Kidolgozott Fizika Bsc záróvizsga tételek 2020

Tartalomjegyzék

1.	A k	lasszikus mechanika alapjai (Varga Dániel)	8
	1.1.	Kinematikai alapfogalmak	8
	1.2.	Mozgás leírása különböző koordináta-rendszerekben	9
	1.3.	Newton-törvények, mozgásegyenlet, tehetetlen és súlyos tömeg	11
	1.4.	Gyorsuló koordináta-rendszerek (jelenségek a forgó Földön)	12
	1.5.	Munkatétel és energiamegmaradás	14
	1.6.	Impulzus- és impulzusmomentum-megmaradási tételek tömegpontra	14
		1.6.1. Impulzus-megmaradás	14
		1.6.2. Impulzusmomentum-megmaradás tömegpontra	14
		1.6.3. Impulzus tétel és tömegközéppont-tétel pontrendszerre	15
		1.6.4. Impulzusmomentum-megmaradás pontrendszerre	16
		1.6.5. Munkatétel és energiamegmaradás pontrendszerre	17
	1.7.	Merev testek: egyensúly feltétele, tehetetlenségi tenzor, pörgettyűk	17
		1.7.1. Az egyensúly feltétele	17
		1.7.2. Egy szabadsági fokú rendszerek	18
		1.7.3. A tehetetlenségi tenzor	19
		1.7.4. A merev test mozgási energiája, impulzus a, impulzus momentuma $\ .$.	19
		1.7.5. Pörgettyűk	20
	1.8.	Galilei-, Lorentz-transzformáció, relativisztikus kinematika, relativisztikus di-	
		namika. Négyesimpulzus	24
0	A 1		07
2.	A K	lasszikus mechanika elvel (Portik Attila)	27
	2.1.	A Klasszikus mechanika elvel	27
	2.2.	A virtualis munka elve	27
	2.3. 9.4		20
	2.4.	2.4.1 Lagrange féla algéfajú maggégagyaplatak	29 20
		2.4.1. Lagrange-fele elsolaju mozgásegyemetek	29 20
	25	A Hamilton fürgyény	30 21
	2.9. 2.6	A hannion-luggveny	31 21
	2.0.27	Kanonikus transzformációk	30
	2.1.2	Szimmetriák és megmeredési tételek	34
	2.0.2	A tér homogenitása és az impulzus megmaradás	34
	2.0.	291 A tér izotrópiája és az impulzusmomentum megmaradás	35
		2.9.2. Az idő homogenitása és az energia megmaradása	35
			00
3.	\mathbf{Egz}	aktul megoldható fizikai problémák (Kovács Zoltán)	36
	3.1.	Csillapított és kényszerrezgések	36
		3.1.1. Csillapított rezgés	36
		3.1.2. Kényszerrezgések	37
	3.2.	Csatolt rezgések	38
	3.3.	Lineáris lánc	39
	3.4.	Kepler probléma, bolygómozgás	41

	3.5.	Potenciálvölgy	4
	3.6.	Oszcillátor	6
	3.7.	Rotátor	7
	3.8.	Hidrogénatom	9
	3.9.	Keltő és eltüntető operátorok	1
4.	Foly	ztonos közegek mechanikája 5	3
1.	4.1.	Bugalmas és képlékeny alakváltozások. Hooke-törvény, speciális deformációk 5	3
	4 2	Deformáció jellemzése feszültség- és deformációs tenzor	6
	4.3.	Folvadékok tulaidonságai, hidrosztatika, felületi feszültség, görbületi nyomás.	Ŭ
	1.0.	felhaitóerő	8
	4.4	Áramlások jellemzése, tökéletes folyadék áramlása. Bernoulli-egyenlet	0
	4.5	Euler-egyenletek viszkózus folyadék áramlása 6	1
	4.6.	Örvények, turbulencia. Revnolds-szám	2
			_
5.	Fen	omenologikus termodinamika (Szokody Márk, Friss Gergely, Mocsko-	
	nyi	Mirkó) 6	4
	5.1.	Termodinamikai állapotjelzők	4
	5.2.	Hőtágulás	5
	5.3.	Egyéb együtthatók	5
	5.4.	Gázmodellek	6
		5.4.1. Ideális gáz kinetikus modellje	6
		5.4.2. Van der Waals gáz $\ldots \ldots \ldots$	8
	5.5.	I. főtétel	9
	5.6.	Nyílt folyamatok	0
		5.6.1. Izoterm-folyamat \ldots 7	0
		5.6.2. Izochor-folyamat	0
		5.6.3. Izobar-folyamat	0
		5.6.4. Adiabatikus-folyamat	0
		5.6.5. Politrop-folyamat	0
	5.7.	Körfolyamatok	1
	-	5.7.1. Carnot-korfolyamat	1
	5.8.		2
	5.9.		3
	5.10	Termodinamikai potenciálok, fundamentális egyenlet	3
	5.11	. Fázisátalakulások jellemzői, típusai, fázisdiagramok, fázisegyensúly 7	5
	F 10	5.11.1. Gibbs-félé fázisszabály	6
	5.12	. Kémiai potenciál	1
6.	Elel	xtro- és magnetosztatika, áramkörök (Csillag Barnabás) 7	8
5.	6.1	Elektrosztatika	8
		6.1.1. Coulomb- és Gauss-törvény, szuperpozíció elve	8
		6.1.2. Vezetők	9
		6.1.3. Szigetelők, dielektrikumos polarizáció	0
		6.1.4. Kondenzátor	1

