladó mágneses fluxus nem lehet tetszőleges, hanem csak egy ϕ_0 fluxuskvantum egész számú többszöröse. Induljunk ki a Bohr-Sommerfeld-féle kvantumfeltételből:

$$\oint_C \mathbf{p} \cdot d\mathbf{l} = nh$$

Tudjuk, hogy

$$\mathbf{p} = m^* \mathbf{v}_s - e^* \mathbf{A}$$

így:

$$m^* \oint_C \mathbf{v}_s \cdot d\mathbf{l} - e^* \oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} = nh$$

A sebességet a szupravezető elektronok áramával kifejezve átrendezés után:

$$\frac{m^*}{n_s^* e^{*2}} \oint_C \mathbf{j}_s \cdot d\mathbf{l} + \oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} = \frac{|n|\, h}{e^*}$$

Ha a gyűrű elég vastag ahhoz, hogy a belsejében ne folyjon áram, akkor az integrálási utat választhatjuk úgy, hogy, hogy a bal oldal első tagjának járuléka tűnjön el, a második tagra pedig alkalmazzuk a Stokes-tételt:

$$\oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} = \int_F \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A} d\mathbf{S} = \int_F \mathbf{B} d\mathbf{S} = \phi = \frac{|n|\, h}{e}$$

Azaz tényleg megkaptuk azt, hogy a fluxus, csak a $\phi_0 = \frac{h}{e^*}$ fluxuskvantum egész számú többszöröse lehet.

17. Kristályos anyagok fizikája(Novák Martin)

2A szilárd testek bizonyos makroszkopikus tulajdonságai, a kristályok szabályos külső alakja régóta jól ismert. Kristályos anyagok estén szerencsénkre sokkal több jelenséget egyszerűben lehet kezelni mint nem kristályos anyagokban.

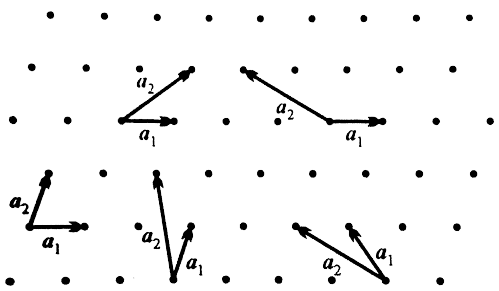
17.1. Szimmetriák, pontcsoportok, Bravais-rácsok

A kristályos szerkezetre jellemző szabályosságot leggyakrabban úgy fogalmazzák meg, hogy a kristály invariáns bizonyos diszkrét transzformációkkal szemben. Ezek alapján mondhatjuk azt, hogy egy anyagot akkor nevezünk kristályos szerkezetűnek, ha található három olyan, nem egy síkban fekvő $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$ és $\mathbf{a}_3$ vektor, hogy a mintát egy

$$\mathbf{t}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$$

vektorral eltolva, ahol n_1, n_2 n_3 egész számok, akkor a minta önmagával fedésbe kerül. Ha az együtthatók nem egész számok, akkor ez nem teljesül. Az $\mathbf{a}_i$ vektorokat elemi rácsvektornak nevezzük. A diszkrét eltolásokkal szembeni invariancia a különböző fizikai mennyiségekben is megjelenik, azaz a mérhető lokális mennyiségekre teljesül, hogy

$$F(\mathbf{r}) = F(\mathbf{r} + \mathbf{t}_n)$$



17.1 ábra: Elemi rácsvektorok

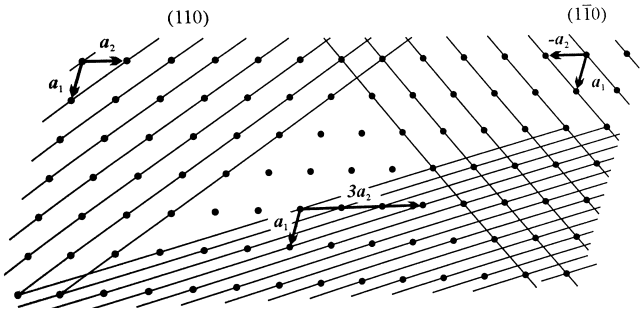
Nem mérhető mennyiségekre mint például az elektron hullámfüggvénye azonban nem kell teljesülnie. Az elemi rácsvektorok megválasztása azonban nem mindig egyértelmű, mint például ahogy az ábrán is látszik. Megszorításként szokás kikötni, hogy a rácsvektorok által közbefogott térfogat minél kisebb legyen, valamint a rácsvektorok is a lehető legrövidebbek legyenek. Célszerű továbbá a vektorokat úgy megválasztani, hogy azokat valamilyen szimmetriaművelet kösse össze.
Ha az elemi rácsvektorok ismeretében egy adott pontból mint kezdőpontból indulva a $\mathbf{t}$ vektorokat felrajzoljuk n_1, n_2, n_3 minden egész számú értékére, akkor ezek a pontok egy szabályos, de "csupasz" rácsot fognak alkotni. Az így kapott rácsot Bravais-rácsnak vagy pontrácsnak nevezzük. A rács pontjai tehát az

$$\mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$$

pontok. Egyetlen rácspontot tartalmazó tartományt elemi cellának nevezzük. Ennek a cellának nem feltétlenül kell magas szimmetriával rendelkeznie, csak annyi a követelmény, hogy egymásba eltolással átvihetők legyenek. A cella megválasztásának egyik módja az, hogy a rácsvektorok által kifeszített paralelogrammával, vagy paralelepipedonnal azonosítjuk. Másik módszer az úgynevezett Dirichlet-szerkesztés. Itt tekintjük a kristályrács egy pontját, és ehhez a ponthoz hozzárendeljük a kristály azon tartományát, ami közelebb van ehhez a rácsponthoz, mint bármely másik rácsponthoz a kristályban. Az így kapott tartományt Wigner-Seitz cellának nevezzük.
A bázis elemeinek $\mathbf{r}_i$ helyvektorát a Bravais-rács rácspontjaitól mérjük, s bármelyik elemi cellát tekintjük is, ugyanazokat a vektorokat találjuk. A helyvektorokat elemi rácsvektorok segítségével kifejezve

$$\mathbf{r}_i = x_{i1}\mathbf{a}_1 + x_{i2}\mathbf{a}_2 + x_{i3}\mathbf{a}_3$$

itt az elemi rácsvektorok egynél nem nagyobb törtszámok. Tömör jelölési mód, hogy csak ezt a három számot írják le egymás mellé.*(még bővebben a Sólyom könyvben, mert ez már így is sok.)*
Érdekes lehet az egy síkban fekvő atomokat nézni. A Bravais-rács három tetszőleges, nem egy egyenesbe eső pontján sík fektethető, amit ugyanakkora távolságokkal eltolva lefedhetjük vele az összes rácspontot.



17.2 ábra: Rácssíkok

A kristálysíkokat számhármasokkal jelöljük. A számhármas meghatározásához kikeressük a síkseregből az origóhoz legközelebbi olyan síkot, ami mindhárom kristálytani tengelyt egy rácspontban metszi. Az elemi cella élhosszainak az a_1, a_2, a_3 rácsállandóknak az egységében mérve legyenek a metszéspontok $(p, 0, 0)$, $(0, q, 0)$ és $(0, 0, r)$, így a (p, q, r) számhármas az úgynevezett Weiss-index egyértelműen jellemzi a síkot. A síkok egyenlete tehát

$$\frac{x_1}{pa_1} + \frac{x_2}{qa_2} + \frac{x_3}{ra_3} = n$$

Érdemes még bevezetni az úgynevezett Miller-indexeket. Ez is egy számhármas, melynek tagjai a következő kapcsolatban vannak a Weiss-indexekkel:

$$h : k : l = \frac{1}{p} : \frac{1}{q} : \frac{1}{r}$$

Ezek a számok relatív prímek. A szerkezet kísérleti meghatározása, illetve a kristályban lezajló folyamatok leírásának könnyebbé tételéhez szokás definiálni az úgynevezett reciprok rácsot, illetve bázist. Az elemi rácsvektorok az $\mathbf{x}$, $\mathbf{y}$, $\mathbf{z}$ derékszögű bázisban ferdeszögű bázist alkotnak. Derékszögű rendszerben felírva ezeket:

$$\mathbf{a}_i = a_{ix}\mathbf{x} + a_{iy}\mathbf{y} + a_{iz}\mathbf{z}$$

Rendezzük az együtthatókat mátrixba:

$$\underline{\underline{A}} = \begin{pmatrix} a_{1x} & a_{2x} & a_{3x} \\ a_{1y} & a_{2y} & a_{3y} \\ a_{1z} & a_{2z} & a_{3z} \end{pmatrix}$$

Ezzel a Bravais-rács tetszőleges pontja:

$$\mathbf{R}_n = \underline{\underline{A}} \cdot \begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{pmatrix}$$

Vegyük észre azt is, hogy az elemi cella térfogata:

$$V = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a_2} \times \mathbf{a_3}) = det\underline{\underline{A}}$$

Definiáljunk egy $\underline{\underline{B}}$ mátrixot is a következő módon:

$$\underline{\underline{BA}} = 2\pi\underline{\underline{I}}$$

vagy indexes formába írva: $B_{il}A_{lj} = 2\pi\delta_{ij}$. Ezt felfoghatjuk úgy is, az $\underline{\underline{A}}$ mátrix sorai tartalmazzák az elemi rácsvektorokat/bázist, a $\underline{\underline{B}}$ mátrix oszlopai pedig a reciprokvektorokat/reciprokbázist átskálázva azaz:

$$\mathbf{b}_i\mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$$

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi\frac{\mathbf{a_2} \times \mathbf{a_3}}{det\underline{\underline{A}}} \qquad \mathbf{b}_2 = 2\pi\frac{\mathbf{a_3} \times \mathbf{a_1}}{det\underline{\underline{A}}} \qquad \mathbf{b}_3 = 2\pi\frac{\mathbf{a_1} \times \mathbf{a_2}}{det\underline{\underline{A}}}$$

Ezekből a vektorokból építhetjük fel a reciprok rácsot:

$$\mathbf{G}_h = h_1\mathbf{b}_1 + h_2\mathbf{b}_2 + h_3\mathbf{b}_3$$

Vegyük észre azt is, hogy a reciprokrácsban az elemi cella térfogata a következő:

$$V_r = \mathbf{b}_1 \cdot (\mathbf{b_2} \times \mathbf{b_3}) = \frac{(2\pi)^3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a_2} \times \mathbf{a_3})} = \frac{(2\pi)^3}{V}$$

Ugyan úgy definiálható itt is a Wigner-Seitz-cella, de itt ezt Brillouin-zónának nevezik. Érdemes még belátni azt, hogy a

$$\mathbf{G}_{hkl} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$$

vektor merőleges a (h, k, l) Miller-indexű síkra. Tudjuk, hogy az $\frac{m\mathbf{a}_1}{h} - \frac{m\mathbf{a}_2}{k}$ vektor benne fekszik a (h, k, l) síkban, így:

$$(h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3) \cdot \left(\frac{m\mathbf{a}_1}{h} - \frac{m\mathbf{a}_2}{k}\right) = 0$$

A nem szorzás után a nem megegyező indexű tagok nullák, mivel merőlegesek egymásra, a megegyező indexűek pedig mindkettő 2π-t ad, de ellentétes előjellel. Ugyan ez belátható a többi vektorra is. Ezt felhasználva könnyen kifejezhető a (h, k, l) Miller-indexű síkok d_{hkl} távolsága:

$$d_{hkl} = \frac{1}{h}\mathbf{a}_1\frac{\mathbf{G}_{hkl}}{|\mathbf{G}_{hkl}|} = \frac{2\pi}{|\mathbf{G}_{hkl}|}$$

Ide még lehet, hogy kéne írni a szimmetriákról, forgatásokról, pontcsoportokról de azt Groma se nagyon mondta el, sok benne a szöveg, meg a Sólyom könyvben bent van és annyira nem tűnik fontosnak. Különböző kristályszerkezetek is kellhetnek

17.2. Diffrakció, kinematikus elmélet

Tudjuk, hogy az irányfüggő mikroszkopikus mennyiségek mérésével információt kaphatunk a kristály szimmetriájáról, így közvetve a szerkezetéről. A teljes szerkezetet, a Bravais-rácsot és a bázisban az atomok helyét azonban csak akkor tudjuk meghatározni, ha az anyagot valamilyen módon át tudjuk világítani. Ehhez olyan sugárzás kell, ami lehetőleg mélyen hatol a mintába, hogy ne csak a felület közelében levő atomokat érzékelje, és melynek hullámhossza összemérhető az elemi cella méreteivel. Ilyen sugárzás a röntgensugárzás.

17.2.1. A diffrakció dinamikai elmélete

Tekintsük a mintát sok, egymás mögé pakolt rácsnak. Ekkor gömbhullámok fázishelyes interferenciáját kell meghatározni. Írjuk fel a Maxwell-egyenleteket:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \qquad \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \qquad \nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}$$

Valamint tudjuk a mágneses térerősség és az elektromos eltolásvektor definícióját:

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}(\mathbf{E})$$

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{B}}{\mu_0} - \mathbf{M}(\mathbf{B})$$

Itt az áram- és töltéssűrűséggel mi gazdálkodunk, a polarizáció és a mágnesezettség viszont az anyag válasza. Mondjuk azt, hogy nincs se áramsűrűség, se töltéssűrűség, valamint jelenleg a mágnesezettség se játszik fontos szerepet, így ezeket hagyjuk el, valamint térjünk át potenciálos írásmódra, valamint Lorentz-mértékre:

$$\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B}$$

$$\mathbf{E} = -\nabla \phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial \phi}{\partial t} = 0$$

Ezeket felhasználva a következő hullámegyenletekre jutunk:

$$\triangle \phi - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = \frac{\nabla \cdot \mathbf{P}}{\varepsilon_0}$$

$$\triangle \mathbf{A} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = -\mu_0 \left(\nabla \times \mathbf{M} + \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} \right) = -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t}$$

Hertznek az ötlete támadt, hogy ha bevezetjük a következő jelöléseket, akkor a két egyenlet egyként írható fel, ezért legyen:

$$\mathbf{A} = \mu_0 \frac{\partial \boldsymbol{\pi}_e}{\partial t} \qquad \phi = -\frac{\nabla \cdot \boldsymbol{\pi}_e}{\varepsilon_0}$$

Ezeket felhasználva a következő írható:

$$-\frac{1}{\varepsilon_0}\left(\triangle \left(\nabla \cdot \boldsymbol{\pi}_e \right) - \frac{1}{c^2} \nabla \cdot \left(\frac{\partial^2 \boldsymbol{\pi}_e}{\partial t^2} \right) \right) = \frac{1}{\varepsilon_0} \nabla \cdot \mathbf{P}$$

"Egyszerűsítve" a divergenciával*(végtelenben lecsengő megoldások feltételezése)*, valamint a Hertz által kitalált potenciált visszahelyettesítve az elektromos térerősség potenciálos alakjába a következő két egyenletet kapjuk:

$$\triangle \boldsymbol{\pi}_e - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \boldsymbol{\pi}_e}{\partial t^2} = -\mathbf{P}(\mathbf{E})$$

$$\mathbf{E} = \frac{1}{\varepsilon_0} \nabla \left(\nabla \cdot \boldsymbol{\pi}_e \right) - \mu_0 \frac{\partial^2 \boldsymbol{\pi}_e}{\partial t^2}$$

Meg kell határoznunk még a polarizációt az elektromos tér függvényében. Ehhez használjuk azt a klasszikus képet, hogy az elektron rugóval van a rácsba kötve, valamilyen csillapítás, és gerjesztő elektromos tér mellett:

$$m\ddot{\mathbf{r}} = -D\mathbf{r} - \lambda \dot{\mathbf{r}} - e\mathbf{E}(t)$$

Legyen a gerjesztő elektromos tér periodikus és a helyfüggést is keressük ilyen alakban:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i\omega t} \qquad\qquad \mathbf{r} = \mathbf{r}_0 e^{i\omega t}$$

Behelyettesítve a differenciálegyenletbe, bevezetve a szokásos $\omega_0^2 = \frac{D}{m}$ és $\beta = \frac{\lambda}{2m}$ jelöléseket $\mathbf{r}_0$-ra a következőt kapjuk:

$$\mathbf{r}_0 = \frac{-\frac{e}{m}\mathbf{E}_0}{\omega_0^2 - \omega^2 + 2\beta\omega}$$

A β-s tag a bevilágító röntgensugárzás hullámhossza miatt elhagyható, az ω_0^2-es pedig az elektron tömege miatt hagyható el az ω^2 mellett. Így a következő marad:

$$\mathbf{r_0} = \frac{e}{m\omega^2}\mathbf{E}$$

Ezt megszorozva e-vel, megkapjuk az egy elektronra jutó dipólmomentumot. Ha ezt megszorozzuk a nem indukált elektronsűrűséggel, akkor megkapjuk a teljes dipólmomentumot, ami a következő:

$$\mathbf{P}(\mathbf{E}) = \frac{e^2}{m\omega^2}\rho(\mathbf{r})\mathbf{E}$$

Azonban a $\rho(\mathbf{r})$ jóval kisebb a megvilágító elektronsűrűségnél, így ezt felírhatjuk sor alakban. A következőt kapjuk:

$$\triangle\boldsymbol{\pi}_e - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\boldsymbol{\pi}_e}{\partial t^2} = -\frac{e^2}{m\omega^2}\rho(\mathbf{r})\mathbf{E} = -\beta^*(\omega)\rho(\mathbf{r})\mathbf{E}$$

A töltéssűrűség soralakja miatt a megoldást keressük a következő módon:

$$\boldsymbol{\pi}^* = \boldsymbol{\pi}_0 + \boldsymbol{\pi}_1 + ...$$

Itt a csillag nélküli tagok csak tisztán helyfüggőek. Ezzel írjuk fel:

$$\boldsymbol{\pi}_e = \boldsymbol{\pi}^*(\mathbf{r})e^{i\omega t}$$

Ezeket visszahelyettesítve és felhasználva, hogy $\omega = c \cdot k$ a következőt kapjuk:

$$\triangle\boldsymbol{\pi}^* + k^2\boldsymbol{\pi}^* = -\rho(\mathbf{r})\beta^*(\omega)\left(\frac{1}{\varepsilon_0}\boldsymbol{\nabla}\left(\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\pi}^*\right) - \omega^2\mu_0\boldsymbol{\pi}^*\right)$$

Ebbe behelyettesítve a $\boldsymbol{\pi}*$ alakját szétesik két egyenletre*(Itt van valami boszorkányság, az indexekkel. A π_1-hez miért π_0 jön be?)*

$$\triangle\boldsymbol{\pi}_0 + k^2\boldsymbol{\pi}_0 = 0$$

$$\triangle\boldsymbol{\pi}_1 + k^2\boldsymbol{\pi}_1 = -\rho(\mathbf{r})\beta^*(\omega)\left(\frac{1}{\varepsilon_0}\boldsymbol{\nabla}\left(\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\pi}_0\right) - \omega^2\mu_0\boldsymbol{\pi}_0\right)$$

Vegyük észre, hogy az első egyenlet az a Helmholtz-egyenlete. Tegyük fel, hogy az első tag a következő alakú: $\boldsymbol{\pi}_0 = \boldsymbol{\alpha}e^{i\mathbf{kr}}$. Ezt behelyettesítve a Helmholtz-egyenletbe megkapjuk a diszperziós relációt:

$$\omega^2 = c^2\left|\mathbf{k}\right|^2$$

Ha a második egyenletbe is behelyettesítjük a $\boldsymbol{\pi}_0$-t, akkor rendezve a következőt kapjuk:

$$\triangle\boldsymbol{\pi}_1 + k^2\boldsymbol{\pi}_1 = -\rho(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}r}\boldsymbol{\Theta}(\mathbf{k})$$

Itt a $\boldsymbol{\Theta}$ tag tartalmaz mindent amit az előzőleg elvégzett deriválásokból jön, kivéve a töltéssűrűséget és az exponenciális tagot. Ez egyébként nem más mint az inhomogén Helmholtz-egyenlet, amit meg tudunk oldani Green-függvénnyel:

$$\boldsymbol{\pi}_1(\mathbf{r}) = \int\rho(\mathbf{r}')e^{i\mathbf{kr}'}\boldsymbol{\Theta}(\mathbf{k})G(\mathbf{r}-\mathbf{r}')d\mathbf{r}' = \int\rho(\mathbf{r}')e^{i\mathbf{kr}'}\boldsymbol{\Theta}(\mathbf{k})\frac{1}{4\pi}\frac{e^{i|\mathbf{k}||\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}d\mathbf{r}' \approx \int\rho(\mathbf{r}')e^{i\mathbf{kr}'}e^{-i\mathbf{n}|\mathbf{k}|\mathbf{r}'}d\mathbf{r}'\frac{e^{i|\mathbf{k}||\mathbf{r}|}}{4\pi\left|\mathbf{r}\right|}\boldsymbol{\Theta}$$

Az integrálos tagot nevezzük el $A(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_o)$. Ha átrendezzük a következőt kapjuk:

$$A(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_o) = \int\rho(\mathbf{r}')e^{i(\mathbf{k}_i-\mathbf{k}_o)\mathbf{r}'}d\mathbf{r}'$$

Ez nem más mint a töltéssűrűség Fourier-transzformáltja, $\mathbf{k}_i$ a bemenő, a $\mathbf{k}_o$ pedig a kimenő sugárzás hullámszáma. A mérések során intenzitást mérünk:

$$I = |\mathbf{E}|^2 \propto |\mathbf{A}|^2$$

Tehát elveszítjük a fázisinformációt. De szerencsénkre tudjuk, hogy a kristályszerkezet miatt a töltéssűrűség nem lehet akármilyen, periodikusnak kell lennie a kristályon belül. Tegyük fel, hogy egyféle atom van, ennek a helyét a következő adja meg:

$$\mathbf{r} = \mathbf{R}_n + \mathbf{r}_p$$

Itt az első tag az elemi cella sarkába mutat, a második pedig az elemi cella sarkából a cellán belül elfoglalt helyre. Tehát a következő függvény Fourier-transzformáltját keressük:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_n^N \sum_p^\alpha \rho_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n - \mathbf{r}_p)$$

Ezzel felírva az A-t:

$$\sum_n^N \sum_p^\alpha \int \rho_0(\mathbf{r}-\mathbf{R}_n-\mathbf{r}_p) e^{i\mathbf{kr}} d^3\mathbf{r} = \sum_n^N \sum_p^\alpha \int \rho_0(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}'+\mathbf{R}_n+\mathbf{r}_p)} d^3\mathbf{r}' = \left(\int \rho_0(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{kr}'} d^3\mathbf{r}'\right) \left(\sum_n^N e^{i\mathbf{kR}_n}\right) \left(\sum_p^\alpha e^{i\mathbf{kr}_p}\right)$$

Az első tagot atomszórási tényezőnek nevezik. Ezt egyetlen atom töltéssűrűsége határozza meg. A harmadik tagot struktúra faktornak nevezik, ami az elemi cellára vonatkoztatott összegzés, így annak a sajátságait hordja magán. A második tagot pedig rácsösszegnek nevezik, ez pedig az elemi cellákra vett összegzés.

17.2.2. Kinematikus elmélet

Nézzük meg jobban a rácsösszeget. Tudjuk, hogy

$$\mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3 \qquad \mathbf{k} = q_1\mathbf{b}_1 + q_2\mathbf{b}_2 + q_3\mathbf{b}_3$$

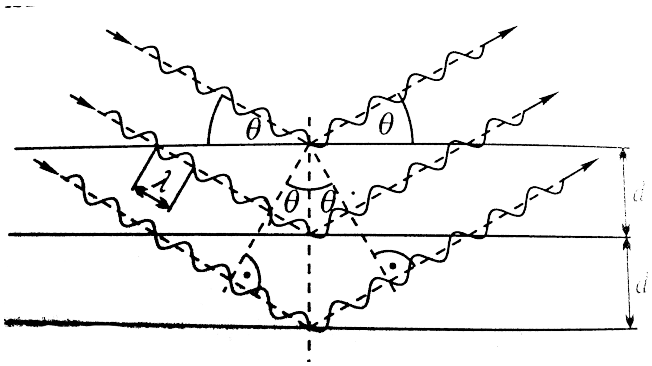
így

$$\sum_n^N e^{i\mathbf{kR}_n} = \sum_{n_1}^{N_1} e^{in_1q_1} \sum_{n_2}^{N_2} e^{in_2q_2} \sum_{n_3}^{N_3} e^{in_3q_3}$$

vegyük észre, hogy ezek geometriai sorok. Vegyük ki az egyik tagját és írjuk fel az összeg eredményét:

$$\sum_{n_1}^{N_1} e^{in_1q_1} = \frac{e^{2\pi i q_1 N_1} - 1}{e^{2\pi i q_1} - 1} = \frac{e^{i\pi q_1 N_1}\left(e^{i\pi q_1 N_1} - e^{-i\pi q_1 N_1}\right)}{e^{i\pi q_1}\left(e^{i\pi q_1} - e^{-i\pi q_1}\right)} = \frac{sin(\pi q_1 N_1)}{sin(\pi q_1)}$$

A prefaktorokat elhagytuk, mert azok csak a fázist tolják el, amit úgyis elvesztünk. Ha $q_1 = \frac{m_1}{N_1}$ akkor a számláló nulla, ha pedig m_1 egész számú többszöröse N_1-nek, akkor $\frac{0}{0}$ jön ki, de ez L'Hospital szabállyal kezelhető. Látjuk tehát, hogy csak bizonyos csúcsok esetén kapunk jelet, egyébként nem. Ezeket Bragg-csúcsoknak nevezik.



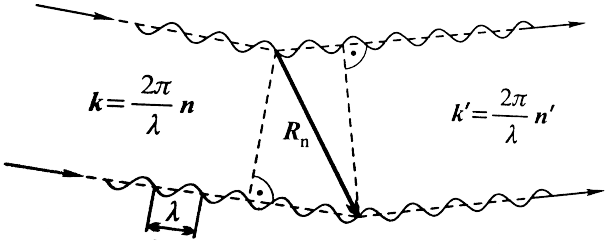
17.3 ábra: Bragg diffrakció

Bragg úgy tekintett a kristályokra, hogy azokban az atomok egymástól d-távolságra fekvő párhuzamos síkokban vannak, erről a röntgensugárzás a tükrözés szabályainak megfelelően verődik vissza. A szomszédos síkokról visszavert nyalábok között csak akkor lép fel interferencia, ha a nyalábok közötti fáziskülönbség 2π egész számú többszöröse. Tehát a beesési szög jól meghatározott értékénél kapunk szórt nyalábot. A kristálysíkok

irányát azonban többféleképpen is megválaszthatjuk, így egy kristályról több irányban is kapunk szórt nyalábot. Az ábráról leolvasható a konstruktív interferencia feltétele:

$$2dsin\theta = m\lambda$$

Ezt a diffrakció Bragg-feltételének nevezik.
Laue a síkok helyett az atomokról szórt nyalábok interferenciájával értelmezi az éles diffrakciós kép megjelenését. A bejövő sugárzás minden atomon szóródik, az atom fajtájától függő erősséggel, a szórt hullámok pedig az atom helyétől és a bejövő és a szóródó nyalábok irányától függő fáziskülönbséggel találkoznak.



17.3 ábra: Laue diffrakció

Az ábráról leolvasható, hogy az origóban levő atomon szórt hullámhoz képest az $\mathbf{R}_n$ rácspontban ülő atomon szóródó atomon szóródó nyaláb által megtett utak közötti különbség

$$\Delta s = \mathbf{R}_n\mathbf{n} - \mathbf{R}_n\mathbf{n}'$$

Áttérve a $\mathbf{k} = \frac{2\pi}{\lambda}\mathbf{n}$ hullámszámra a fáziskülönbség adódik:

$$\Delta\phi = \mathbf{R}_n\mathbf{k} - \mathbf{R}_n\mathbf{k}'$$

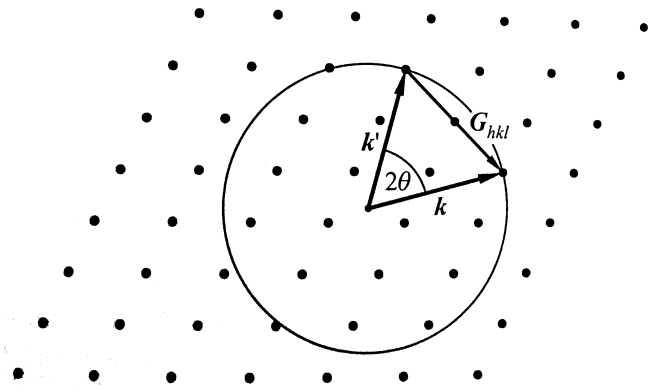
A konstruktív interferencia feltétele, hogy ez 2π egész számú többszöröse legyen:

$$\mathbf{R}_n(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = 2\pi m$$

Jusson eszünkbe, hogy a reciprok rács $\mathbf{G}$ és a direkt rács $\mathbf{R}_n$ vektorainak szorzata szintén 2π egész számú többszöröse. Így a diffrakció úgynevezett Laue-feltétele:

$$\mathbf{k} - \mathbf{k}' = \mathbf{G}$$

Azaz adott irányú és hullámhosszú beeső nyalábok esetén csak olyan irányban kapunk szórt nyalábot, amire a fenti egyenlet teljesül. Annak a szemléltetésére, hogy ez mikor következik be szolgál az ún. Ewald-szerkesztés. Vegyük az adott Bravais-rácshoz tartozó reciprok rácsot, majd rajzoljuk be a bejövő nyalábhoz tartozó $\frac{2\pi}{\lambda}$ hosszú $\mathbf{k}$ vektort úgy, hogy a vektor a reciprokrács egy pontjába mutasson.

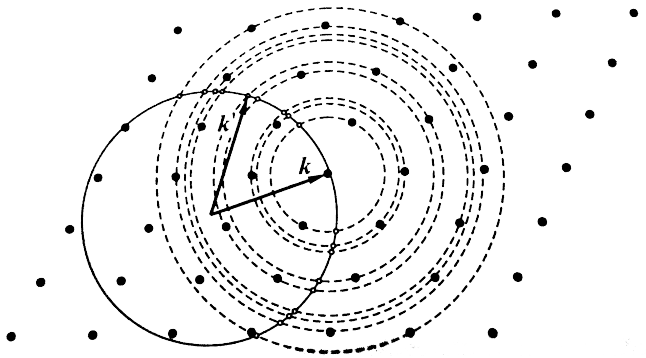


17.4 ábra: Ewald-szerkesztés

A $\mathbf{k}$ vektor kezdőpontjából kiindulva rajzoljunk egy $k = |\mathbf{k}|$ sugarú gömböt. Ez az Ewald-gömb. A gömb a konstrukciójánál fogva biztosan átmegy a reciprok rács egy pontján. Ha a rács más pontjain is átmegy, akkor a gömb középpontjából ide mutató $\mathbf{k}'$ vektorra teljesül a Laue-feltétel, hiszen $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$ és a $\mathbf{k} - \mathbf{k}'$ a reciprok rács egyik $\mathbf{G}_{hkl}$ vektorával azonos., így ebben az irányban lehet megfigyelni a (h, k, l) Miller-irányú Bragg-csúcsot.

17.3. Elektron- és röntgendiffrakció sajátosságai

Diffrakciót a röntgen sugárzáson kívül többféle sugárzással is végezhetünk, így pl. neutron, vagy elektron sugárzással is. Az, hogy a három sugárzás közül melyik a legalkalmasabb egy adott probléma megoldására, az a feladat függvénye. A sugárzás fajtájától függ, hogy milyen intenzíven hat kölcsön az anyag alkotórészeivel. A fotonok és elektronok nyalábja az anyagon belüli elektronokkal hat kölcsön, így velük közvetlenül az elektronok térbeli eloszlásáról kaphatunk információt. A neutronok a magokon szóródnak, de a mágneses momentumokon keresztül történő kölcsönhatással csatolódhatnak az elektronfelhőhöz is, ha annak van van mágneses momentuma, így neutrondiffrakcióval az atomszerkezeten kívül a mágneses szerkezetet is vizsgálhatjuk. A röntgennyaláb szórási hatáskeresztmetszete az elektronfelhőben levő elektronok számától függ, a rendszám négyzetével arányos. A neutronok szórási hatáskeresztmetszete viszont nem monoton függvénye a rendszámnak, így a vizsgálandó minta összetételétől függően egyik sugárzás alkalmasabb lehet arra, hogy az elemi cella atomjainak helyét különkülön meghatározzuk.
Ha az elektronokat $10 - 300eV$-ra gyorsítjuk, akkor az $0,7 - 4$ Åhullámhosszú elektronokat jelent. Ezt a módszert $LEED$-nek nevezik*(low-energy electron diffraction)*. Ha ennél nagyobb energiára gyorsítjuk őket, akkor $HEED$-nek nevezzük. Ha az atomi méreteknél jóval kisebb hullámhosszú sugárzást használunk, akkor az elektronok térbeli eloszlását is vizsgálhatjuk. Erre a $HEED$ a legalkalmasabb, mivel a $100keV$ energiájú elektronok hullámhossza $\lambda \approx 0,04$ Å, valamint a nagy energiájú elektronok jobban behatolnak a minta belsejébe mint a kisebb energiájúak. Áthatolóképesség szempontjából a neutrondiffrakció a legjobb, mert ez anyagtól függően akár cm mélyen is behatol a mintába abszorpció nélkül.
Módszertanilag a diffrakciót többféle módon végezhetjük. Egyik az úgynevezett *Laue-módszer*, amely során a rögzített helyzetben levő mintát kollimált, de nem monokromatikus nyalábbal világítjuk meg. Így egy λ_{min} és λ_{max} tartományon belül minden hullámhossz jelen lesz, tehát a beeső hullámszámvektor iránya jól meghatározott, de nagysága k_{min} és k_{max} között változik. Minden lehetséges hullámhosszú beeső nyalábhoz megrajzolhatjuk az Ewald-gömböket, amik egy tartományt fednek le a kristályban. A Laue-feltétel pedig a reciprok rács minden vektorára teljesül ami ebbe a tartományba esik, ezért több irányból kapunk egyszerre szórást. Belátható az is, hogy ha a mintát úgy orientáljuk, hogy a beeső nyaláb a kristály valamilyen magas szimmetriájú irányából érkezzen, akkor a felvétel is rendelkezni fog ezen szimmetriával.
Másik lehetősek az, hogy a mérés közben a mintát a beeső nyaláb irányára merőleges tengely körül forgatjuk. Ez az úgynevezett forgókristályos módszer. A mintát úgy kell beállítani, hogy a forgástengely lehetőleg essen egybe egyik kristálytani iránnyal. A kristály egy orientációjánál felrajzolhatjuk az Ewald-gömböt. A kristály forgatásakor a reciprok rács a kristállyal forog. Ez a szerkesztésben annak felel meg, mintha a rács forogna a kiszemelt rácspont körül. Szórást akkor kapunk, mikor valamelyik elforgatott reciprokrács-vektor éppen az Ewald-gömb felszínére kerül.