	6.2.	Magnetosztatika	1
		6.2.1. Aramok	1
		6.2.2. Lorentz-erő	2
		6.2.3. A magnetosztatika alapegyenletei	3
	6.3.	Stacionárius áram	4
		6.3.1. Kirchhoff-törvények	4
		6.3.2. Ohm-törvény	4
7.	Elek	strodinamika (Szakállas Nikolett) 8	5
••	7.1	Elektromágneses indukció Faradav-törvény 8	5
	1.1.	7 1 1 Elektromágneses indukció	5
		7.1.2 Faradav_törvény 8	5
	7.2	Váltakozó áram rezgőkör transzformátor	6
	1.2.	7.2.1 Váltakozó áram	6
		$7.2.1. \forall ana KOZO ana min \dots $	0 6
		7.2.2. Rezgokor	07
	7 0	$(.2.5. \text{ Iransziorinator} \dots \dots$	1
	1.3.	Maxwell-egyenietek, anyagi osszerüggesek, illesztesi feltetelek 8	ð
		$(.3.1. Maxwell-egyenletek \dots 8$	8
		7.3.2. Anyagi osszefuggések	9
		7.3.3. Illesztési feltételek	0
	7.4.	Elektromágneses potenciálok, mértékinvariancia	0
		7.4.1. Elektromágneses potenciálok	0
		7.4.2. Mértékinvariancia	1
		7.4.3. Mértékek	1
	7.5.	Elektromágneses tér energiája és impulzusa	2
		7.5.1. Az energia mérlegegyenlete	2
		7.5.2. Az impulzus mérlegegyenlete	3
8	Hull	lámegyenlet és hullámielenségek (Mocskonyi Mirkó) 9	5
0.	8 1	Megoldásai	5
	0.1.	8 1 1 Sikhullám 9	5
		812 Cömbhullámok	5
		8.1.2. Gombhumaniok	6
	89	Szármeztetége	6
	0.2.	8.2.1 Dugalmag hullámalt	6
		8.2.2. Fugannas hultanok	0 C
	0.9	8.2.2. Elektromagneses numamok 9 Diamagnité againet és férieseb assér 0	0
	8.3.	Diszperzio, csoport- es fazissebesseg	1
	8.4.	Doppler-effektus	8
	8.5.	Interierencia, diffrakcio	9
	8.6.	Elektromágneses hullámok terjedése vákuumban, dielektrikumban, vezetőkben 9	9
	8.7.	Polarizacio	0
	8.8.	Retardált potenciálok	1
	8.9.	Dipólsugárzás	1

9.	Geo	ometriai optika és alkalmazásai(Dudás Bence)	104
	9.1.	Bevezetés	104
	9.2.	Fermat-elv	104
	9.3.	Paraxiális közelítés	104
	9.4.	Leképezési törvények, felbontóképesség	105
		9.4.1. Felbontóképesség	106
	9.5.	Optikai eszközök	107
		9.5.1. Vetítőgép	107
		9.5.2. Fényképezőgép	107
		9.5.3. Nagyítólencse(Lupe)	107
		9.5.4. Szeműveg	107
		9.5.5. Mikroszkóp	107
		9.5.6. Távcső	108
	9.6.	Optikai jelenségek a természetben	108
		9.6.1. Szivárvány	108
		9.6.2. Korona	109
	~ -	9.6.3. Glória	109
	9.7.	Kausztikák	110
10	Δk	vantumelmélet alapvető kísérletei (Dudás Bence)	111
10	10 1	Fotoeffektus	111
	10.1	Compton-effektus	111
	10.2	Hőmérsékleti sugárzás	112
	10.4	. Rutherford-kísérlet	113
	10.5	. Milikan-kísérlet	113
	10.6	. Davisson-Germer-kísérlet	114
	10.7	. Stern-Gerlach-kísérlet	114
	10.8	. Einstein – de Haas-kísérlet	115
	10.9	. Zeeman-effektus	116
11	.A k	vantummechanika alapjai (Csillag Barnabás)	117
	11.1	. A kvantummechanika matematikai háttere, kvantummechanikai reprezentációk	x 117
	11.2	Határozatlansági reláció	118
	11.3	. Szabad részecske hullámfuggvénye	119
	11.4	Anyaghullamok	120
	11.5	. Valószínűségi értelmezés, szuperpozíció, fizikai állapot leírása	120
	11.6	. Fizikai mennyisègek operatorai	121
	11.7	A Schrödinger-egyenlet és szeparálása	121
	11.8	. Impulzusmomentum-operator, sajátértékei, sajátfüggvényei	122
	11.9	. Spin	123
	11.1	UKorrespodencia elv	123
	11.1	1Ehrenfest-têtel	123

12.Atom- és molekulaszerkezet	125
12.1. Atomi energiaszintek, emisszós és abszorpciós spektrumok	125
12.2. Bohr-modell, a hidrogénatom spektruma	125
12.3. Felhasadások: finomfelhasadás, hiperfinom felhasadás, Lamb-eltolódás \ldots .	126
12.3.1. Finomfelhasadás	126
12.3.2. Hiperfinom felhasadás	127
12.3.3. Lamb-eltolódás \ldots	128
12.4. Sptekrumvonalak felhasadása külső térben: Stark- és Zeeman-effektus $\ .\ .\ .$	128
12.4.1. Zeeman-effektus \ldots	128
12.4.2. Stark-effektus \ldots	129
12.5. Kvantummechanikai közelítő módszerek	130
12.5.1. Időfüggetlen perturbációszámítása	130
12.5.2. Variációs módszer	132
12.5.3. Wentzel–Kramers–Brollouin-közelítés	133
12.5.4. Időfüggő perturbációszámítás	134
12.5.5. Hartree-közelítés	135
12.6. Alagúteffektus (röviden)	135
12 A magfizika alapiai (Kaváza Zaltán, Szakállaz Nikalatt áz Bazznyák Dávid)	126
13.1. Izotóptórkón, atommagok tömoga, mórota, kötási anorgiája – Enorgia és tömog	190
$15.1.12000$ pterkep, atommagok tomege, merete, kotesi energiaja \pm Energia es tomeg	136
13.2 A comprodell és a félempirikus kötési formula	138
13.3 Maghasadás magfúzió radioaktivitás	138
13.4 Sugárzás és anyag kölcsönhatása: Bethe-Bloch-formula	130
13.5 Radioaktív bomlások magátalakulások	141
13.6 Elemi részecskék és alapvető kölcsönhatások	142
13.7 Kísérleti eszközök	143
	110
14.A termodinamika statisztikus alapozása (Szakállas Nikolett)	144
14.1. Mikrokanonikus, kanonikus, nagykanonikus sokaság	144
14.1.1. Mikrokanonikus sokaság	144
14.1.2. Kanonikus sokaság	144
14.1.3. Nagykanonikus sokaság	146
14.2. Mikroállapotok fogalma, Boltzmann-entrópia, egyszerű alkalmazások	147
14.2.1. Mikroállapotok fogalma	147
14.2.2. Boltzmann-entrópia	148
14.2.3. Egyszerű alkalmazások	148
14.3. Ergodikus hipotézis. Maxwell–Boltzmann-statisztika.	149
14.3.1. Ergodikus hipotézis	149
14.3.2. Maxwell-Boltzmann-statisztika	149
14.4. Maxwell-féle sebességeloszlás.	150