17.5 ábra: Forgókristályos módszer

De a mintát akár porrá is őrölhetjük és így is vehetünk fel róla diffrakciós képet, így nem kell törődni a forgatással, valamilyen irányból szinte biztos, hogy kapunk reflexiót.

17.4. Elektronoptika, elektronmikroszkóp

Egy mikroszkóp felbontóképességét, vagyis nagyításának határát lényegében a felhasznált hullámhossz határozza meg. Látható fénnyel működő mikroszkópok esetén néhány száz nanométernél, ami durván ezer atomátmérőnek felel meg, jobb felbontás nem érhető el. A röntgensugárzás fotonokból áll, azokat viszont nem tudjuk fókuszálni. Az elektronokat viszont különböző módon gyorsíthatjuk is, illetve különböző elektromos és mágneses terekkel irányítani, fókuszálni is jól tudjuk. Ha az elektronokat pontszerű részecskeként, vonallal jellemezhető pályán mozgó objektumnak tekintjük, akkor az egész mágneses lencsés játék kezelhető geometriai optikához hasonlóan. Ez addig érvényes, amíg az elektron hullámtermészetével kapcsolatos jelenségek elhanyagolhatóak.

Ilyen módon különböző elektronmikroszkópos technikákat fejlesztettek ki. Az egyik ilyen a TEM *(transmission electron microscopy)*, amely során az elektronokat $100keV$ nagyságrendű energiára gyorsítják. Ez nagyságrendileg $0,1$ Å hullámhossztartománynak felel meg. A leképezési hibák miatt azonban ezt a felbontást csak nagyon drága, milliárd nagyságrendűbe kerülő, korrigált mikroszkópokkal lehet elérni. Ilyenkor az elektron átvilágítja a mintát. A másik módszer a SEM *(scanning electron microscopy)*, ami főleg felületek leképezésére alkalmas. Ennek során a felületről újabb elektronok is kiléphetne, ezt is mérhetjük *(EELS-Electron Energy Loss Spectroscopy)*, illetve röntgensugárzás is kilép, ami szintén szolgálhat lokális információval. Sokszor van pedig fókuszált gallium-ionokkal bombázunk, amitől a bombázott anyag porladni kezd, ezzel pedig mikroméretű struktúrákat lehet faragcsálni.

17.5. Rácsrezgések termikus hatásai

A rácsrezgések felfoghatók független harmonikus oszcillátoroknak. Tudjuk, hogy a egy harmonikus oszcillátor energiájának a várható értéke adott hőmérsékleten:

$$\langle E\rangle = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega e^{-\frac{\hbar\omega}{k_BT}}}{1-e^{-\frac{\hbar\omega}{k_BT}}} = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{-\frac{\hbar\omega}{k_BT}}-1}$$

Az alapállapoti energia nem szól bele a fajhőbe, így azt elhagyhatjuk ebben a számolásban, valamint vezessük be az $n = \frac{1}{e^{-\frac{\hbar\omega}{k_BT}}-1}$ és a szokásos $\beta = \frac{1}{k_BT}$ jelöléseket. Így egy sok, különböző hullámhosszú és frekvenciájú oszcillátorból álló rendszer energiája:

$$\langle E\rangle = \sum_{\lambda,\mathbf{q}} \frac{\hbar\omega^{(\lambda)}(\mathbf{q})}{e^{\beta\hbar\omega^{(\lambda)}(\mathbf{q})}-1} = f_\lambda(\mathbf{q})$$

Tudjuk azt is, hogy a reciprok rács elemi cellájának a térfogata: $\Delta q^3 = \frac{(2\pi)^3}{V}$. Az atomi méretekhez képest nagy minta esetén a $\mathbf{q}$ vektorok nagyon sűrűen helyezkednek el, ezért az összegzésről áttérhetünk integrálásra *(itt valahogy eltűnik a V, nem tudom hogyan)*

$$\langle E\rangle = \sum_{\lambda=1}^{3p}\int f_\lambda(\mathbf{q})\frac{d^3\mathbf{q}}{\Delta q^3} = \sum_\lambda \int \frac{\hbar\omega(\mathbf{q})}{e^{\beta\hbar\omega^{(\lambda)}(\mathbf{q})}-1}\frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3}$$

A hullámszám szerinti integrálásról célszerűbb áttérni frekvencia szerinti integrálra. Ehhez meg kell határoznunk az állapotsűrűséget, azaz, hogy a hullámszámok által kifeszített fázistér egy $\omega+\Delta\omega$ tartományában hány módus van. Einstein modelljében minden rezgéshez azonos ω_E frekvencia tartozik, így ebben az esetben:

$$g_E(\omega) = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3}\delta(\omega-\omega_E) = \frac{N}{V}\delta(\omega-\omega_E)$$

Ez azonban nem elég pontos, így másik modellt kell csinálni: tegyük fel, hogy a diszperziós reláció $\omega = c\,|q|$, azonban ezt csak a Brillouin-zónán belül kell értelmezni, így tegyük fel azt, hogy $q = q_D = 0$ egy bizonyos értéknél, így a következőt írjuk: $\omega_D = c\,|q_D|$. Tudjuk, hogy az azonos frekvenciájú állapotok gömbfelületeken helyezkednek el, így két különböző sugarú gömb közötti sáv térfogata:

$$V = \frac{4}{3}\pi(q+\Delta q)^3 - \frac{4}{3}\pi(q)^3 \approx 4\pi q^2\Delta q = 4\pi\left(\frac{\omega}{c}\right)^2\frac{\Delta\omega}{c} = g(\omega)\Delta\omega$$

Ebből az állapotsűrűségre adódik:

$$g(\omega) = 4\pi\frac{\omega^2}{c^3}$$

Viszont ez így túl egyszerű, mivel tudjuk, hogy egy három atomos kristálynál is minimum három ág kellene, hogy legyen, így feltehetjük, hogy többféle terjedési sebesség is van. Van transzverzális és longitudinális sebesség. Az állapotsűrűség tehát:

$$g(\omega) = 4\pi\left(\frac{2}{c_T^3}+\frac{1}{c_L^3}\right)\omega^2 = 4\pi\frac{3}{c_D^3}\omega^2$$

Itt a transzverzális sebesség azért szerepel kétszeres szorzóval, mivel két transzverzális módus van az egy longitudinális mellett. *(Ez a Sólyom könyvben jóval tisztességesebben le van írva, de ennél a magyarázásnál jóval bonyolultabb és Groma is így mondta el, ezért nem írom le azt.)* A gömbfelületes feltevés viszont csak akkor helytálló, ha a diszperziós reláció lineáris. A valóságban nem az, a Brillouin-zóna szélén lehajlik. Ezért mondjuk azt, hogy legyen akkora a gömb térfogata, mint a Brillouin-zónáé kellene, hogy legyen:

$$\frac{4\pi}{3}q_D^3 = \frac{(2\pi)^3}{V}$$

Így már kiszámolhatjuk az energiát:

$$E = \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \frac{3}{c_D^3} \omega^2 d\omega$$

Vezessük be az

$$x = \beta\hbar\omega = \frac{\hbar\omega}{k_B T} \Rightarrow \omega = \frac{k_B T}{\hbar} x$$

helyettesítést, amivel az integrál a következő módon írható:

$$\int_0^{\frac{\hbar\omega_D}{k_B T}} \hbar \left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^3 \frac{x^3}{e^x - 1} \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \frac{3}{c_D^3} \frac{k_B T}{\hbar} dx$$

Kiemelve a konstansokat:

$$E = \frac{1}{2\pi^2} \frac{3}{c_D^3} \frac{1}{\hbar^3} (k_B T)^4 \int_0^{\frac{\hbar\omega_D}{k_B T}} \frac{x^3}{e^x - 1} dx$$

Két esetet különbözethetünk meg. Először $T \to 0$. Ebben az esetben az integrált átírhatjuk egy végtelenig menő impropius integrállá, amit igazából nem lehet analitikusan kiszámolni, de nem is kell, mert ez csak egy szorzófaktort ad. Ebben az esetben tehát

$$E \propto T^4 \Rightarrow C_v \propto T^3$$

Ha $T \to \infty$ akkor csak egy nagyon kicsi tartományra kell integrálni, ahol az $\frac{x^3}{e^x - 1} \approx x^2$ közelítést használhatjuk:

$$E = \frac{1}{2\pi^2} \frac{3}{c_D^3} \frac{1}{\hbar^3} (k_B T)^4 \int_0^{\frac{\hbar\omega_D}{k_B T}} x^2 dx = \frac{1}{2\pi^2} \frac{\omega_D^3 k_B T}{c_D^3} = \frac{1}{2\pi^2} q_D^3 k_B T$$

Itt használjuk fel a Brillouin-zóna/gömb térfogatra tett kikötést, hogy a következőz kapjuk:

$$E = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{3}{4\pi} \frac{(2\pi)^3}{V}\right) k_B T = \frac{3}{V_c} k_B T$$

Szorozzuk ezt meg a térfogattal:

$$VE = \frac{V}{V_c} 3k_B T = \frac{NV_c}{V_c} 3k_B T = 3Nk_B T$$

Látható, hogy nem teljesen rossz amit csináltunk, hiszen visszakaptuk az ekvipartíció-tételt.

17.6. Bloch-tétel

A Hamilton-operátor rácsperiodikus volta ellenére a hullámfüggvény nem feltétlenül mutat hasonló periodicitást. A rácsperiodikus potenciált tartalmazó Schrödinger-egyenlet megoldásaira azonban teljesül a Bloch-tétel:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{t}_n) = e^{i\mathbf{kr}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

Azaz a $\mathbf{k}$ kvantumszámhoz tartozó hullámfüggvénynek a különböző elemi cellákban felvett értékei csak egy $\mathbf{k}$-tól függő fázisfaktorban különböznek. A bizonyításhoz vezessük be a $\mathbf{t}_n$-el való eltolást megvalósító $\hat{O}(\mathbf{t}_n)$ lineáris operátort. Ez tetszőleges függvényre hatva a következőt csinálja:

$$\hat{O}(\mathbf{t}_n) f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} - \mathbf{t}_n)$$

Lássuk be, hogy ez az operátor kommutál a Hamilton-operátorral*(a Hamilton-operátor pedig ugye rácsperiodikus).*

$$\hat{O}(\mathbf{t}_n)\hat{H}(\mathbf{r})f(\mathbf{r}) = \hat{H}(\mathbf{r} - \mathbf{t}_n)f(\mathbf{r} - \mathbf{t}_n) = \hat{H}(\mathbf{r})f(\mathbf{r} - \mathbf{t}_n) = \hat{H}(\mathbf{r})\hat{O}(\mathbf{t}_n)f(\mathbf{r}) \Rightarrow \left[\hat{O}, \hat{H}\right] = 0$$

A felcserélhetőségből következik, hogy a két operátor egyszerre diagonalizálható:

$$\hat{H}(\mathbf{r})\psi_\alpha(\mathbf{r}) = \varepsilon_\alpha \psi_\alpha(\mathbf{r})$$

$$\hat{O}(\mathbf{t}_n)\psi_\alpha(\mathbf{r}) = t_\alpha(\mathbf{t}_n)\psi_\alpha(\mathbf{r})$$

Az α index itt csak az állapotok megkülönböztetésére szolgál. Tudjuk, hogy az $O(\mathbf{t}_n)$ eltolások Abel-csoportot alkotnak, az Abel-csoportok irreducibilis ábrázolásai pedig mind egydimenziósak, így a α kvantumszám egyben

az irreducibilis ábrázolás indexelésére is szolgál. Tudjuk, hogy két egymás utáni eltolás adott vektorral, a két vektor összegének megfelelő eltolással helyettesíthető:

$$\hat{O}(\mathbf{t}_n)\hat{O}(\mathbf{t}_{n'}) = \hat{O}(\mathbf{t}_n + \mathbf{t}_{n'})$$

Ennek következményeképp az α indexű ábrázolás egydimenziós bázisfüggvényére hattatva az eltolást, a sajátértékekre is teljesül, hogy

$$t_\alpha(\mathbf{t}_n)t_\alpha(\mathbf{t}_{n'}) = t_\alpha(\mathbf{t}_n + \mathbf{t}_{n'})$$

A $\mathbf{t}_n$ eltolás az első pontban megbeszéltek alapján felírható az elemi cella vektoraiból képzett eltolásként, így az eltolási operátort és annak sajátértékeit is felírhatjuk az elemi eltolásokkal:

$$t_\alpha(\mathbf{t}_n) = [t_\alpha(\mathbf{a}_1)]^{n_1}\,[t_\alpha(\mathbf{a}_2)]^{n_2}\,[t_\alpha(\mathbf{a}_3)]^{n_3}$$

Egy általános, paralelepipedon alakú minta esetén periodikus határfeltételt követelünk meg, amit a következő módon írhatunk:

$$\psi(\mathbf{r} - N_j\mathbf{a}_j) = \psi(\mathbf{r})$$

Ebből látszik, hogy ha N_j-szer hattatjuk az eltolás operátort a hullámfüggvényre, akkor "körbeérünk" a mintán, így az N_j *(j=1,2,3)* szeres eltolás operátorának a sajátértékének 1-nek kell lennie:

$$\hat{O}(N_j\mathbf{a}_j) = 1 \Rightarrow [t_\alpha(\mathbf{a}_j)]^{N_j} = 1$$

Ezeknek az egyenleteknek a megoldási a komplex egységgyökök:

$$t_\alpha(\mathbf{a}_j) = e^{-2\pi i p_j/N_j}$$

ahol $p_j \in [0; N_j - 1]$ egész szám. A fenti alakot adjuk meg úgy, ahogy az egységvektorokkal fejeztük ki:

$$t_\alpha(\mathbf{t}_n) = e^{-2\pi i(n_1p_1/N_1 + n_2p_2/N_2 + n_3p_3/N_3)}$$

vezessük be a $\mathbf{k} = \frac{p_1}{N_1}\mathbf{b}_1 + \frac{p_2}{N_2}\mathbf{b}_2 + \frac{p_3}{N_3}\mathbf{b}_3$ tömörebb jelölést, ahol a $\mathbf{b}$ vektorok a reciprok rács elemi vektorai, így a direkt és a reciprok rács vektorainak szorzási szabálya alapján:

$$t_\mathbf{k} = e^{-i\mathbf{k}\mathbf{t}_n}$$

Ezt visszahelyettesítve a sajátérték egyenletbe:

$$\psi_\mathbf{k}(\mathbf{r} + \mathbf{t}_n) = \hat{O}(-\mathbf{t}_n)\psi_\mathbf{k}(\mathbf{r}) = t_\mathbf{k}(-\mathbf{t}_n)\psi_\mathbf{k}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{t}_n}\psi_\mathbf{k}(\mathbf{r})\blacksquare$$

17.7. Adiabatikus szétcsatolás

A szilárd testekben az elektronok és az ionok rendszerének teljes Hamilton-operátorát, azok kölcsönhatását is figyelembe véve a következő módon írhatjuk:

$$\hat{H} = \hat{H}_{el} + \hat{H}_{ion} + \hat{H}_{el-ion}$$

Az első tag csak az elektronok $\mathbf{r}_i$ helykoordinátáitól függ, valamint az elektronok kinetikus energiáját és az egymás közötti Coulomb-kölcsönhatást tartalmazza. A második tag írja le az ionok kinetikus energiáját és az egymás közötti kölcsönhatást. Ezek pillanatnyi helyvektorát jelöljük $\mathbf{R}_l$-el*(itt az l index magában foglalja az előadáson használt m és μ indexeket is, mert így tömörebb)*:

$$\hat{H}_{ion} = \hat{H}_{ion}^{kin} + \hat{H}_{ion-ion} = -\sum_l \frac{\hbar^2}{2M_l}\frac{\partial^2}{\partial\mathbf{R}_l^2} + \frac{1}{2}\sum_{l,l'} U_{ion}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_{l'})$$

Az ionok és az elektronok közötti kölcsönhatást leíró tag pedig mindkét fajta koordinátát tartalmazza:

$$\hat{H}_{el-ion} = U_{el-ion}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, ..., \mathbf{r}_i, ...\mathbf{r}_{N_e}, \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, ..., \mathbf{R}_l, ...\mathbf{R}_N)$$

Tegyük fel, hogy ez a kölcsönhatás egy az elektronok és ionok között levő párpotenciál:

$$\hat{H}_{el-ion} = \sum_{i,l} U_{el-ion}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_l)$$

Vezessük be az $\{\mathbf{r}_i\} = \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, ..., \mathbf{r}_i, ...\mathbf{r}_{N_e}$ és $\{\mathbf{R}_l\} = \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, ..., \mathbf{R}_l, ...\mathbf{R}_N$ jelölést. A megoldandó egyenlet tehát:

$$\left[\hat{H}_{el}(\{\mathbf{r}_i\}) + \hat{H}_{ion}(\{\mathbf{R}_l\}) + \hat{H}_{el-ion}(\{\mathbf{r}_i\};\{\mathbf{R}_l\})\right]\psi(\{\mathbf{r}_i\};\{\mathbf{R}_l\}) = E\psi(\{\mathbf{r}_i\};\{\mathbf{R}_l\})$$

Ezt az egyenletet lehetetlen ilyen általánosságban megoldani. Born és Oppenheimer mutatott rá, hogy az ionok valójában csak egy kiátlagolt elektroneloszlást éreznek, az elektronok viszont adiabatikusan, szinte késlekedés nélkül követik az ionokat, alkalmazkodnak azok pillanatnyi helyzetéhez, mivel a szilárd testekben az elektronokra jellemző Fermi-sebesség több nagyságrenddel nagyobb az ionok akusztikus rezgéseinek terjedési sebességénél, a hangsebességnél. Ezért az elektronok hullámfüggvényét úgy határozzuk meg, hogy az ionokat az aktuális nem egyensúlyi $\{\mathbf{R}_l\}$ helyükön rögzítettnek képzelve először ebben a nem periodikus potenciálban oldjuk meg az

$$\left[\hat{H}_{el}\left(\{\mathbf{r}_i\}\right) + \hat{H}_{el-ion}\left(\{\mathbf{r}_i\};\{\mathbf{R}_l\}\right)\right]\phi\left(\{\mathbf{r}_i\};\{\mathbf{R}_l\}\right) = E_{el}\phi\left(\{\mathbf{r}_i\};\{\mathbf{R}_l\}\right)$$

Schrödinger-egyenletet, ahol ϕ az elektronok rögzített ionpozíciók mellett megvalósuló állapotának hullámfüggvénye. A Schrödinger-egyenletnek a megoldásai teljes ortonormált függvényrendszert alkotnak, így a teljes elektron-ion rendszer ψ hullámfüggvényét kifejthetjük az elektronok hullámfüggvényei szerint, egy az ionoktól koordinátáitól függő $\Phi_n\left(\{\mathbf{R}_l\}\right)$ együttható bevezetésével:

$$\psi\left(\{\mathbf{r}_i\};\{\mathbf{R}_l\}\right) = \sum_n \Phi_n\left(\{\mathbf{R}_l\}\right)\phi_n\left(\{\mathbf{r}_i\};\{\mathbf{R}_l\}\right)$$

A teljes Hamilton-operátort a hullámfüggvény fenti alakjára hattatva, kihasználva a ϕ_n-re vonatkozó Schrödinger-egyenletet, és a hullámfüggvények ortonormáltságát a következő adódik:

$$\left[-\sum \frac{\hbar^2}{2M_l}\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}_l^2} + \frac{1}{2}\sum_{l,l'} U_{ion}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_{l'}) + E_n^{el}\left(\{\mathbf{R}_l\}\right)\right]\phi_n\left(\{\mathbf{R}_l\}\right) -$$

$$-\sum_l\sum_{n'}\left[M_{n,n'}\frac{\partial\phi_{n'}\left(\{\mathbf{R}_l\}\right))}{\partial \mathbf{R}_l} + N_{n,n'}\phi_{n'}\left(\{\mathbf{R}_l\}\right)\right] = E\phi_n\left(\{\mathbf{R}_l\}\right)$$

Itt

$$M_{n,n'} = \frac{\hbar^2}{M_l}\int \phi_n^*\left(\{\mathbf{r}_i\};\{\mathbf{R}_l\}\right)\frac{\partial\phi_{n'}\left(\{\mathbf{r}_i\};\{\mathbf{R}_l\}\right)}{\partial \mathbf{R}_l}\prod_i d\mathbf{r}_i$$

és

$$N_{n,n'} = \frac{\hbar^2}{2M_l}\int \phi_n^*\left(\{\mathbf{r}_i\};\{\mathbf{R}_l\}\right)\frac{\partial^2\phi_{n'}\left(\{\mathbf{r}_i\};\{\mathbf{R}_l\}\right)}{\partial \mathbf{R}_l^2}\prod_i d\mathbf{r}_i$$

Ha a fenti egyenletben a mátrixelemeket tartalmazó tagokat elhagyjuk, akkor olyan, ionokra vonatkozó Schrödinger-egyenletet kapunk, amelyben az elektronok hatását egy, az ionok helykoordinátáitól függő $E_n^{el}\left(\{\mathbf{R}_l\}\right)$ effektív potenciállal vesszük figyelembe, ahogyan azt a rácsrezgések vizsgálatánál is kell. Mivel a különböző n indexű állapotok nem keverednek, ez a közelítés ekvivalens azzal, hogy az elektronok és az ionok rendszerének teljes hullámfüggvényét a fentebb leírt összeg alak helyett egyetlen taggal adjuk meg:

$$\psi\left(\{\mathbf{r}_i\};\{\mathbf{R}_l\}\right) = \Phi\left(\{\mathbf{R}_l\}\right)\phi\left(\{\mathbf{r}_i\};\{\mathbf{R}_l\}\right)$$

A hullámfüggvény szorzatalakja miatt a kétfajta szabadsági fokot bizonyos értelemben szétválaszthatjuk. Elég természetes feltevés, hogy lassan mozgó ionok terében az elektronok mindig az adott konfigurációnak megfelelő állapotban vannak, s ezért az elektronok hullámfüggvényére az adott ionkonfigurációhoz tartozó alapállapoti hullámfüggvényt vesszük, $E^{el}\left(\{\mathbf{R}_l\}\right)$ pedig az alapállapoti energia. Ezt adiabatikus közelítésnek nevezzük.

17.8. Sávszerkezet

Az elektronok szilárd testekben való mozgásához írjuk fel a Schrödinger-egyenletet:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + U(\mathbf{r})\right]\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

A potenciál, így a Hamilton-operátor rácsperiodikus, azonban ahogy az a Bloch-tételnél is látható volt, még nem vonja magával azt, hogy a hullámfüggvény is periodikus. A kristályszerkezet periodikus volta miatt a hullámfüggvénynek teljesítenie kell a Bloch-tételt:

$$\varphi(\mathbf{r}+\mathbf{r}_m)_{\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{t}_m}\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

válasszuk le a hullámfüggvényből a fázisfaktort, és vezessük be az $u(\mathbf{r})$ függvényt a következő módon:

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

Ezt behelyettesítve a hullámfüggvénybe az $\mathbf{r}+\mathbf{R}_n$ helyen:

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}_n) = e^{i\mathbf{kr}}e^{i\mathbf{kR}_n}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}_n)$$

Ha behelyettesítjük a Bloch-tételbe, és összehasonlítjuk a kettőt, akkor azt kapjuk, hogy az u függvény már periodikus:

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}_n)$$

Hattassuk rá kétszer az impulzusoperátort:

$$\hat{p}\left(\hat{p}u(\mathbf{r})\right) =$$

$$= \hat{p}\left[\frac{\hbar}{i}\left(e^{i\mathbf{kr}}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})i\mathbf{k} + e^{i\mathbf{kr}}\boldsymbol{\nabla}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\right)\right] = -\hbar^2\left((i\mathbf{k})^2e^{i\mathbf{kr}}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + e^{i\mathbf{kr}}i\mathbf{k}\boldsymbol{\nabla}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + i\mathbf{k}e^{i\mathbf{kr}}\boldsymbol{\nabla}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + e^{i\mathbf{kr}}\triangle u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\right) =$$

$$= -\hbar^2e^{i\mathbf{kr}}\left(i\mathbf{k}+\nabla\right)^2u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

Ebből már felírhatjuk a Schrödinger-egyenletet:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(i\mathbf{k}+\nabla\right)^2 + U(\mathbf{r})\right]u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

Ezt Bloch-egyenletnek nevezik. A kristályra periodikus határfeltételnek kell teljesülnie, hiszen a Bloch-tétel, amit nagyon erősen kihasználtunk a levezetés elején csak ekkor érvényes:

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+N_j\mathbf{a}_j) = \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

Ebből azt kapjuk, hogy:

$$e^{i\mathbf{k}N_j\mathbf{a}_j} = 1 \Rightarrow \mathbf{k}\mathbf{a}_jN_j = 2\pi n_j \Rightarrow k_j = \frac{n_j}{N_j}$$

Tekintsük először azt az esetet, hogy az elektronok szabadon mozognak. Ezt üres rács közelítésnek nevezik. Legyen a rendszerünk egy dimenziós, L hosszúságú, a rácsállandóval, N atommal. $u_{\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{Gr}}$ ahol $\mathbf{G}$ a régi jelölésnek megfelelően egy reciprok rácsvektor.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla^2 + 2i\mathbf{k}\nabla - k^2\right)e^{i\mathbf{Gr}} = E_{\mathbf{k}}e^{i\mathbf{Gr}}$$

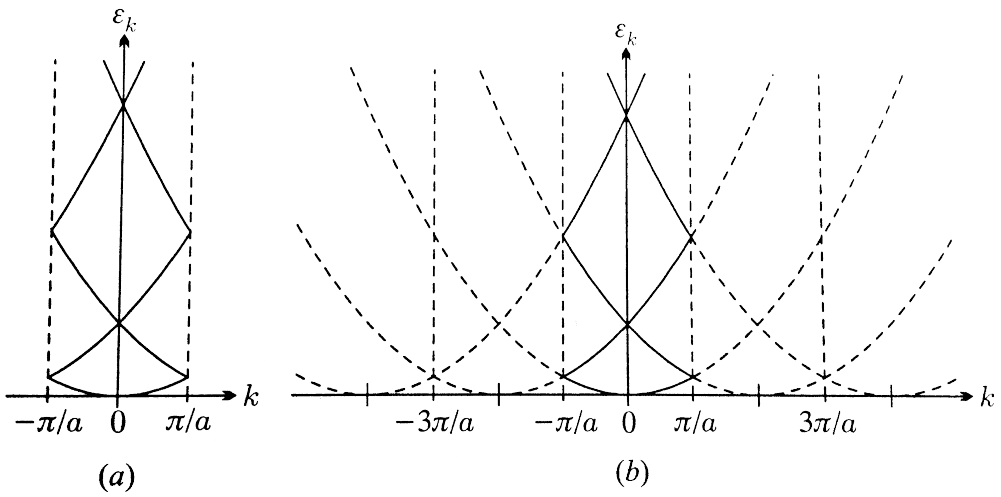
Elvégezve a deriválásokat és egyszerűsítéseket az energiára a következőt kapjuk:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(|\mathbf{G}|+|\mathbf{k}|\right)^2 = E_k$$

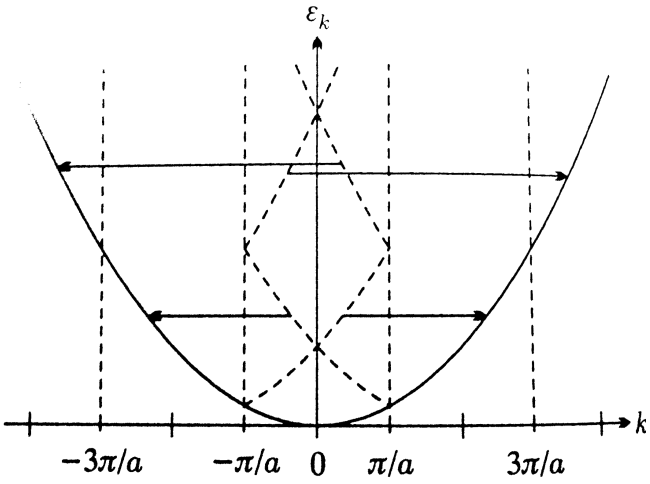
A periodikus határfeltétel miatt a hullámszám csak a $k = \frac{2\pi m}{Na}$ értékeket veheti fel. De mivel a Brillouin-zónákban a hullámszámok ekvivalensek, ezért nézhetjük a hullámszámot csak az első Brillouin-zónában, $-\frac{\pi}{a} < k \leq \frac{\pi}{a}$ tartományban. Ekkor $-\frac{N}{2} < m < \frac{N}{2}$. Így az energia végső soron:

$$E_{nk} = \frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{2\pi}{Na}\right)^2(m+nN)^2$$

Ezeket többféle módon is ábrázolhatjuk:



17.6 ábra: (a): redukált zónák módszere, (b): ismételt zónák módszere



17.7 ábra: Kiterjesztett zónák módszere

Az, hogy melyik ábrázolás nyújtja a szemléletesebb képet, az a feladattól függ. A kiterjesztett zónák és az ismételt zónák módszerével történő ábrázolás magától értetődő, a redukált zónás ábrázolást pedig úgy lehet elképzelni, mintha az első Brillouin-zóna határairól "visszahajtanánk" a parabola szárát, mintegy beszorítva azt az első zónába. Ezen az ábrázoláson jól látszik, hogy mind a Brillouin-zóna közepén, mind pedig a szélein degenerált állapotok jelennek meg, itt ugyanis egy energiát több állapot is megvalósít *(az ismételt zónák módszerében jól látszik, hogy ami a redukált zónák módszerében metszéspontként jelenik meg, az valójában két különböző állapot)*. A degeneráció feloldásához együnk a rendszerbe potenciált és ezt perturbációként vegyük figyelembe. Így degenerált perturbációszámítással megoldható a probléma. A probléma Hamilton-operátora tehát:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla + i\mathbf{k}\right)^2 + V(\mathbf{r})$$

A hullámfüggvény legyen a következő alakú:

$$|\psi\rangle = \alpha\,|\mathbf{k}\rangle + \beta\,|\mathbf{k}+\mathbf{G}\rangle$$

Számoljuk ki a Hamilton-operátor mátrixelemeit

$$H_{11} = \langle\mathbf{k}|\,\hat{H}\,|\mathbf{k}\rangle + \langle\mathbf{k}|\,V\,|\mathbf{k}\rangle = E^{(0)}_{\mathbf{k}} + \int e^{-i\mathbf{kr}}V(\mathbf{r})e^{i\mathbf{kr}}d^3\mathbf{r} = E^{(0)}_{\mathbf{k}} + \int_{V_{cella}} V(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} = E^{(0)}_{\mathbf{k}} + const = E^{(0)}_{\mathbf{k}}$$

Itt felhasználtuk azt, hogy a konstanst azt tetszőlegesen választhatjuk, így azt nullának választottuk. Ugyan ilyen integrált kell kiszámolni a másik diagonális mátrixelemre:

$$H_{22} = \langle\mathbf{k}+\mathbf{G}|\,\hat{H}\,|\mathbf{k}+\mathbf{G}\rangle + \langle\mathbf{k}+\mathbf{G}|\,V\,|\mathbf{k}+\mathbf{G}\rangle = E^{(0)}_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}$$

Az offdiagonális elemekre a következőket kapjuk. Itt az alapállapoti Hamilton-operátoros tagot elhagyjuk, mivel az nem ad járulékot, mivel különböző állapotokban számoljuk a mátrixelemet, az ilyen hullámfüggvények pedig merőlegesek egymásra, így a belőlük kapott skaláris szorzat a végén nullát fog adni.

$$H_{12} = \langle\mathbf{k}|\,V\,|\mathbf{k}+\mathbf{G}\rangle = \int e^{-i\mathbf{kr}}V(\mathbf{r})e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\mathbf{r}}d^3\mathbf{r} = \int V(\mathbf{r})e^{i\mathbf{Gr}}d^3\mathbf{r} = V_{\mathbf{G}}$$

Vegyük észre, hogy az utolsó lépésben a potenciál Fourier-transzformálja jelenik meg, ami a potenciális energiát adja meg a "reciprok térben". Hasonlóan számolható a másik is:

$$H_{21} = \langle\mathbf{k}+\mathbf{G}|\,V\,|\mathbf{k}\rangle = V_{-\mathbf{G}} = V^*_{\mathbf{G}}$$

Így tehát a perturbáló potenciállal a rendszer Hamilton-operátora:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E^{(0)}_{\mathbf{k}} & V_{\mathbf{G}} \\ V^*_{\mathbf{G}} & E^{(0)}_{\mathbf{k}+\mathbf{G}} \end{pmatrix}$$

A sajátértékegyenlet a következő:

$$\left(E^{(0)}_{\mathbf{k}} - E\right)\left(E^{(0)}_{\mathbf{k}+\mathbf{G}} - E\right) - |V_{\mathbf{G}}|^2 = 0$$