15.Kvantumstatisztikák (Mocskonyi Mirkó) 15	1
15.1. Ideális kvantumgázok: Bose-Einstein és Fermi-Dirac statisztika 15	51
15.2. Fermi-rendszer $T = 0$ K közelében (degenerált Fermi-gáz)	<i>5</i> 4
15.2.1. Fermi-függvény viselkedése	<i>5</i> 4
15.2.2. Példa degenerált Fermi-gázra: delokalizált eletkronok fémekben 15	54
15.3. Fermi-Dirac és Bose-Einstein statisztika magas hőmérsékleti hatá resete $\ .\ .\ .\ 15$	6
16.Mágneses rendszerek (Friss Gergely) 15	8
16.1. Atomi diamágnesség	59
16.1.1. Atomi paramágnesség 15	59
16.2. Pauli-szuszceptibilitás és Landau diamágnesség	<i>i</i> 0
16.3. Ferromágnesség	31
16.4. Antiferro- és ferrimágneses anyagok	53
16.5. Szupravezetés $\ldots \ldots \ldots$	<i>i</i> 3
17.Kristályos anyagok fizikája (Kovács Zoltán) 16	6
17.1. Szimmetriák, pontcsoportok, Bravais rácsok	6
17.2. Diffrakció, kinematikus elmélet	37
17.2.1. Diffrakció	38
17.2.2. Kinematikus elmélet	38
17.3. Elektron és röntgendiffrakció sajátosságai	70
17.4. Elektronoptika, elektronmikroszkóp	71
17.5. Rácsrezgések termikus hatásai	71
17.6. Sávszerkezetek	'2
18.Az asztrofizika alapjai (Friss Gergely) 17	' 4
18.1. Ősrobbanás	74
18.2. Galaxisok	$^{\prime}7$
18.2.1. Spirál galaxisok felépítése	78
18.3. Csillagok és kompekt objektumok	' 9
18.3.1. A HR diagramm	' 9
18.3.2. Csillagfejlődés és kompakt objektumok	30
18.3.3. Csillagok energiatermelése	31
18.4. Megfigyelés alapjai	33
18.4.1. Luminozitás	33
18.4.2. Magnitúdó	34
18.4.3. Vöröseltolódás	34

1. A klasszikus mechanika alapjai (Varga Dániel)

Kinematikai alapfogalmak, mozgás leírása különböző koordináta-rendszerekben. Newtontörvények, mozgásegyenlet, tehetetlen és súlyos tömeg. Gyorsuló koordináta-rendszerek (jelenségek a forgó Földön). Munkatétel. Pontrendszerek. Merev testek: egyensúly feltétele, tehetetlenségi tenzor, pörgettyűk. Energia-, impulzus- és impulzusmomentum-megmaradási tételek tömegpontra és pontrendszerre. Galilei-, Lorentz-transzformáció, relativisztikus kinematika, relativisztikus dinamika. Négyesimpulzus.

1.1. Kinematikai alapfogalmak

A kinematika a testek mozgásának matematikai leírása. Mozgó testről akkor beszélünk, ha egy test hely, illetve helyzet változtatást végez egy másik testhez képest. Azt a testet, amihez képest a mozgást viszonyítjuk *vonatkoztatási rendszernek* hívjuk. Az anyagi pont mozgását a vonatkoztatási rendszerhez rögzített *koordináta-rendszerben* írjuk le.

Mozgó testek leírásánál gyakran használjuk a *tömegpont* közelítést, vagyis, a kiterjedt merev test helyett, azzal megegyező tömegű pontokként kezeljük a testeket.

- A koordináta-rendszer kezdőpontjából (*origó*) az anyagi ponthoz húzott szakaszt *hely-vektornak* nevezzük, melynek iránya minden t időpillanatban a mozgó test tömegközéppontja, illetve a tömegpont felé mutat, jele: $\mathbf{r}(t)$. A helyvektor a mozgó test adott időpillanatbeli koordinátáitól függ pl.: $\mathbf{r}(t)=(x(t), y(t), z(t))$.
- Azt a görbét, amit a test mozgása során leír a mozgás *pályájának* nevezzük.
- A pálya teljes hossza, vagy csak egy részének a hossza az út, jele: s.
- A pálya kezdő- és végpontját összekötő vektor az elmozdulásvektor: $\Delta \mathbf{r} = \mathbf{r}_2 \mathbf{r}_1$. A megtett út hossza és az elmozdulás nagysága általában nem egyenlő, $s \neq |\Delta \mathbf{r}|$.

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:

$$\frac{\Delta \mathbf{r}}{\Delta t} = \frac{\mathbf{r}(t_0 + \Delta t) - \mathbf{r}(t_0)}{\Delta t} \tag{1}$$

Ha Δt -t minden határon túl csökkentjük ($\Delta t \rightarrow 0$), akkor bevezethető a test *pillanatnyi* sebessége:

$$\mathbf{v}(t_0) = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\Delta \mathbf{r}}{\Delta t} = \lim_{t \to t_0} \frac{\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(t_0)}{t - t_0} = \frac{d\mathbf{r}}{dt}\Big|_{t_0} = \dot{\mathbf{r}}(t_0)$$
(2)

Hasonló módon a pillanatnyi gyorsulás:

$$\mathbf{a}(t_0) = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\Delta \mathbf{v}}{\Delta t} = \lim_{t \to t_0} \frac{\mathbf{v}(t) - \mathbf{v}(t_0)}{t - t_0} = \frac{d\mathbf{v}}{dt}\Big|_{t_0} = \dot{\mathbf{v}}(t_0) = \ddot{\mathbf{r}}(t_0)$$
(3)

1.2. Mozgás leírása különböző koordináta-rendszerekben

A Descartes-i koordináta-rendszerben a tömegpont helyzetét három koordinátával lehet megadni. A fent ismertetett fogalmakat ilyen típusú rendszerben tettük fel. Az alábbiakban látható módon ez átváltható a mozgáshoz célszerűbb rendszerekre.



1. ábra. Descartes-féle jobbsodrású koordináta - rendszerben a mozgás leírása.



2. ábra. Síkbeli polárkoordináták

$$x = r \cdot \cos(\theta)$$
$$y = r \cdot \sin(\theta)$$
$$r = \sqrt{x^2 + y^2}$$



3. ábra. Hengerkoordináták

$$x = r \cdot \cos(\theta)$$
$$y = r \cdot \sin(\theta)$$
$$z = z$$
$$r = \sqrt{x^2 + y^2}$$



4. ábra. Gömbkoordináták

$$x = r \cdot \sin(\theta)\cos(\phi)$$
$$y = r \cdot \sin(\theta)\sin(\phi)$$
$$z = r \cdot \cos(\theta)$$
$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

$Term \acuteeszetes~koordin \acutea ta-rendszer$

Anyagi pont mozgásához hozzárendelhetünk egy ún. természetes koordináta rendszert, vagy más néven kísérő triédert. A kísérő triéder egységvektorai:

- e-érintő irányú egységvektor (szokás t-vel is jelölni)
- **n**-normál irányú egységvektor (adott pontbeli *símulókör* középpontja felé mutat)
- **b**-binormális egységvektor (merőleges a másik kettőre, $\mathbf{b} = \mathbf{e} \times \mathbf{n}$)

Az e és n vektorok határozzák meg a pillanatnyi *símulósíkot*.