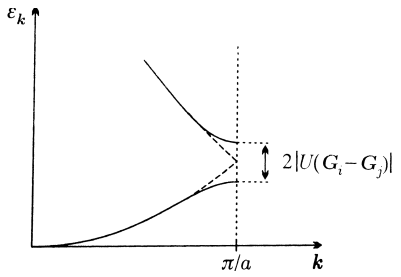
Használjuk fel, hogy a Brillouin-zónák határain az energiáknak meg kell egyeznie:

$$E_{\mathbf{k}}^{(0)} = E_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^{(0)}$$

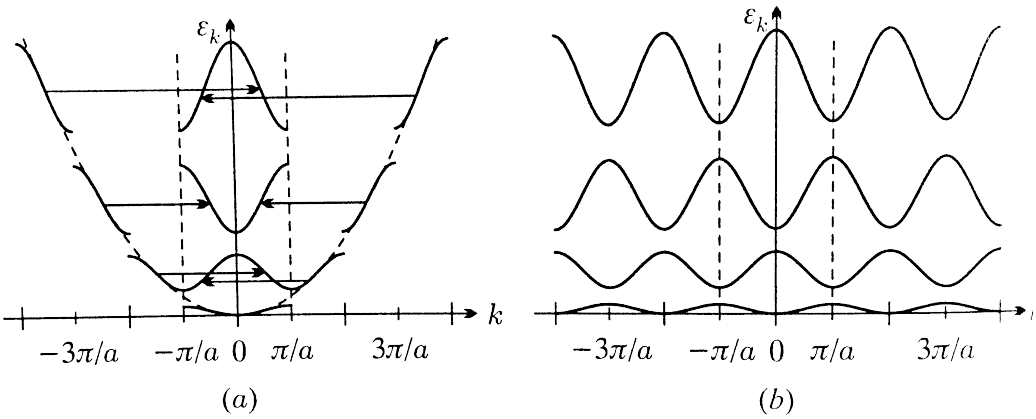
Ezzel már könnyen kifejezhetjük az energiát:

$$E = E_{\mathbf{k}}^{(0)} \pm |V_{\mathbf{G}}|$$

A perturbáló periodikus potenciál tehát egy energiakorrekciót hoz be a Brillouin-zónák közepén illetve szélén, feloldva ezzel a degenerációt. Az energiák a Brillouin-zónákban ábrázolva a következő módon néznek ki:



17.8 ábra: Felhasadás a zóna szélén



17.9 ábra: (a) redukált és kiterjesztett zónák módszere, (b) ismételt zónák módszere

18. Nemegyensúlyi folyamatok leírása(Demeter Márton)

18.1. Irreverzibilis folyamatok

Az univerzumunk talán legfundamentálisabb jellemzője az entrópia. Az információelméleten át a legmeredekebb multiverzum elméletekig lépten-nyomon rátalálunk erre a mennyiségre, mivel az egyik legfontosabb jellemzője a fizikai rendszereknek.
Írjuk fel az entrópia megváltozásának általános formáját:

$$dS = \frac{\delta Q}{T} + dS_{spontan} + \frac{\delta W_{irr}}{T} + ...$$

Ahol δQ a rendszerrel közölt hő mennyiségének megváltozása (nem teljes differenciál! csak a $\frac{\delta Q}{T}$ az) $dS_{spontan}$ a spontán, tehát irreverzibilis folyamatokra jellemző entrópia változás (mindig nagyobb mint 0) és δW_{irr} az irreverzibilis munkavégzés, T az abszolút hőmérséklet, ...-al jelöltem az egyéb lehetséges tagokat, mint pl. sugárzási tag.

Egyszerű példa a fenti egyenlet demonstrálására, ha veszünk egy zárt rendszert és két felé osztjuk egy tökéletesen szigetelő fallal. Egyik térrészben valamilyen gáz a másikban vákuum van. Ha elvesszük a falat, a gáz úgymond beavatkozás nélkül, elkezd spontán átáramlani a másik térrészben, és viszonylag gyorsan kvázistacionárius egyensúlyi állapotba kerül. Mivel ilyenkor sem hőt nem közöltünk sem munkát nem végeztünk a rendszeren, ezt nevezzük spontán entrópia termelődésnek. Az entrópia maximalizálódik az egyensúlyi állapot elérésekor, ekkor használhatjuk a Boltzmann-eloszlást mint valószínűségi eloszlást a rendszer állapotainak jellemzésére (magas hőmérsékleten). Az entrópia tehát fontos, hogy nem megmaradó mennyiség.
Nézzük meg a fenti állítást kicsit mélyebben és általánosan az entrópia maximalizálására: Induljunk ki az entrópia legáltalánosabb leírásából az ún. Shannon vagy Neumann entrópiából:

$$S = -k_B \sum_m P_m ln P_m$$

ahol k_B a Boltzmann faktor, P_m egy valamilyen valószínűségi eloszlás.
Maximalizáljuk a függvényünket kényszerek mellet, melyhez a legjobb módszer a Lagrange-multiplikátorok módszere. A kényszerek a következőek:

$$\sum_m P_m = 1$$

$$\sum_m P_m E_m = E$$

tehát a valószínűségek összege 1 és a rendszer energiájának várható értéke E.
Konstruáljuk meg az $S^{'}$ függvényünket, mely tartalmazza a kényszereket is, majd maximalizáljuk azt, továbbá vegyük most a negatív entrópiát, így a Neumann entrópia kifejezése pozitív lesz.

$$S^{'} = k_B \sum_m P_m ln P_m + \alpha(\sum_m P_m - 1) + \beta(\sum_m P_m E_m - E)$$

Majd deriváljuk le a kívánt paraméter szerint és tegyük egyenlővé nullával:

$$\frac{\partial S^{'}}{\partial P_m} = k_B ln P_m + 1 + \alpha + \beta E_m == 0$$

Tehát átrendezve:

$$ln P_m = \frac{-1-\alpha}{k_B} - \frac{\beta E_m}{k_B}$$

Így P_m valószínűségi eloszlásunk:

$$P_m = exp\left(\frac{-1-\alpha}{k_B} - \frac{\beta E_m}{k_B}\right)$$

Nézzük milyen paraméterek elégítik ki a kényszereket:

$$\sum_m P_m = \sum_m exp\left(\frac{-1-\alpha}{k_B} - \frac{\beta E_m}{k_B}\right) = 1$$

Hogy ez teljesülhessen:

$$exp\left(\frac{-1-\alpha}{k_B}\right) = \sum_m exp\left(\frac{-\beta E_m}{k_B}\right)$$

Nevezzük el ezt most z-nek (igen amúgy ez valóban az állapotösszeg lesz...)
Tehát $\sum_m exp\left(\frac{-\beta E_m}{k_B}\right) = z$
A másik kényszer:

$$\sum_m P_m E_m = E$$

melyet írhatunk kényelmesebb alakban is:

$$E = -\partial_\beta lnz$$

Nézzük először az entrópia kifejezését:

$$S = -k_B \sum_m P_m lnP_m = \sum_m \frac{exp\frac{-\beta E_m}{k_B}}{z} ln\left(\frac{\left(exp\frac{-\beta E_m}{k_B}\right)}{z}\right)$$

Látszik, hogy a logaritmus szorzótényezője 1, illetve ha kibontjuk az "ln-t" ezt kapjuk az entrópiára:

$$S = -k_B\left(-\frac{\beta E_m}{k_B} - lnz\right) = \beta E_m + k_B lnz$$

Vegyük az entrópia differenciáját:

$$dS = d\beta E + dE\beta + \partial_\beta lnz \cdot d\beta = d\beta E + dE\beta - Ed\beta = dE\beta$$

Tehát az inverz hőmérséklet:

$$\left.\frac{\partial S}{\partial E}\right|_{V,N} = \frac{1}{T}$$

Így végre megkapjuk β paraméterünket:

$$\beta = \frac{1}{T}$$

Tehát béta az inverz hőmérséklet, P_m pedig a jó öreg Boltzmann-eloszlás.

18.2. Master egyenlet, részletes egyensúly

Legyen egy rendszerünk, melynek n db diszkrét állapota van, melyek között ugrál. Legyen $P_n(t)$ annak a valószínűsége, hogy a rendszer az n-ik állapotban van. Tegyük fel, hogy tudjuk, hogy egységnyi idő alatt mi annak a valószínűsége, hogy a rendszer n-ből m-be megy át. Ennek a jelölése w_{mn}. Nem tudunk róla semmit, de tegyük fel, hogy ismerjük az értékét.
Az átmenetek folyamatát Markov-folyamatnak feltételezzük, tehát létezik olyan Δt, hogy már csak a t mondja meg mi történik $t + \Delta t$ időpillanatban.
Ekkor:

$$P_n(t + \Delta t) = P_n(t) - \sum_m w_{mn}\Delta t P_n(t) + \sum_m w_{nm}\Delta t P_m(t)$$

Szeretnénk tudni, hogy a rendszerünk mekkora valószínűséggel lesz az n. állapotban $t + \Delta t$ időpillanatban. Ez szerepel az egyenlet bal oldalán. A jobb oldalon az első tag annak a valószínűsége, hogy már t időpillanatban is az n. állapotban vagyunk (ezt ismertnek tekintjük), a következő tag annak a valószínűsége, hogy t időpillanatban az n.-ben a $t + \Delta t$ pillanatban már máshol tartózkodik a rendszerünk, ezért ez csökkenti a valószínűségét a rendszer n. állapotban tartózkodásának. Az utolsó tag annak a valószínűsége, hogy t-ben nem az n. állapotban volt de a $t + \Delta t$ pillanatban pont az n.-be került. Fontos megjegyzés, hogy a w_{mn} egységnyi időre vonatkozik, így jön ki a dimenzió is az egyenletben! Fejtsük sorba Δt körül $P_n(t + \Delta t)$-t így:

$$P_n(t + \Delta t) = P_n(t) + \partial_t P_n \Delta t$$

Ezt felhasználva P_n kiesik, majd Δt-vel egyszerűsíthetünk:

$$\partial_t P_n = -\sum_m w_{mn} P_n(t) + \sum_m w_{nm} P_m(t)$$

Ez a Master egyenlet, melynek stacionárius megoldása P_n^E egyensúlyi valószínűséghez relaxál, mely csodák csodájára ismét a méltán híres Boltzmann-eloszlás:

$$P_n^E = \frac{exp(-\beta E_n)}{z}$$

Ha ezt behelyettesítjük 0-t kapunk, tehát ez lesz az egyensúlyi eloszlásunk.
Hogyan kell ehhez megválasszam az átmeneti valószínűségeket? Mivel egyensúlyban időtükrözési invariancia van ("mindegy hogy időben előre vagy hátra megyek ugyanazt látom"), miközben számolom, hogy hányszor megy át az egyik állapotból a másikba a rendszer irány szerint megkülönböztetve a stacionárius állapotokban Δt idő alatt az átmenetek száma (n-ből m-be és fordítva):

$$w_{mn}P_n^E$$

$$w_{nm}P_m^E$$

A részletes egyensúly elve (detailed balance) azt mondja ki, hogy stacionárius állapotban ez a két produktum egyenlő:

$$w_{mn}P_n^E = w_{nm}P_m^E$$

Ez ad nekünk egy megszorítást az átmeneti valószínűségek hányadosaira.
Ha az állapotok száma véges és a rendszer minden pontjából minden másik pontjába el tudok jutni, akkor egyetlen stacionárius állapot lesz, mégpedig az egyensúlyi:

$$\frac{w_{mn}}{w_{nm}} = \frac{exp(-\beta E_m)}{exp(-\beta E_n)} = exp(-\beta(E_m - E_n)) = exp\left(-\frac{\Delta E_{mn}}{k_B T}\right)$$

Tehát csak az állapotok energiáinak különbsége szabja meg az átmenetek közti valószínűséget. Megjegyzés T csak egy paraméter! Ha $E_m - E_n = \Delta E_{nm} > 0$ azaz növelem az energiát az exponenciális tag 1 nél kisebb lesz, tehát vehetem ezt átmeneti valószínűségnek. Ha csökken az energia, akkor az energia csökkenés felé vezető lépést 1 valószínűséggel lépem meg.
Nézzük meg ezt kicsit részletesebben:

$$\partial_t P_n(t) = -\sum_m w_{mn}P_n(t) + \sum_m w_{nm}P_m(t) = 0$$

egyensúly esetén.
Tehát:

$$0 = -\sum_m \left(w_{mn}P_n^E - w_{nm}P_m^E\right)$$

Páronként kioltják egymást, ezért is hívják részletes egyensúlynak, mivel nem csak az összeg zérus, hanem az egyes állapotok között páronként is van egyensúly. Ebből aztán ha megkonstruáljuk az állapotösszeget számolható minden termodinamikai mennyiség...

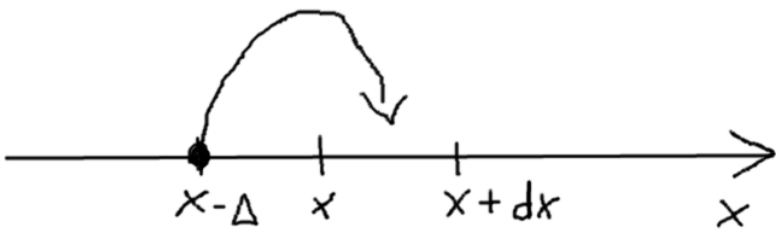
18.3. Brown-mozgás, diffúzió

Alapfeltevéseink a rendszer vizsgálatához:

- A részecskék egymástól függetlenül mozognak.
- $\tau <<$ mint a megfigyelési idő minimuma (tehát a karakterisztikus ideje a mozgásállapot változtatásnak megfigyelhetetlen)
- Az elmozdulásnak van egy valószínűségi eloszlása. A mozgás leírható valószínűségi alapon.

  Jelölések:

- $n\Phi(\Delta)d\Delta$ annak a valószínűsége, hogy n darab részecske Δ-t ugrik τ idő alatt.
- $p(x,t)dx$ annak a valószínűsége, hogy t időpillanatban x helyzetben van a részecske (1D-ben vagyunk persze).



18.1 ábra: A Brown-mozgás szemléltetése 1 dimenzióban.

18.3.1. Einstein-féle leírás

Annak a valószínűsége, hogy a részecske τ idő múlva az $x + dx$ tartományban lesz:

$$p(x, t + \tau)dx = p(x, t)dx - \int_{-\infty}^{+\infty} p(x, t)dx\Phi(\Delta)d\Delta + \int_{-\infty}^{+\infty} p(x - \Delta, t)dx\Phi(\Delta)d\Delta$$

Tehát nagyon hasonló egyenletünk van, mint a Master egyenlet levezetésekor, így a tagok is hasonlóak. A jobb oldalon az első tag annak a valószínűsége, hogy a részecske már t időpillanatban is az x és $x + dx$ közötti térrészben volt. A második tag annak a valószínűsége, hogy τ idő múlva éppen arrébb megy valamekkora Δ ugrással egy másik helyre. A harmadik tag pedig annak a valószínűsége, hogy a részecske valamekkora Δ távolságról éppen Δ-t ugorva megérkezik a vizsgált helyen.
Az egyenlet dx-el végigoszthatjuk, hiszen dx-ek (és $p(x, t)$ is) mindegyik integrál jel elé kiemelhetőek, hiszen nem függnek Δ-tól, így:

$$p(x, t + \tau) = p(x, t) - p(x, t)\int_{-\infty}^{+\infty} \Phi(\Delta)d\Delta + \int_{-\infty}^{+\infty} p(x - \Delta, t)\Phi(\Delta)d\Delta$$

Továbbá mivel $\int_{-\infty}^{+\infty} \Phi(\Delta)d\Delta = 1$ hiszen ez a valószínűsége annak, hogy történik egy esemény vagy sem, és feltételezzük, hogy minden időpillanatban történik. Jó tudni továbbá, hogy $\Phi(\Delta) = \Phi(-\Delta)$ szimmetria áll fent, ennek következménye, hogy a jobb oldal első két tagja kiejti egymást és az egyenlet a következő alakra egyszerűsödik:

$$p(x, t + \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} p(x - \Delta, t)\Phi(\Delta)d\Delta$$

ez a Chapman-Kolmogorov egyenlet. A fenti egyenletet τ és Δ-ban fejtsük sorba:

$$p(x, t + \tau) = p(x, t) + \partial_t p \cdot d\tau + ...$$

$$p(x - \Delta, t) = p(x, t) - \partial_x p \cdot d\Delta + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 p}{\partial x^2}\Delta^2 ...$$

Behelyettesítve kapjuk:

$$p(x, t) + \partial_t p \cdot \tau = \int_{-\infty}^{+\infty} p(x, t)\Phi(\Delta)d\Delta - \partial_x p\int_{-\infty}^{+\infty} \Delta\Phi(\Delta)d\Delta + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 p}{\partial x^2}\int_{-\infty}^{+\infty} \Delta^2\Phi(\Delta)d\Delta$$