A pálya pillanatnyi görbülete $G = \frac{1}{R} = \frac{d\mathbf{e}}{ds}$, ahol R a símulókör sugara, ds pedig a Δt idő alatt megtett út.



5. ábra. Kísérő triéder

1.3. Newton-törvények, mozgásegyenlet, 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 (**Newton I.**):

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 F/a = m hányados egy testre jellemző mennyiséggel, a tömeggel arányos. Ezt a hányadost átrendezve kaphatjuk **Newton II.** törvényét, másnéven a dinamika alaptörvényét:

$$\mathbf{F} = m \cdot \mathbf{a} = m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = m \ddot{\mathbf{r}} = \frac{d \mathbf{p}}{dt}$$
(4)

Ahol $\mathbf{p} = m \cdot \mathbf{v}$ az impulzus. Fontos, hogy a fenti összefüggésben a tömeg mint a tehetetlenség mértéke jelenik meg. Newton gravitációs törvényében azonban a testeknek az a tulajdonsága nyilvánul meg, hogy mennyire vonzzák egymást. Ez egészen távolinak tűnhet a tehetetlen tömeg fogalmától, megkülönböztetésül nevezzük súlyos tömegnek. A mai állás szerint a tehetetlen és a súlyos tömeg aránya állandó, anyagi minőségtől függetlenül. Az arányt nagy pontossságal Eötvös Loránd mérte ki, ahonnan is az eltérés $< 5 \cdot 10^{-8}$.

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. Ez a hatás-ellenhatás törvénye (**Newton III.**)

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 (**Newton IV.**).

1.4. Gyorsuló koordináta-rendszerek (jelenségek a forgó Földön)

(Az alábbiakkal megegyező eredményre vezető levezetés található az Elméleti Mechanika "A" Györgyi Géza jegyzetben. Gyorsuló koordináta rendszerek, mozgásegyenletek átszámítása fejezetben, 14-22 oldalig)

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.

Tekintsünk két rendszert K és K'-t melyekben a helyvektorok **r** és **r**'. Transzlációsan gyorsuló rendszer:

K' gyorsul, de nem forog K-hoz képest.

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 + \mathbf{r}' \to \mathbf{a} = \mathbf{a}_0 + \mathbf{a}' \tag{5}$$

Forgó rendszer:

 $K' \boldsymbol{\omega}$ szögsebességvektorral forog K rendszerhez képest, úgy hogy a két rendszer origója megegyezik. Legyen $\mathbf{A} = A_x \mathbf{i'} + A_y \mathbf{j'} + A_z \mathbf{k'}$, a K'-s rendszerben lévő vektor ($\mathbf{i'}, \mathbf{j'}, \mathbf{k'}$ a K'rendszer egységvektorai). Képezzük az idő szerinti deriváltját a K rendszerből nézve:

$$\frac{d\mathbf{A}}{dt} = \frac{d'A_x}{dt}\mathbf{i'} + \frac{d'A_y}{dt}\mathbf{j'} + \frac{d'A_z}{dt}\mathbf{k'} + A_x\frac{d\mathbf{i'}}{dt} + A_y\frac{d\mathbf{j'}}{dt} + A_z\frac{d\mathbf{k'}}{dt}$$
(6)

A tagok összevonásával a következőt kapjuk:

$$\frac{d\mathbf{A}}{dt} = \frac{d'\mathbf{A}}{dt} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{A} \tag{7}$$

Ahol a d' azt jelenti, hogy a gyorsuló rendszerbeli deriváltat képezzük. Felhasználjuk továbbá, hogy $|\mathbf{v}| = r\omega \sin(\theta) \rightarrow \mathbf{v} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r} = \frac{d\mathbf{r}}{dt}$, ahol θ a forgástengely és a helyvektor által bezárt szög. Az első tag \mathbf{A} K' rendszerbeli mozgásából adódik, a második a K' forgásából. A fent leírtak tetszőleges vektorra, illetve mennyiségre, aminek időszerinti deriváltját képezzük K-ból nézve igazak, amihez képest K' forog, illetve transzlációsan gyorsulhat is.

Ezt kihasználva nézzük azt az esetet, amikor nem egyezik a két rendszer origója és transzlációsan is gyorsul a K' rendszer. A K' középpontjához \mathbf{r}_0 helyvektor tartozik K-ban. Ekkor $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 + \mathbf{r}'$:

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{d\mathbf{r}_0}{dt} + \frac{d'\mathbf{r}'}{dt} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}' = \mathbf{v}_{Tr} + \mathbf{v}' + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}'$$
(8)

Ahol \mathbf{v}_{Tr} a K' rendszer K-beli sebessége és \mathbf{v} ' a K'-beli sebesség. Mégegyszer deriválva az idő szerint és kihasználva, hogy K'-beli mennyiségek idő szerinti deriváltja (7) képpen írható :

$$\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = \frac{d\mathbf{v}_{Tr}}{dt} + \frac{d'\mathbf{v'}}{dt} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{v'} + \boldsymbol{\omega} \times \frac{d\mathbf{r'}}{dt} + \frac{d\boldsymbol{\omega}}{dt} \times \mathbf{r'} =$$
(9)

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

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

$$m\mathbf{a}' = \mathbf{F} - m\mathbf{a}_{Tr} - m(\boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r})) - 2m(\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{v}) - m\dot{\boldsymbol{\omega}} \times \mathbf{r}$$
(10)

F : K rendszerből K'-re ható erő.

 $m\mathbf{a}_{Tr}$: A K' transzlációs gyorsulásából származó erő.

 $-m(\boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}))$: centrifugális erő

 $-2m(\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{v})$: Coriolis-erő.

 $-m\dot{\boldsymbol{\omega}} \times \mathbf{r}$: Az esetleges szöggyorsulásból származó 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 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 (ciklonok). 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.

1.5. 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:

$$W = \int_{r_a}^{r_b} \mathbf{F}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int_{r_a}^{r_b} m \ddot{\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \int_{t_a}^{t_b} \frac{1}{2} \frac{dm \dot{\mathbf{r}}^2}{dt} dt = \frac{1}{2} m \mathbf{v}_a^2 - \frac{1}{2} m \mathbf{v}_b^2$$
(11)

A fenti alapján bevezethetünk egy új mennyiséget, a kinetikus energiát: $K = \frac{1}{2}mv^2$. Ha a fenti integrált zárt görbére végezve eredményül nullát kapunk, akkor azt mondjuk, hogy az erőtér konzervatív:

$$\oint_{\delta\gamma} \mathbf{F} d\mathbf{r} = \int_{\gamma} \nabla \times \mathbf{F} d\mathbf{S} = 0 \tag{12}$$

Ebből következik, hogy létezik olyan $\Phi : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$, amire teljesül, hogy $\mathbf{F} = -grad\Phi$. Ha ilyen erőtérrel rendelkezünk, akkor a végzett munka nem függ az útvonaltól, csak a két végponttól:

$$W_{AB} = \int_{A}^{B} \mathbf{F}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int_{A}^{B} -\nabla \Phi d\mathbf{r} = -\int_{A}^{B} \frac{\partial \Phi}{\partial x} dx + \frac{\partial \Phi}{\partial y} dy + \frac{\partial \Phi}{\partial z} dz = -\int_{A}^{B} d\Phi = \Phi_{A} - \Phi_{B} = K_{A} - K_{B}$$
(13)

Ezzel azt kaptuk, hogy konzervatív erőtérben a teljes mechanikai energia megmarad: $K_A + V_A = K_B + V_B = E$.

1.6. Impulzus- és impulzusmomentum-megmaradási tételek tömegpontra

1.6.1. Impulzus-megmaradás

Newton második törvényéből tudjuk, hogy

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F}(t) \tag{14}$$

Ez alapján adott idő alatti impulzus változás:

$$\Delta \mathbf{p} = \int_0^T \mathbf{F}(t) dt \tag{15}$$

Az egyenlet jobb oldalán található mennyiséget erőlökésnek nevezzük. Amennyiben $\mathbf{F}(t) = 0$, akkor $\frac{d\mathbf{p}}{dt} = 0 \rightarrow \mathbf{p} = const.$, azaz ha a testre nem hat erő, az impulzus megmarad.

1.6.2. Impulzusmomentum-megmaradás tömegpontra

A hétköznapi tapasztalatok azt mutatják, hogy ha egy tengellyel rögzített testre erőt fejtünk ki, akkor az forgásba jöhet. Ennek leírására bevezetjük a forgatónyomatékot:

$$\mathbf{M} = \mathbf{r} \times \mathbf{F} \tag{16}$$

Ahol **F** a testre ható erő, **r** pedig a forgástengelyből az erő támadáspontjába mutató vektor. Az erőt felbontva tengelyirányú és arra merőleges (F_m) komponensekre megmutatható, hogy $|\mathbf{M}| = |\mathbf{r}||\mathbf{F}|sin(\alpha) = rF_m$, ahol α az **F** és **r** által bezárt szög. Látszik tehát, hogy a forgatónyomaték nagysága nem függ a különböző tengelyt tisztán csak "húzó" vagy "toló" erőktől.

Felírva a dinamika alaptörvényét és balról keresztszorozva **r**-el:

$$\mathbf{r} \times \mathbf{F} = \mathbf{r} \times \frac{d\mathbf{p}}{dt} \tag{17}$$

Ahol jobb oldalon a $\mathbf{r} \times$ bevihető a deriváltba, mert $\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{p} = \dot{\mathbf{r}} \times m\dot{\mathbf{r}} = 0$. Vezessük be a $\mathbf{N} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ jelölést, amit impulzusmomentumnak nevezünk. Ekkor

$$\mathbf{r} \times \mathbf{F} = \mathbf{M} = \frac{d\mathbf{N}}{dt} \tag{18}$$

Tehát, ha nem hat forgatónyomaték, akkor az impulzusmomentum megmarad.

Pontrendszerek

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.

1.6.3. Impulzus tétel és tömegközéppont-tétel pontrendszerre

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

$$\mathbf{F}_{i}^{(k)} + \sum_{j} \mathbf{F}_{ij} = m_{i} \ddot{\mathbf{r}}_{i} \tag{19}$$

Összeadva az egyenleteket:

$$\sum_{i} \mathbf{F}_{i}^{(k)} + \sum_{i,j} \mathbf{F}_{ij} = \sum_{i} m_{i} \ddot{\mathbf{r}}_{i}$$
(20)

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

$$\mathbf{F}_{e}^{(k)} = \sum_{i} \mathbf{F}_{i}^{(k)} = \frac{d\mathbf{p}}{dt}$$
(21)

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 $\mathbf{r}_{0} = \frac{\sum_{i} m_{i} r_{i}}{\sum_{i} m_{i}}$ 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:

$$\mathbf{F}_{e}^{(k)} = \sum_{i} \mathbf{F}_{i}^{(k)} = M_{t} \ddot{\mathbf{r}}_{0} = \frac{d\mathbf{p}_{0}}{dt}$$
(22)

Ezzel sikerült a tömegpontokból álló rendszer mozgását egy pont (a tömegközéppont) 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.

1.6.4. Impulzusmomentum-megmaradás pontrendszerre

Ha az N darab tömegpont mozgásegyenleteit vektoriálisan megszorozzuk a helyvektorral, és összeadjuk őket, akkor a belső erők forgatónyomatékai megfelelő felbontások után kiejtik egymást, hasonlóan az impulzustételben látottakhoz.

$$\sum_{i} \mathbf{r}_{i} \times \mathbf{F}_{i}^{(k)} = \frac{d}{dt} \sum_{i} \mathbf{r}_{i} \times \mathbf{p}_{i}$$
(23)

Bal oldalon a rendszerre ható erők eredő forgatónyomatéka áll, jobb oldalon a deriválás alatt pedig a rendszer összes impulzusnyomatéka (perdülete). Ez a pontrendszerre vonatkozó impulzusmomentum-tétel.

Bevezetve az eredő mennyiségek jelölését $\mathbf{M}_{e}^{(k)} = \frac{d\mathbf{N}}{dt}$, jól látszik, hogyha nem hat külső erő, 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 ($\boldsymbol{\rho}$ a tömegközépponti rendszerből nézett elmozdulása a pontnak, $\boldsymbol{\epsilon}$ pedig a sebessége).

$$\mathbf{N} = \sum_{i} (\mathbf{r}_0 + \boldsymbol{\rho}_i) \times m_i (\mathbf{v}_0 + \boldsymbol{\epsilon}_i)$$
(24)

Tagonként elvégezve a szorzásokat és felhasználva, hogy a tömegközépponti rendszer miatt $\sum_{i} m_i \rho_i = \sum_{i} m_i \epsilon_i = 0$. Így a szokásos jelöléseket használva a következő kifejezés marad:

$$\mathbf{N} = \sum_{i} \mathbf{r}_{0} \times M_{t} \mathbf{v}_{0} + \sum_{i} \boldsymbol{\rho}_{i} \times m_{i} \boldsymbol{\epsilon}_{i}$$
(25)

A fenti kifejezés első tagját \mathbf{N}_p pálya-impulzus
momentumnak, a második tagot pedig \mathbf{N}_s saját-impulzus
momentumnak nevezzük. A pálya-impulzus
momentum a rendszer pálya menti mozgásából adódik, a saját-impulzus
momentum pedig a rendszeren "belüli", a tömegközépponthoz viszonyított mozgásokból jön. Ezekre egyenként teljesül az impulzus
momentum-megmaradás tétel.