Ugyanazon okok miatt , mint a Chapman-Kolmogorov egyenlet levezetésénél, az egyenlet bal oldalának első tagja és jobb oldalának első két tagja kiejti egymást, így marad:

$$\partial_t p \cdot \tau = -\partial_x p\int_{-\infty}^{+\infty} \Delta\Phi(\Delta)d\Delta + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 p}{\partial x^2}\int_{-\infty}^{+\infty} \Delta^2\Phi(\Delta)d\Delta$$

A fenti egyenlet jobb oldalán az első tagnál az integrál pont $< \Delta >$ átlag, míg a második integrál pont a négyzetének átlaga, így:

$$\partial_t p \cdot \tau = -\partial_x p < \Delta > + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} < \Delta^2 >$$

$< \Delta >$ értéke 0, mivel $\Phi(\Delta)$ tökéletesen szimmetrikus, ami most már tényleg marad:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{< \Delta^2 >}{2\tau} \frac{\partial^2 p(x,t)}{\partial x^2}$$

$\frac{<\Delta^2>}{2\tau}$ nevezzük D-nek (diffúziós együttható), így megkapjuk a diffúzió Fokker-Planck egyenletét:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}$$

18.3.2. A Fokker-Planck egyenlet megoldása

Keressük a megoldást $t = 0$, $x = 0$ kezdőfeltételekkel. Ekkor ha $p(x, t = 0) = \delta(x)$ akkor ebből a megoldás:

$$p(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$$

(3D-ben a gyök helyett 3/2 hatvány szerepel) A fentiek alapján $< x^2 >$ értékére az alábbi összefüggés születik, ahol λ-t konstansnak várjuk:

$$< x^2 >= \lambda Dt \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) dx = \frac{4Dt}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} y^2 exp(-y^2) dy$$

az utolsó egyenlőségnél való helyettesítés: $y = \frac{x}{\sqrt{4Dt}}$ Az integrál egy Gauss integrál y szerinti deriválásával számolhatunk ki melyből:

$$< x^2 >= 2Dt$$

azaz $\lambda = 2$

18.4. Brown-mozgás potenciálban

A részecskék most valamilyen kitüntetett irányban sodródnak : $\Phi(\Delta) \neq \Phi(-\Delta)$ Az előzőekhez képest annyi a különbség , hogy a következő tag:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Delta\Phi(\Delta) d\Delta =< \Delta >\neq 0$$

Ismét alkalmazva a Kramers sorfejtést:

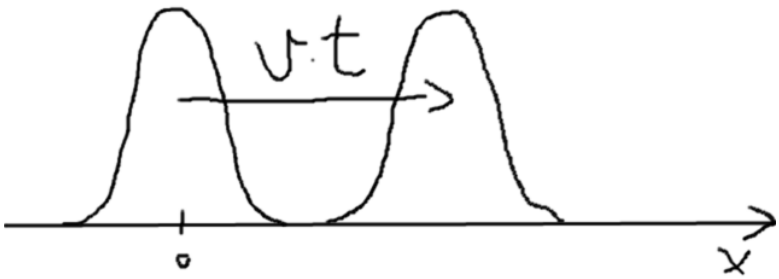
$$p(x,t) + \frac{\partial p}{\partial t}\tau = p(x,t) - \frac{\partial p}{\partial x} \int_{-\infty}^{+\infty} \Delta\Phi(\Delta) d\Delta + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \Delta^2 \Phi d\Delta$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{< \Delta >}{\tau} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{< \Delta^2 >}{\tau} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}$$

Ez is a Fokker Planck egyenlet egyik alakja, a jobb oldalon az első tag önmagában egy driftet ír le:

$$\partial_t p = -v \partial_x p$$

ahol $v = \frac{<\Delta>}{\tau}$



18.2 ábra: Driftelő "csomag".

Vegyük például $p(x,t) = \hat{p}(x - vt)$ A fenti egyenletben behelyettesítve:

$$-v\hat{p} = -v\hat{p}$$

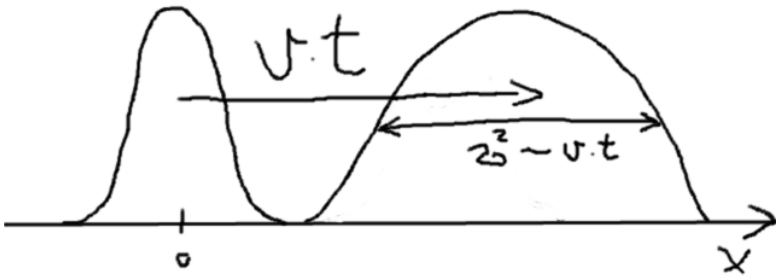
Viszont érdemes megtartani a második tagot, hiszen ha ezt figyelembe vesszük, akkor azt kapjuk, hogy a "csomag" halad valamerre és közben szétterül:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -v\frac{\partial p}{\partial x} + D\frac{\partial^2 p}{\partial x^2}$$

Bevezetve az $y = x - vt$-t (beülünk a driftelő rendszerbe), akkor $\hat{p}(x - vt, t) = p(\hat{y}, t)$. Ekkor a Fokker-Planck egyenlet a következőképpen módosul:

$$-v\frac{\partial \hat{p}}{\partial y} + \frac{\partial \hat{p}}{\partial t} = -v\frac{\partial \hat{p}}{\partial y} + D\frac{\partial^2 \hat{p}}{\partial y^2}$$

Vagyis visszakapjuk a "drift-mentes" összefüggést. Tehát $\hat{p}(y,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} exp\left(-\frac{y^2}{4Dt}\right) \Longrightarrow p(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} exp\left(-\frac{(x-vt)^2}{4Dt}\right)$



18.2 ábra: Driftelő "csomag".

18.5. Langevin-egyenlet

Brown-mozgásra az általános Langevin-egyenlet:

$$m\ddot{x} = -6\pi\eta\dot{x}a + X - \frac{\partial U}{\partial x}$$

ahol η a viszkozitás, "a" a részecske sugara, X egy véletlenszerű erő, U külső erő potenciálja. Ha túlcsillapított esetet vizsgálunk, akkor $0 = -6\pi\eta\dot{x}a + X - \frac{\partial U}{\partial x}$ Ekkor bevezetve a zajt, $-\hat{\eta} = \mu X$ ahol $\mu = \frac{1}{6\pi\eta a}$ az egyenlet a következőképpen néz ki:

$$\dot{x} = -\mu\frac{\partial U}{\partial x} + \hat{\eta}$$

Vezessük be továbbá a $v(x) = -\mu\frac{\partial U}{\partial x}$ jelölést:

$$\dot{x} = -v(x) + \hat{\eta}$$

Ebből jól lehet látni, hogy túlcsillapított esetben az elmozdulás a $v(x)$ determinisztikus sebesség és az $\hat{\eta}$ zaj összege.
Ha feltételezzük, hogy a zaj Gauss-eloszlűsú és meghatározzuk az adott helyen tartózkodás valószínűségét, akkor megkapjuk a "driftet tartalmazó" Fokker-Planck egyenletet:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -v\frac{\partial p}{\partial x} + D\frac{\partial^2 p}{\partial x^2}$$

Bevezetve a valószínűségi áramot: $J = vp - D\frac{\partial p}{\partial x}$ egyensúlyi esetben (J=0) megkapjuk a Boltzmann-eloszlást:

$$P_E = C \cdot exp(-\beta U)$$

18.6. Vezetési jelenségek

18.6.1. Drude-modell

Az elektromos vezetés jelenségét úgy tekintjük, hogy az elektronok az elektromos tér hatására gyorsulnak, azonban a vezető helyhez kötött atomtörzseinek ütközve energiát veszítenek. Ez igen hamar makroszkópikus egyensúlyhoz vezet, ha a tér nem változik. Ezek a feltevések az alapjai a Drude-modellnek, amelynek eredménye az elektronokra felírható mozgásegyenlet:

$$m\ddot{x} = eE - m\frac{1}{\tau}v$$

mely stacionárius megoldása:

$$\frac{mv}{\tau} = eE$$

Itt a τ ütközések közötti relaxációs idő, v a drift sebesség. A v-re rendezett eredményt a töltéssel (e) és az elektronsűrűséggel (n) beszorozva megkaphatjuk az Ohm-törvényt:

$$j = \frac{ne^2\tau}{m}E$$

azaz az elektromros áramsűrűség egyenesen arányos a térerősséggel, az arányossági tényezőa fajlagos ellenállás reciproka, azaz a fajlagos vezetőképesség. A Drude-moell jó leírást ad több effektusra, azonban például az áram hőhatását túlbecsli.
Kevés jó modell van az elektronok ütközésének leírására, ez a terület ma is aktív kutatás tárgya.

19. Az asztrofizika alapjai(Horváth Dénes)

19.1. Az ősrobbanás elmélet alapvető feltevései, A Hubble-törvény

Az Univerzum szerkezetét meghatározó egyetlen nagy távolságokon is jelentős kölcsönhatás, a gravitáció. Először Newton öntötte matematikai formába:

$$\vec{F} = -G\frac{M_1 M_2}{r^2}\frac{\vec{r}}{r} \tag{68}$$

Ahol a G a gravitációs állandó[1], M_1 és M_2 a kölcsönható tömegek, r a távolságuk.

Jelenlegi tudásunk szerint az Univerzum térben homogén és izotóp 100Mpc-es skálán. Ennek szimmetriatulajdonságaiból következik, hogy léteznie kell egy **abszolút vonatkoztatási rendszernek**, ahol teljesül a homogenitás. Mivel ilyen távolságokon a newtoni elmélet nem alkalmazható, ezért az **általános relativitáselméletet** használjuk, ami megköveteli, hogy az egyenleteink **minden koordinátarendszer-transzformációval szemben kovariánsak** legyenek.

Másik feltevés az **energiamegmaradás**, aminek minden körülmények között teljesülnie kell, így az Univerzumra is. Az energiamegmaradás és az Univerzium tágulásának észlelt tényéből következik, hogy az **energiasűrűség** a múltban **nagyobb volt**. Ebből még nem következik az ősrobbanás ténye, ugyanis elképzelhető olyan megoldás is, amikor mondjuk az u(t) energiasűrűség exponenciális visekedésű, ekkor időben visszafelé haladva minden határon túl nő, de csak t→ ∞ esetén válik végtelenné.

Bizonyítékok az ősrobbanásra:

- 3 K-es mikorhullámú háttérsugárzás
- Könnyű elemek gyakori előfordulása *(75% H, 24% He)*
- Hubble-törvény

A Hubble-törvény azt mondja ki, hogy minél távolabb van tőlünk az anyag *pl.: galaxis*, annál gyorsabban távolodik tőlünk, vagyis nagyobb a vöröseltolódása. Matematikailag:

$$v = H \times r \tag{69}$$

ahol H a Hubble-állandó. Legmodernebb mérések szerint az értéke H = 74,2 ± 3,6 km Mpc s^{-1}. Szokás még Hubble-paraméternek is nevezni, hiszen nem állandó, függ az univerzum méretétől és a tágulás sebességétől is.

Ha a T_{ik} energia-impulzus tenzorról is feltesszük, hogy homogén és izotóp, akkor a Friedmann-egyenleteket kapjuk:

$$\frac{8\pi G}{3}\rho = \left(\frac{\dot{a}}{a}\right)^2 + \frac{kc^2}{a^2} - \frac{\Lambda c^2}{3} \tag{70}$$

$$-\frac{8\pi G}{3}p = 2\frac{\ddot{a}}{a} + \left(\frac{\dot{a}}{a}\right)^2 + \frac{kc^2}{a^2} - \Lambda c^2 \tag{71}$$

Ezekből ekvivalens átalakítással megkapható a

$$\frac{\ddot{a}}{a} = -\frac{4\pi G}{3}\left(\rho + \frac{3p}{c^2}\right) + \frac{\Lambda c^2}{3} \tag{72}$$

Ahol az a a **skálaparaméter**, vagy másnéven az "Univerzum sugara", c a fényesbesség, P a nyomás, ρ a sűrűség a Λ pedig a **kozmológiai konstans**. A k az R_{ik} görbületi tenzor írható fel, k = sgn(R)

- Ha a k = +1, az Univerzum görbülete pozitív, vagyis a tér zárt, határtalan, de véges *(elliptikus)*. Ilyen térben a háromszögek belső szögeinek összege **nagyobb**, mint 180°, a gömb térfogata pedig r^3-nél **gyorsabban** nő r-rel.
- k = 0 eset az euklédeszi sík esete.
- k = -1-nél az Univerzum görbülete negatív, vagyis a tér nyílt, végtelen *(hiperbolikus)*. Kétdimenziós megfelelője a nyeregfelület. Ilyen térben a háromszögek belső szögeinek összege **kisebb**, mint 180°, a gömb térfogata pedig r^3-nél **lassabban** nő r-rel.

[1] $G = 6,67 \times 10^{-11} m^3 kg^{-1} s^{-2}$

Azonban mindhárom modell közös tulajdonsága, hogy a(t) viselkedésében a múltban szingularitást mutat, vagyis az **energiasűrűség véges idővel ezelőtt végtelenhez tart.**

Az alapegyenletekben szereplő a(t)-t $|k| = 1$ esetén a

$$ka^2 = \frac{c}{R} \tag{73}$$

egyenlet definálja, mint a négydimenziós téridőhöz adott pontban simuló négydimenziós gömb sugara, a lokális görbületi sugár. $k = 0$ esetén az (5) nem használható, ilyenkor két rögzített pont abszolút koordinátarendszerbeli távolságával definiáljuk a skálafaktort. $\dot{a}/a = H$ Hubble konstans.

Az egyenletek relativisztikus *(sugárzás dominált Univerzum)* és nem relativizszitkus *(anyag dominált Univerum)* alakjában is arányosságok állapíthatóak meg.

- Relativisztikus esetben a nyomás és a sűrűség aránya: $3\rho = p$, $\rho \propto a^{-4}$ és az $a \propto t^{1/2}$
- Nem relativisztikusnál pedig, p = 0 esetén: $\rho \propto a^{-3}$ és az $a \propto t^{2/3}$

Definiálhatunk egy Ω sűrűség paramétert, ami szemléletesen az univerzum időfejlődésének paramétere. Ha $\Omega > 1$, az univerzum lassulva tágul, majd megáll és összehúzódik, ha $\Omega = 1$ a végtelenségig tágul lassulva és ha $\Omega < 1$ gyorsulva tágul.

Létezik egy ρ_{krit} kritikus sűrűség, amit a Friedmann egyenletbe a $\Lambda = 0, k = 0$ helyettesítéssel és átrendezéssel kaphatunk

$$\Omega = \frac{\rho}{\rho_{krit}} = \frac{8\pi G\rho}{3H^2} \tag{74}$$

Mai elméletek szerint Ω értéke közel 1, vagyis $\rho \approx \rho_{krit}$. Ω értéke az anyag és energia különböző formából adódik össze.

$$\Omega = \Omega_{anyag} + \Omega_{sugrzsi} + \Omega_k + \Omega_\Lambda \tag{75}$$

Mely egyenletben, mai tudásunk szerint $\Omega_k \approx 0$, $\Omega_\Lambda \approx 0,7$, $\Omega_{sugrzsi} << 1$ és $\Omega_{anyag} \approx 0,3$, amiből 0,04 a látható *(barionos)* anyag, a maradék pedig a **sötét anyag**.

19.2. Galaxisok kialakulása, morfológiája

19.2.1. Fejlődés

A galaxisok látható anyaga csillagokból és a csillagok által feldúsított nehézelemekben gazdag gázból áll, kézenfekvő azt feltételezni, **hogy a galaxisok ősei hatalmas kiterjedésű fémszegény gázfelhők voltak**. Ezek a felhők az Univerzum anyagának fluktuációi, melynek kialakulása tulajdonképpen a galaxis kialakulásának megindulása.

Már **az összeomlás alatt**, ami legalább a τ_{cr} áthaladási ideig tart, ami több százmillió év, **megidul a csillagok kikondenzálódása** helyi instabilitásokból. Mivel a csillagok létrejötte sokkal rövidebb időt igényel, így feltehetően a gáz egy részre csillagokká tömörül a kollapszus alatt is. A kondenzálódás mértékére csak következtetni tudunk, az is lehet, hogy az összehúzódás alatt a galaxis teljes gázanyaga begyulladt, de az is lehet, hogy mindvégig csak között gáz állapotban maradt. **Néhány százmillió év alatt azonban a rendszer** a nemdisszipatív csillaggáz violens relaxációja és/vagy az egyszerű gáz disszipatív virializációja miatt **kvázistacionárius állapotba kerül**.