1.6.5. Munkatétel és energiamegmaradás pontrendszerre

A pontrendszerek mozgásegyenletéből kiindulva, megszorozva $\Delta \mathbf{r}$ -el:

$$\mathbf{F}_{i}^{(k)}\Delta\mathbf{r}_{i} + \sum_{j}\mathbf{F}_{ij}\Delta\mathbf{r}_{i} = m_{i}\ddot{r}_{i}\Delta\mathbf{r}_{i} = \Delta\left(\frac{1}{2}m_{i}\dot{\mathbf{r}}^{2}\right)$$
(26)

A bal oldal első tagját elnevezzük a külső erők munkájának és $\delta W_i^{(k)}$ -val jelöljük, a második tag pedig a belső erők munkája, amit $\delta W_i^{(b)}$ -vel jelölünk. Ezen jelölésekkel, elvégezve az összegzést a rendszer teljes kinetikus energia megváltozását kapjuk:

$$\sum_{i} (\delta W_{i}^{(k)} + \delta W_{i}^{(b)}) = \Delta \left(\sum_{i} \frac{1}{2} m_{i} \dot{\mathbf{r}}^{2}\right) = \Delta E_{k} = W^{(k)} + W^{(b)}$$
(27)

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:

$$E_k = \frac{1}{2}M_t \mathbf{v}_0^2 + \sum_i \frac{1}{2}m_i \boldsymbol{\epsilon}_i^2 \tag{28}$$

$$\sum_{i} \mathbf{F}_{i}^{(k)} \Delta \boldsymbol{\rho}_{i} + \sum_{ij} \mathbf{F}_{ij} \Delta \boldsymbol{\rho}_{i} = \Delta \left(\sum_{i} \frac{1}{2} m_{i} \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{2} \right)$$
(29)

1.7. Merev testek: egyensúly feltétele, tehetetlenségi tenzor, pörgettyűk

Merevnek nevezzük azt a testet, amelyre tetszőleges kölcsönhatás során fennáll, hogy közben bármely két pontjának távolsága állandó. Matematikai alakban ezt a következőképpen fejezhetjük ki: legyen a merev test tetszőleges két pontjának valamely O vonatkoztatási pontból húzott helyvektora \mathbf{r}_A és \mathbf{r}_B (A és B pontba mutatnak). Ekkor a két pont közötti $|\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B| = d(A, B)$ távolság állandó. A merev test helyzetét három, nem kollineáris pontjának koordinátáival jellemezhetjük. A test egy A pontjának rögzítése után a merev test pontjai a rögzített pont körüli gömbfelületen mozoghatnak. Ha a testnek egy másik, B pontját is rögzítjük, akkor a test az A és B ponton átmenő tengely körül még elfordulhat. A tengely egyenesén kívül fekvő, egyébként tetszőleges harmadik, C pontjának rögzítésével már az egész test helyzete megadható. A három pont helyének megadásához kilenc koordináta szükséges. A merev kötés miatt azonban ezek között három összefüggést írhatunk fel; például azt, hogy a három pont közül bármely kettőnek a távolsága állandó. Mivel a kilenc adat közül három nem független, a merev test helyzete általában 6 független adattal jellemezhető. Ezt úgy mondjuk, hogy a szabad merev testnek 6 szabadsági foka van (ebből három egy tetszőleges pont x,y,z koordinátája, a másik három pedig az Euler-szögek).

1.7.1. Az egyensúly feltétele

Ha egy szabad merev test mozgását le akarjuk írni, két út áll rendelkezésre. Az egyik az, hogy bevezetjük a merev test helyzetét jellemző 6 független koordinátáit, és ezekben, mint

általános koordinátákban a Lagrange-féle egyenleteket felírjuk; a másik pedig az, hogy kiindulunk a bármely pontrendszerre érvényes tömegközéppont-tételből és impulzusmomentumtételből:

$$m\ddot{\mathbf{r}}_0 = \sum_i \mathbf{F}_i \tag{30}$$

$$\frac{d}{dt}\sum_{i}m_{i}(\mathbf{r}_{i}\times\dot{\mathbf{r}}_{i})=\sum_{i}\mathbf{r}_{i}\times\mathbf{F}_{i}$$
(31)

Egy anyagi pontnál az egyensúly szükséges és elégséges feltétele, hogy a pontra ható összes erők eredője zérust adjon. Merev testnél az ennek megfelelő feltétel nem elegendő, mert (30) szerint csak a tömegközéppont gyorsulásának hiányát jelenti, így a körülötte történő forgó mozgások lehetségesek (pl. erőpár). Tehát a forgómozgás akkor nem lép fel, ha az erők forgatónyomatékának eredője is zérus.

$$\sum_{i} \mathbf{F}_{i} = 0 \text{ és } \sum_{i} \mathbf{r}_{i} \times \mathbf{F}_{i} = 0$$
(32)

Egy nem szabad merev testnél ugyanezek a feltételek érvényesek, ha a külső erőkbe beleértjük azokat a külső kényszererőket is, amelyek a kényszerfeltételekből – az adott testnek más testekkel való érintkezéséből- származnak. Tehát: Merev test egyensúlyának szükséges és elégséges feltétele, hogy a testre ható összes külső erők eredője és a külső erők (tetszőleges pontra vonatkozó) forgatónyomatékainak eredője zérus legyen.

Egy merev test egyensúlyát tekintve különböző típusokról beszélhetünk. Ha a test a kitérítés után eredeti helyzetének környezetében marad (esetleg visszatér kiinduló helyzetébe), akkor az egyensúly stabilis. Ha a test a kimozdítás után eltávolodik az egyensúlyi helyzetéből, és nem tér oda vissza, az egyensúlyi helyzet labilis. Abban az esetben, amikor a test az új helyzetben is egyensúlyban marad, indifferens egyensúlyról van szó.

1.7.2. Egy szabadsági fokú rendszerek

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

$$m\ddot{\mathbf{r}}_0 = \mathbf{F}_{sz} + \mathbf{F}_k \tag{33}$$

$$\frac{d\mathbf{N}}{dt} = \mathbf{M}_{sz} + \mathbf{M}_k \tag{34}$$

Itt az "sz" index a szabad erőre, illetve forgatónyomatékra utal, a "k" index pedig a tengelyen ébredő kényszer erőre és kényszer-forgatónyomatékra. Forgástengelynek válasszuk a t tengelyt. Ekkor a tengelyirányú impulzusmomentum változásra $\dot{\mathbf{N}}_t = \mathbf{M}_{szt}$ 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 $x_i = l_i cos(\phi)$ valamint az $y_i = l_i sin(\phi)$ jelöléseket, ahol l_i adott pont tengelytől vett távolsága x-y síkban, ϕ az elfordulás szöge. Ekkor a következőt kapjuk:

$$N_{z} = \sum_{i} (x_{i} p_{y_{i}} - y_{i} p_{x_{i}}) = \sum_{i} m_{i} (x_{i} \dot{y}_{i} - y_{i} \dot{x}_{i}) = \sum_{i} m_{i} \omega (l_{i}^{2} \cos^{2}(\phi) + l_{i}^{2} \sin^{2}(\phi)) = \omega \sum_{i} m_{i} l_{i}^{2} = \Theta_{z} \omega$$
(35)

Azaz

$$\dot{\mathbf{N}}_z = \Theta_z \ddot{\phi} \tag{36}$$

ahol Θ_z tengelyre vonatkoztatott tehetetlenségi nyomaték.

1.7.3. A tehetetlenségi tenzor

Ha folytonos tömegeloszlásra szeretnénk felírni a tehetlenségi nyomatékot, akkor a szumma helyett integrálás írandó. Azaz a t tengelyre vonatkoztatott tehetetlenségi nyomaték $\Theta_t = \int l^2 \rho(r) d^3 r$. Ahol $\rho(\mathbf{r})$ a test sűrűsége.

Legyen **e** egy tetszőleges tengely egységvektora, **r** pedig a helyvektor. Ekkor látható, hogy $|\mathbf{e} \times \mathbf{r}| = rsin(\theta) = l$, ahol θ a forgástengely és a helyvektor közötti szög. Számoljuk ki az l^2 mennyiséget:

$$l^{2} = |\mathbf{e} \times \mathbf{r}|^{2} = \mathbf{e}^{2} \mathbf{r}^{2} - (\mathbf{e}\mathbf{r})^{2}$$
(37)

Felhasználva a fenti kifejezést, definíció alapján végigszámolható a \mathbf{e} tengelyre vonatkoztatott tehetetlenségi tenzor kifejezése:

$$\Theta(\mathbf{e}) = \int |\mathbf{e} \times \mathbf{r}|^2 \rho(\mathbf{r}) d^3 r = \int (\mathbf{e}^2 \mathbf{r}^2 - (\mathbf{e}\mathbf{r})^2) \rho(\mathbf{r}) d^3 r = \int \mathbf{e} (\mathbf{r}^2 \underline{\underline{I}} - \mathbf{r} \circ \mathbf{r}) \mathbf{e} \rho(\mathbf{r}) d^3 r = \mathbf{e} \underline{\underline{\Theta}} \mathbf{e} \quad (38)$$

Amit kaptunk $\underline{\Theta}$ az tehetetlenségi tenzor.

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

$$(39)$$

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

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. Nagyon fontos tulajdonsága 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.

1.7.4. A merev test mozgási energiája, impulzusa, impulzusmomentuma

Mozgási energia:

$$K = \int \rho \frac{1}{2} \mathbf{v}^2 dV = \frac{1}{2} \int \rho \mathbf{v}_0^2 dV + \frac{1}{2} \int \rho (\omega \times \mathbf{r})^2 dV + \frac{1}{2} \int \rho (\omega \times \mathbf{r}) \mathbf{v}_0 dV$$
(40)

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 tag a tehetetlenségi tenzor bevezetésével $E_{forg} = \frac{1}{2}\omega \Theta \omega$ alakra hozható.

Az **impulzus** meghatározásához az általános leírásban kimondott sebesség definíciót használjuk.

$$\mathbf{p} = \sum_{i} m_{i} \mathbf{v}^{(i)} = \sum_{i} m_{i} (\mathbf{v}_{0} + \omega \times \mathbf{r}^{(i)}) = M \mathbf{v}_{0} + \omega \times \mathbf{r}_{s} M$$
(41)

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

Az impulzusmomentumot definíció alapján lehet végigszámolni

$$\mathbf{N} = \int \mathbf{r} \times \mathbf{v} \rho dV = \int \mathbf{r} \times (\mathbf{v}_0 + \omega \times \mathbf{r}) \rho dV = \int \mathbf{r} \rho dV \times \mathbf{v}_0 + \int \mathbf{r} \times (\omega \times \mathbf{r}) \rho dV \quad (42)$$

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:

$$\mathbf{N} = M\mathbf{r}_s \times \mathbf{v}_0 + \underline{\Theta}\omega \tag{43}$$

1.7.5. Pörgettyűk

Pörgettyűnek hívunk minden olyan merev testet, amelynek csak egy pontja (a támaszpontja) van rögzítve, vagy általánosabban, amelynek az alátámasztási pontja körüli mozgása ennek a pontnak mozgásától elkülönítve tárgyalható. A pörgettyűnek 3 szabadsági foka van, így három egyenlet szükséges ahhoz, hogy a mozgásokat leírhassuk. Vizsgáljuk a test mozgását nyugvó (K) és együtt forgó rendszerben (K'), állandó tehetetlenségi tenzor mellett úgy, hogy az együtt forgó rendszer a főtengely rendszer. Ekkor az adódó három egyenletet Euler-egyenleteknek nevezik. Ezek a $\frac{d\mathbf{N}}{dt} = \frac{d\mathbf{N}'}{dt} + \omega \times \mathbf{N} = \mathbf{M}$ összefüggésből jönnek:

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

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

$$\Theta_3 \dot{\omega}_3 + (\Theta_2 - \Theta_1) \omega_2 \omega_1 = M_3$$
(44)

Szimmetrikus erőmentes pörgettyű:

Ebben az esetben $\mathbf{M} = 0$ és a két fő tehetetlenségi nyomaték megegyezik, $\Theta_1 = \Theta_2$. Ilyenkor az egyenlet rendszer

$$\Theta_{1}\dot{\omega}_{1} + (\Theta_{3} - \Theta_{1})\omega_{3}\omega_{2} = 0$$

$$\Theta_{1}\dot{\omega}_{2} + (\Theta_{1} - \Theta_{3})\omega_{1}\omega_{3} = 0$$

$$\Theta_{3}\dot{\omega}_{3} = 0$$
(45)

A harmadik egyenletből 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

$$\dot{\omega}_1 = -\alpha\omega_2 \tag{46}$$

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

Megoldva a differenciálegyenleteket azt kapjuk, hogy $\omega_1 = a\cos(\alpha t + \delta)$ és $\omega_2 = a\sin(\alpha t + \delta)$

A szögsebességvektor egyenletes körmozgással egy kúpot jár körbe a szimmetriatengely körül, miközben a pörgettyű is forog a forgástengely körül, valamint a szögsebességvektor abszolút értéke állandó.