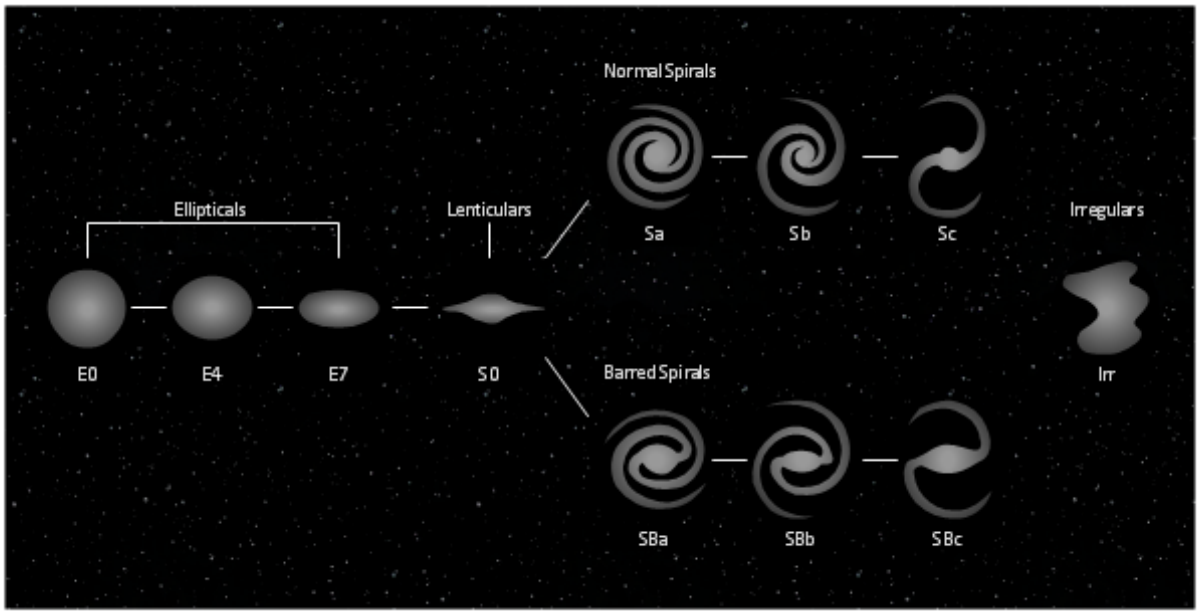
Egy másik, az "alulról felfelé" elmélet szerint viszont kisméretű H, He felhőkből törpegalaxisok jöttek létre először hasonló analógián, majd ezek ütközéseiből alakultak ki a nagyméretű galaxisok.

19.2.2. Morfológia

Morfológián a kontinuumbeli fényességelolszás kvalitatív jellegzetességeit értjük. A galaxisok mintegy 95%-ánál felfedezhető szabályosságot követ a fényességelolszás. Kettő vagy három alrendszer szuperpozíciójával reprezentálható a galaxis fényességelolszlása.

- Ellipszoidális komponens: Mindhárom irányba nagyságrendileg azonos kiterjedésű dudor a galaxis közepén.
- Korong-komponens: A galaxis külső, lapos része melynek két irányú kiterjedése sokkal nagyobb mint a harmadik.
- Küllő: A korong síkjában lévő "közel egydimenziós" sűrűséghullám.

A Hubble-diagramon látható a galaxisok morfológiai osztályozása. A vízszintes tengelyere a "kétdimenziós" korong-komponens, és a "háromdimenziós" ellipszodiális komponens relatív jelentősége *(pl.: luminozitásarányuk)* van felmérve, a függőleges tengelyre pedig az "egydimenziós" küllő jelentősége.



Morfológiai osztályozás a Hubble-diagramon

Az ábra bal oldalán vannak a *"Korai"*, jobb oldalán pedig a *"Késői"* galaxisok, ami megtévesztő elnevezés, mert a késői típusok színképe korai, azaz *fémszegény* és a korai típusoké késői, *fémdús*. A vízszintes tengelyt szokás **főparaméternek** is nevezni, mivel ez a galaxis sok tulajdonságával **korrelál**, mint a **színindex, centrális kondenzáció** és **tömeg-fényesség arány**. **Elliptikus** galaxisoknál a szám a lapultságot jelzi, ami természetesen a látóirányba állástól függ. A **lentikuláris** képzi az átmenetet, a pedig **spirálgalaxisoknál** jobbra haladva a spirálszerkezet egyre lazább, felcsavartabb, nő a spirálkarok kontrasztossága, mag/korong arány csökken és a korong fényességeloszlása pedig egyre csomósabb.

19.3. A csillagfejlődés szemléletes képe

19.3.1. Gravitációs kollapszus

A csillagok az **intersztelláris anyag összesűrűsödésével** jönnek létre. Ezt okozhatja sűrűségfluktuáció gázfelhőkben, spirálkarok haladása galaxisokban, szupernovarobbanáskor a lökéshullám, galaxisok ütközése. A Csillagok általában csoportosan keletkeznek. Ha ez a csoport elég kompakt, és a szülőfelhő eltűnése után is gravitációsan kötött marad, **csillaghalmaz** keletkezik. Ha csak laza csoportosulás jön létre, ami idővel felbomlik, akkor **asszociációról** beszélünk.

Minél masszívabb a gázfelhő, annál nagyobb a **csillagképződési hatásfok**, vagyis a születő csillagok össztömege a felhő össztömegéhez viszonyítva.

A csillagszületés első lépése egyértelműen a gravitációs kollapszus. Azonban ha a gázfelhők egyszerűen csak gravitációsan összehúzódnának, akkor $\tau_{ff} \sim (R/g)^{1/2}$ **szabadesési időskálán** zajlana le a teljes kikondenzálódás, ami nagyságrendekkel gyorsabb lenne az észleltnél.

Minden jel arra mutat, hogy a **felhőket stabilizáló tényező a mágneses tér, és a turbulencia** is komoly szerepet játszhat. Az igen alacsony ionizációs fok ellenére a hatalmas méretek folytán a kisszámú töltött részecske is képes közvetíteni a mágneses tér hatását, így a semleges gáz is csak lassan áramolhat az erővonalakra merőlegesen. Tehát a viriáltételnél figyelembe kell venni a mágneses tér energiasűrűségét is, ami sokkal nagyobb, mint a termikus energiasűrűség.

$$2\mu_0\beta G\frac{M^2}{R} = B^2\frac{4\pi}{3}R^3 \tag{76}$$

ahol β egy sűrűségelolszásfüggő egységnyi nagyságrendű faktor, B a mágneses fluxussűrűség, μ_0 a vákuumpermeabilitás, M a gázfelhő tömege, R a sugara, G pedig a gravitációs konstans. Ez definiál egy $M_{krit} = 10^5 - 10^6$ M_{nap} értéket, ami felett a felhő **egyensúlyban van**. Szubkritikus felhőkben is létrejöhetnek csillagok, ez az **ambipoláris diffúzió** jelensége, ugyanis a mágneses tér csak jelentősen lelassítani tudja a gravitációs összehúzódást, megállítani nem.

A gázfelhőkben észlelések szerint néhány *nanotesla* erősségű tér van jelen, melyet az elméletek szerint az intersztelláris közeg ionizált komponensében folyó áramok indukálnak.

19.3.2. Izotermális kollapszus

A gravitációs összehúzódás elején a gáz olyan ritka, hogy **saját termikus sugárzása számára még átlátszó**, ezért a kollapszusban felszabaduló hőt el tudja sugározni, így **hőmérséklete állandó** marad. Az izotermális szakad addig tart, amíg a felhőmag közepén a sűrűség el nem éri a 10^{-13} g cm^{-3} körüli értéket, amikor is az **infravörös sugárzás számára optikailag vastaggá válik a közeg**. Ekkor a belső rész felmelegszik, nyomása megnő és megállítja a kollapszust; stabil, hidrosztatikai egyensúlyban lévő mag alakul ki, melyre továbbra is hullik be az anyag. Ez a **protocsillag**, mely az összehúzódás után 10^4-10^5 évvel alakul ki.

19.3.3. Akkréciós szakasz

A protocsillagra behulló anyag annak tömegét növeli, a felszabaduló potenciális energia pedig a hőmérsékletét és a fényességét. Az objektumot körülvevő por és gázfelhő miatt azonban **optikai hullámhosszon az továbbra is láthatatlan**, csak infravörösben megfigyelhető.

A protocsillag a valóságban mindig forog és a behulló anyag nemzéró impuzusmomentuma miatt **akkréciós korong alakul ki** körülötte. Mivel a felhő impulzusmomentuma megmarad, ha a tömeg állandó, és a sugár csökken, a forgási sebesség nőni fog. A forgástengely közvetlen közelében, ahol a centrifugális erő meghaladja a gravitációst, csak úgy lehet kváziegyensúlyban a gáz, ha a **nyomásgradiens tengelyre merőleges komponense befelé, az egyenlítő felé mutat**. A forgástengelytől távol, a növekvő forgási sebesség miatt a forgástengelyre merőleges irányban nő a centrifugális erő is, ami egy idő után összemérhetővé válik a gravitációval. Ekkor a nyomásgradiens eltűnik, a gravitációs és centrifugális erők kiejtik egymást. Definiálhatunk egy $r_{cf} = J^2/GM$ centrifugális rádiuszt, ahol a gáz éppen helyi körsebességel mozog. Beljebb nyílván csak úgy kerülhet, ha **veszít a sebességéből, vagyis az impulzusmomentumából**. Ezt elsősorban a közeg turbulens viszkozitása okozza. Ezért r_{cf} tájékán az behullás "megakad", és **fokozatosan, J-t vesztve spirálozik befelé**, lehetővé téve az akkréciós korong kialakulását és fennmaradását.

Ez a szakasz nagyjából 10^6 évig tart.

Ha a korong tömege elég nagy, abban gravitációs kollapszussal újabb csillag képződhet, így kialakítva a

kettős és többszörös rendszereket. Alacsonyabb impulzusmomentum esetén pedig **bolyógrendszer** kialakulása kísérheti az akkréciót, a porszemcsék kikondenzálódása és agglomerációja útján.

19.3.4. A csillag születése, és a kontrakciós szakasz

Amikor a protocsillag hőmérséklete eléri a **néhány millió K**-t akkor **beindul a deutériumégés**. Az **akkréciós rátától függően** ekkor már nagy eltérések lehetnek a csillagok tömegeiben. Kis és nagytömegű csillagok fejlődése jelentősen eltér.

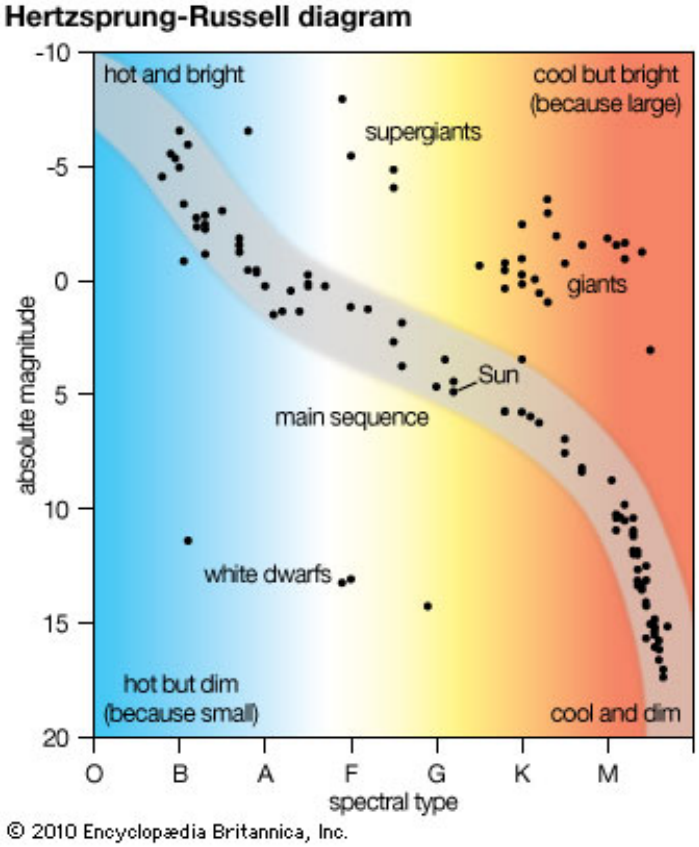
A kistömegű csillagok *($M < 2M_{nap}$)* a D^2 égésének beindulásakor hirtelen **teljesen konvektívvá válnak**. Az erőteljes konvekció és a gyors rotáció miatti **plazamaáramlások erős mágneses teret keltenek, mely közvetítésével a csillag felsőlégköre erősen felfűtődik**. A részecskék hőmozgása meghaladja a szökési sebességet, és **erős csillagszél** indul meg kifelé a csillagról.

A csillagszél és a fénynyomás **leállítja az akkréciót, és szétfújja a csillagot övező burkot**, így az **optikailag láthatóvá válik.** Ez a relatíve gyors szakasz tekinthető a csillag születésének és nagyjából 10^5 évig tart.

Ekkor sincs még egyensúlyban a csillag. A D^2 égés nem termel elég energiát, és hamar el is fogy. A csillag **Kelvin-Helmholtz időskálán**, $\tau_{KH} \sim GM^2/RL$ fejlődik rá a fősorozatra, ahol **beáll a sugárzásegyensúly**. Ez a 10^8 évig tartó szakasz a **kontrakciós szakasz**.

A nagytömegű csillagok születése kevésbé markáns esemény. Mivel ezek még **nem konvektívak a D^2 égésekor sem**, a csillagszelet csak a fénynyomás hajtja, ami sokkal lassabban állítja le az akkréciót és fújja szét a burkot. Mivel **nagyobb luminozitásuk miatt Kelvin-Helmholtz időskálájuk sokkal rövidebb, a fősorozatra ráfejlődve is akkretálni fognak még**, így csak itt válnak optikai tartományban is észlelhetővé.

19.4. HRD- Hertzsprung-Russell diagram szemléletes képe



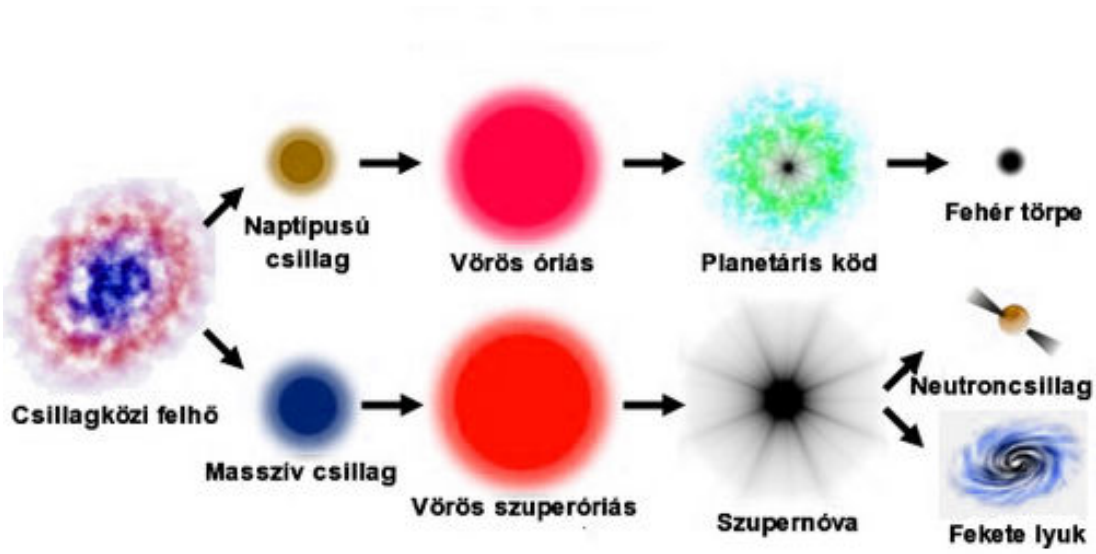
Hertzsprung Russell diagram *forrás: http://www.britannica.com/topic/Hertzsprung-Russell-diagram*

A HRD-n a csillagok elhelyezkedését a **spektráltípusa** *(felszíni hőmérséklete)* és a **luminozitása** határozza meg. A csillagok a különböző ágakba csoportosulnak. A bal felső saroktól a jobb alsó felé húzódó csoport a **főág**, a jobb felső sarokban található csoportosulást pedig **óriásságnak** nevezzük, bal alul pedig a halvány és forró **fehértörpék** találhatóak. Ezek az ágak, csoportok fejlődési szakaszokat jelentenek, vagyis a csillagok életük során ezeket, vagy bizonyos részeiket bejárják.

A főágon tartózkodó csillagok H-t fúzionálnak. Amikor a H koncentráció lecsökken a magban, akkor a sugárnyomás nem tud ellentartani a gravitációnak, ezért összehúzódik és felmelegszik, beindul a **héjégetés** és a csillag felfúvódik szubóriás, majd egyre gyorsulva vörösóriás méretűre, ahol ismét beáll a sugárzási egyensúly. A csillag valamelyest összehúzódik a fogyó üzemanyaga miatt, és a He magban is beindul a fúzió, majd az egyre nehezebb elemek fúziója, egészen Fe-ig.

Azonban a nehezebb elemek fúziójának elérése **függ a csillag tömegétől**. Kistömegű csillagokban nem tud beindulni a fémek *(H, He-n kívüli elemek)* fúziója, így ha elfogy a fúzionálni képes anyag, a csillag összehúzódás miatti felforrósodása lefújja az anyaga nagy részét, **planetáris ködöt** létrehozva, melynek magja a csillag maradványa, a **forró szubtörpe**. A magreakciók ezután szinte a teljes anyagát szénné és oxigénné alakítják, miközben a sugara csökken, mígnem az egész csillag elfajult állapotba jut és a nukleáris égés gyakorlatilag megszűnik. Ekkor nevezzük **fehér törpének**.

Nagytömegű csillagoknál végigmegy a fúziós sor a Fe-ig, majd amikor az is elfogy, leáll a folyamat. Ekkor már nem tart ellen a sugárnyomás a gravitációnak, a **csillag magja összeroskad, önmagáról visszapattan** és lökéshullám keletkezik. A lecsökkenő sűrűség miatt a **vasmagba csapdázódott neutrínók hatalmas fluxussal kiszabadulnak**. Így következik be a textbfII. típusú szupernóva robbanás, melynek maradványa lehet **neutroncsillag vagy feketelyuk**, a csillag egykori tömegének függvényben.



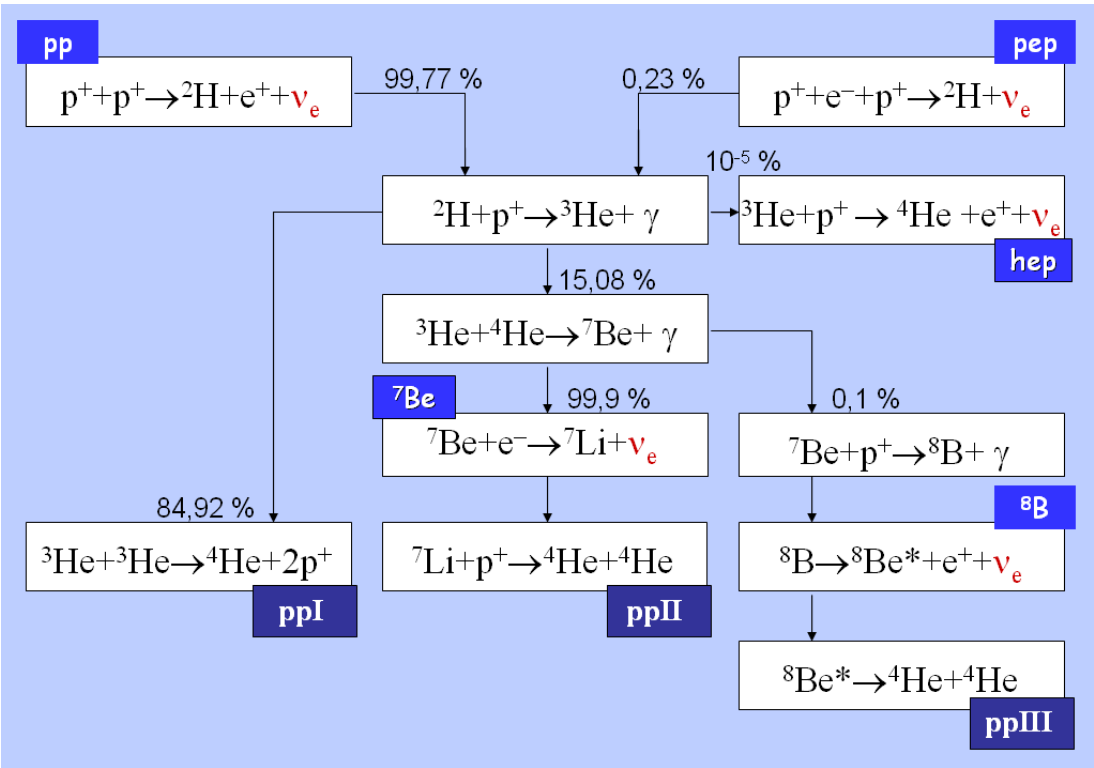
Csillagok fejlődési útvonalai. *forrás: http://tetel.wiki.mafihe.hu/*

A masszívabb csillagok élettartama sokkal rövidebb. Mivel üzemanyagtartalékukat pazarlóbban használják fel, a fényességük függ a tömegüktől. $L \sim M^{3,5}$ Tömeg-Luminozitás reláció áll fent, élettartamra pedig a $t \sim M^{-2,5}$ arányosság.

19.5. Csillagok energiatermelése

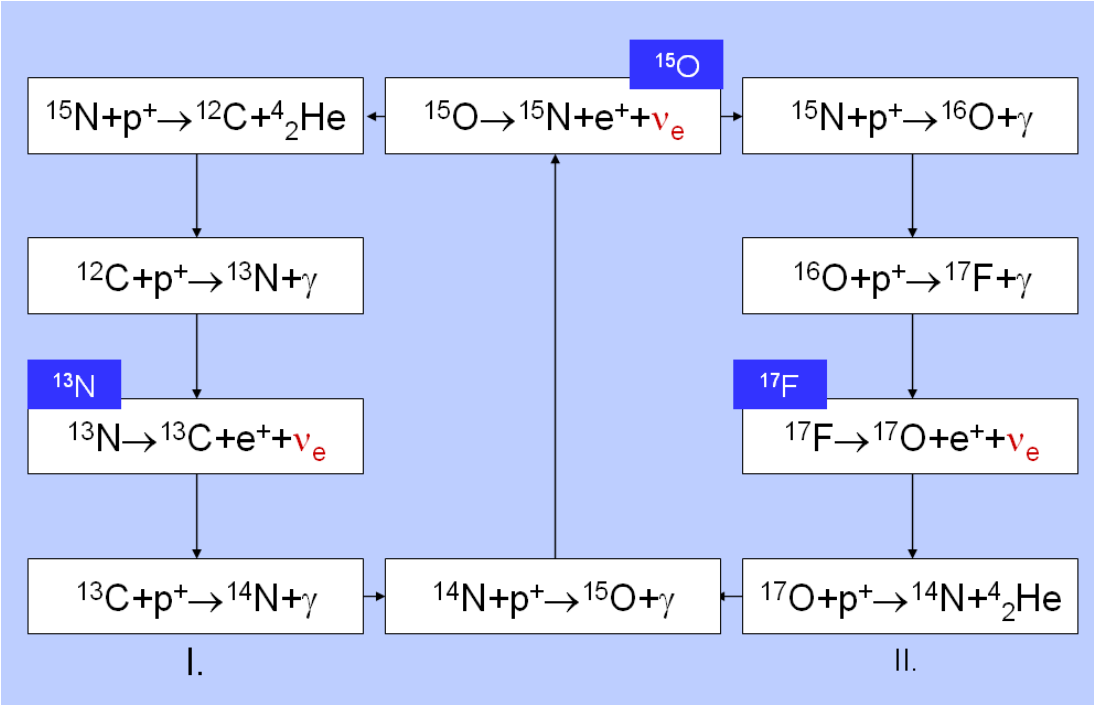
A csillagokban kétféle energiatermeléséért két folyamat a felelős, a tömegüktől függ, hogy melyik dominál. A kisebb tömegűeknél a **p-p** lánc, míg a masszívabbaknál a **CNO** ciklus.

A p-p lánc:



Proton-proton lánc lehetséges útvonalai. *forrás: https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=759081*

CNO ciklus:



CNO ciklus útvonalai. *forrás: https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/f/fe/Cno_cycle.png*

Mint látható, a C csak katalizátor szerepet tölt be, de nem tökéletesen, mert a folyamat után N visszmarad(hat).

A p-p ciklus energiatermelése $\epsilon_{pp} \sim 10^{-37}T^4$, míg a CNO ciklusé $\epsilon_{CNO} \sim 10^{-157}T^{21}$.

Egyéb energiatermelő folyamatok:

- 3α folyamat: $3^4He \rightarrow^{12} C$
- Szénégés főcsatornája: $5^{12}C \rightarrow^{16} O +^{20} Ne +^{23} Na + n^0$
- Neonégés: $2^{20}Ne \rightarrow^{16} O +^{24} Mg$
- Oxigénégés: $2^{16}O \rightarrow^{28} Si +^4 He$
- Sziliciumégés: $2^{28}Si \rightarrow^{56} Fe$

Természetesen ezek a folyamatok nagyon bonyolult mellékág hálózattal rendelkeznek, ezek csak a nettó főcsatornák.

19.6. Fehértörpék

Tehát kistömegű csillagok halála után visszamaradt a plantáris ködöt megvilágító forró szubtörpe anyagának C-O-vá fúzionálása után létrejövő objektum a **fehértörpe**. Ezen a csillagok anyaga **erősen elfajult**, vagyis a kvantumos effektusok *(Pauli-elv)* következtében az elektronok parciális nyomása nagyon magas. $P \sim P_e$ és $P_e = P_e(n_e)$, vagyis az elektronnyomás hőmérsékletfüggetlen. Nemrelativisztikus esetben, amikor $p_{max} << m_ec^2$ megközelítőleg $P_e \propto n_e^{5/3}$, és relativisztikus esetben, amikor $p_{max} \sim m_ec^2$ megközelítőleg $P_e \propto n_e^{4/3}$.

Tehát a zsugorodás megáll erős elfajulásnál, és **évmilliárdok alatt kihűl**. Idővel az elfajult anyag Coulomb-rácsba kristályosodik, és végül fényét elvesztve **fekete törpe** lesz belőle. Ez csak hipotézis, mivel az Univerzum kora se elég egy fehértörpe kihűléséhez, így nem észleltünk még ilyen objektumot.

19.7. Neutroncsillagok

Fehértörpe analógiára erősen elfajult anyagból állnak. Viszont van egy M(R) függvény, melynek egy **kritkus** $\mathbf{M}_{Ch}$ Chandrasekhar-féle határértékénél a csillag **egyetlen ponttá zsugorodna**. Ez az érték függ az egy elektronra jutó átlagos molekulasúlytól. Mivel a fehértörpékben alig van H, így $\mu_e = 2$, ekkor $\mathrm{M}_{Ch} = 1,44 M_{nap}$.

A valóságban azonban nem következik be a ponttá zsugorodás, ugyanis **ha a sűrűség eléri a kb.** $10^{13} gcm^{-3}$ **értéket, a β-bomlás és e^- befogás által megszabott dinamikus egyensúly eltolódik a neutronok irányába**. Mivel a szabad neutronok száma nagyon megnő, így $P \sim P_e$ helyett $P \sim P_n$ lesz. Az elfajult neutrongáz tömege és eltérő visekedése miatt más konfigurációjú lesz, mint az elfajult elektrongáz. Az **ellentett spinű neutronok** 10^{10} K környékén **cooper-párokat képeznek**. Mivel a párok bozonok, így Bose-kondenzátumként viselkednek, tehát **szuperfolyékonyak és szupravezetők**. A felszíni rétegben a kisebb sűrűség folytán az atommagok is angyobb számban vannak jelen, és a Coulomb-erők hatására rácsot alkotnak: a **neutroncsillagnak szilárd felszíne van**.

19.8. Feketelyukak

A **fekete lyuk** egy olyan kompakt objektum, aminek az **erős gravitációs teréből** semmi, **még a fény sem tud kijutni.** Félklasszikus szemléltetése szerint olyan égitest, amelynél a felszínre vonatkoztatott szökési sebesség eléri vagy meghaladja a fénysebesség értékét. Ezt a térrész körülvevő gömbhéj az eseményhorizont, melynek sugara a **Schwarzschild-sugár**, $r_s = \frac{2Gm}{c^2}$. Egy m tömegű testet ekkora sugarú gömbbé kéne összezsugorítani, hogy feketelyukká váljon.

Mivel semmilyen sugárzás nem hagyja el, ezért észlelésük csak közvetett módon, pl.: **gravitációs lencsézéssel** lehetséges.

19.9. Megfigyelések alapjai

19.9.1. Sugárzás

Csillagászati ismeretink túlnyomó többségét **elektromágneses sugárzás** analíziséből szerezzük. Minden tartományban, rádiótól a gammáig, vannak észlelő eszközeink, mind a föld felszínén, mind az űrben. az **intenzitást** úgy definiáljuk, mint a $(\nu + d\nu)$ frekvenciatartományba eső Θ, ϕ polárszögekkel jellemzett irány körüli $d\omega$térszögben terjedő sugárzás által a Θ, ϕ normálisú $d\sigma$ felületelemen dt idő alatt átvitt energia, azaz:

$$dE_\nu = I_\nu d\nu dt d\sigma d\omega \tag{77}$$

Mivel elektronok és atommagok mindenütt kellő mennyiségben állnak rendelkezésre, **töltöttrészecskesugárzáshoz** csak a megfelelő gyorsítás kell. Ez általában elektromágneses folyamatokban észlelhető, mert az erős és gyenge kölcsönhatások olyan nagysűrűségű tartományokban mennek végbe, ahol azonnal el is nyelődik a keletkezett sugárzás.

Mikroszkópikus sugárzások típusai:

- Termikus sugárzás
- Nemtermikus sugárzás
- Szabad-szabad átmenetek
- Szabad-kötött és kötött-kötött átmenetek

Makroszkópikus sugárzások:

- Plazmarezgés
- Szinkotron sugárzás

19.9.2. Magnitudóskála

A csillagászatban a fluxus speciális egységrendszerben adják meg, úgynevezett magnitudóskálán. Ez lényegében egy **fordított logaritmikus fluxusskála**. A mai skálatörvény Pogson-tól származik:

$$m_A - m_B = -2,5log\frac{F_A}{F_B} \tag{78}$$

Ahol $F = L/4\pi r^2$ a fluxus. Tehát, ha A csillag magnitudója 1-gyel kisebb mint B-é, akkor két és félszer fényesebb nála.

Mivel a fluxus távolság négyzetével csökken, ezért érdemes bevezetni egy **abszolút fényességet**. Ez annak az értéke, hogy milyen fényesnek látnánk az objektumot, ha 10pc-ről néznénk üres téren át. jele: M

Látszó és aboszlút magnitudó között a következő arányosság áll fent:

$$M - m = 5 - 5log(d) \tag{79}$$

Tehát **ha tudjuk egy csillag abszolút fényességét, akkor meghatározhatjuk a távolságát**. Erre léteznek módszerek, pl Cefeidáknál a periódus-fényesség reláció.

19.9.3. Vöröseltolódás

A vöröseltolódást három effektus okozza, egyrészt a távolodás miatti Doppler-effektus, másrészt nagy távolságokban, a skálafaktor növekedése "megnyújta" a foton hullámhosszát és a kibocsájtó test gravitációs potenciálja, vagy erős gravitációs téren való áthaladás miatt is vöröseltolódást szenvednek a fotonok.. Ennek mértékegysége a z

$$z = \frac{f_{kibocsatott} - f_{eszlelt}}{f_{eszlelt}} = \frac{\lambda_{eszlelt} - \lambda_{kibocsatott}}{\lambda_{kibocsatott}} \tag{80}$$

A Hubble-törvény értelmében, minél távolabb van tőlünk egy objektum, annál gyorsabban távolodik, így vöröseltolódás arányos a távolságával.

Egyben távolság számszerű mérésére is alkalmas. A *luminozitástávolságot* a $d_l = 2H_l(1 + z - (1 + z)^{1/2})$, képlettel számolhatjuk, ahol H_l a Hubble-hossz, azaz c/H.

A legnagyobb vörösletolódása a mikrohullámú háttérsugárzásnak van, z = 1089, ami nagyjából 13,7 milliárd évvel ezelőtti kibocsájtásnak felel meg.

20. Függelék

Hivatkozások

[1] Bérces György, Skrapits Lajos, Tasnádi Péter: *Mechanika I.*. Dialóg Campus, 2013

[2] Bérces György, Skrapits Lajos, Tasnádi Péter: *Mechanika II.*. Dialóg Campus, 2013

[3] Litz József: *Hőtan.* Dialóg Campus, 2001

[4] Landau, Lifsic: *Elméleti fizika I.* Tankönyvkiadó, 1984

[5] Nagy Károly: *Elméleti mechanika.* Nemzeti Tankönyvkiadó, 2002

[6] Györgyi Géza: *Elméleti mechanika A tanári jegyzet.*

[7] Cserti József: *Optika és relativitáselmélet előadás 11-12. diasor.*

[8] Hraskó Péter: *Relativitáselmélet.* Typotex, 2002

[9] Nagy Károly: *Kvantummechanika.* Nemzeti Tankönyvkiadó, 2000

[10] Tajkov Zoltán, Vanó Lilla: *Kvantummechanika A előadásjegyzet Katz Sándor előadásai alapján*

[11] FizWeb tételwiki *12. Atom és molekulaszerkezet*

[12] Kürti Jenő: *Atomspektroszkópia*

[13] Sólyom Jenő: *A modern szilárdtestfizika alapjai 1.*. Eötvös kiadó, 2009

[14] Sólyom Jenő: *A modern szilárdtestfizika alapjai 2.*. Eötvös kiadó, 2009

[15] Sólyom Jenő: *A modern szilárdtestfizika alapjai 3.*. Eötvös kiadó, 2011

[16] BME jegyzet *Elektro- és magnetosztatika*

[17] Dr. Révész Ádám előadása alapján Bozsó István jegyzete *Elektro- és magnetosztatika, Elektrodinamika*

[18] BME jegyzet Gálfi László - Elektrodinamika BSC *Elektro- és magnetosztatika ill. Elektrodinamika*

[19] BME jegyzet Jakovác Antal Elektrodinamika BSC *Elektrodinamika*

[20] Wikipedia szócikk *Elektrodinamika*

[21] BME fizipedia Lorentz erő *Elektrodinamika*