Jelenleg egy együtt forgó rendszerben dolgoztunk, ami nem inerciarendszer. Ahhoz, hogy rendszer viselkedését a K inerciarendszerből leírhassuk, célszerű bevezetni az úgynevezett Euler-szögeket.



6. ábra. Euler-szögek.

A $\vartheta \in [0, \pi], \psi \in [0, 2\pi]$ és $\varphi \in [0, 2\pi]$. Fejezzük ki a jelzett $\dot{\theta}, \dot{\psi}, \dot{\phi}$ szögsebességek vetületeit az x_1, x_2, x_3 tengelyekre. Ez ahhoz kell, hogy később ki tudjuk fejezni az ω szögsebességvektor komponenseit a mozgó koordináta-rendszerben. Mint látjuk a $\dot{\theta}$ vektort vetületei:

$$\dot{\vartheta}_{x_1} = \dot{\vartheta} cos(\psi) \tag{47}$$
$$\dot{\vartheta}_{x_2} = -\dot{\vartheta} sin(\psi)$$
$$\dot{\vartheta}_{x_3} = 0$$

A $\dot{\varphi}$ vektor z tengely irányú. A vetített komponensek a következők:

$$\dot{\varphi}_{x_1} = \dot{\varphi}sin(\vartheta)sin(\psi) \tag{48}$$

$$egin{aligned} \dot{arphi}_{x_2} &= \dot{arphi}sin(artheta)cos(\psi) \ \dot{arphi}_{x_3} &= \dot{arphi}cos(artheta) \end{aligned}$$

A $\dot{\psi}$ vektor x_3 irányú, ami merőleges mind az x_1 -re, mind az x_2 -re, ezért egyedül a $\dot{\psi}_{x_3} = z$ komponens nem 0.

Ezekkel kifejezve a szögsebesség komponenseket és beírva az inerciarendszerben érvényes mozgásegyenletbe a következő egyenletrendszert kapjuk:

$$\mathbf{N}_{x_1} = N \sin(\vartheta) \sin(\psi) = \Theta_1(\dot{\vartheta} \cos(\psi) + \dot{\varphi} \sin(\vartheta) \sin\psi)$$
(49)
$$\mathbf{N}_{x_2} = N \sin(\vartheta) \cos(\psi) = \Theta_2(-\dot{\vartheta} \sin(\psi) + \dot{\varphi} \sin(\vartheta) \cos\psi)$$
$$\mathbf{N}_{x_3} = N \cos(\vartheta) = \Theta_3(-\dot{\psi} + \dot{\varphi} \cos\vartheta)$$

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

$$\mathbf{N}_{x_1} \to \dot{\phi} = \frac{N}{\Theta_1} \to \omega_1 = a \cdot \cos(\alpha t + \delta) = \frac{N}{\Theta_1} \sin(\theta_0) \sin(\psi)$$
(50)

hasonlóan

$$\omega_2 = a \cdot \sin(\alpha t + \delta) = \frac{N}{\Theta_1} \sin(\theta_0) \cos(\psi)$$
(51)

A $\dot{\varphi}$ vektor z tengely irányú. A vetített komponensek a következők:

 φ

 ψ

$$\vartheta = \vartheta_0 \tag{52}$$
$$= \frac{N}{\Theta_1} t + \varphi_0$$
$$= -\alpha t + \psi_0$$

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. A pillanatnyi forgás-tengelyt 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:

$$L = \frac{\Theta_1}{2}\omega_1^2 + \frac{\Theta_2}{2}\omega_2^2 + \frac{\Theta_3}{2}\omega_3^2 - V(\vartheta, \psi, \varphi) = \frac{\Theta_1}{2}(\dot{\vartheta}^2 + \dot{\varphi}^2 sin^2(\vartheta)) + \frac{\Theta_3}{2}(\dot{\psi} + \dot{\varphi}cos(\vartheta))^2 - mgl \cdot cos(\vartheta)$$
(53)

Ebből kiszámíthatók az egyes komponensek:

$$\psi: \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}} = \frac{\partial L}{\partial \psi} = 0 \quad \rightarrow \quad \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}} = \Theta_3(\dot{\psi} + \dot{\phi}\cos(\vartheta)) = \Theta_3\omega_3 = N_{z'} = const. \tag{54}$$

$$\varphi: \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = \frac{\partial L}{\partial \varphi} = 0 \quad \rightarrow \quad \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = (\Theta_1 \sin^2(\vartheta) + \Theta_3 \cos^2(\vartheta))\dot{\varphi} + \Theta_3 \cos(\vartheta)\dot{\psi} = const. = N_z \quad (55)$$

Ebből $\dot{\varphi}$ -t kifejezve:

$$\dot{\varphi} = \frac{N_z - \Theta_3 \omega_3 \cos(\vartheta)}{\Theta_1 \sin^2(\vartheta)} \tag{56}$$

Hasonló átalakításokkal ki lehet fejezni a $\dot{\psi}$ és a $\dot{\vartheta}$ mennyiségeket is. A $\dot{\vartheta}$ mennyiségből számítható lenne a periódusidő, de ez a kifejezés egy elliptikus integrálra vezet. Ebben a példában egyébként a θ szög nem állandó, hanem egy $[\vartheta_1; \vartheta_2]$ intervallumban változik. Ezt nutációnak nevezik. A φ 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.



7. ábra. Precesszió és nutáció.

1.8. Galilei-, Lorentz-transzformáció, relativisztikus kinematika, relativisztikus dinamika. Négyesimpulzus.

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.

Alap fogalmak:

- <u>Relativitás elve</u>: A fizika törvényei minden vonatkoztatási rendszerben azonosak. Különböző K koordináta-rendszerekben érvényes x,y,z,t-vel felírt egyenletek alakja azonos.
- A fény sebessége minden vonatkozatási rendszerben azonos, c=const.
- <u>Téridő</u>: Az események halmaza: egy adott K koordináta-rendszerben az (x,y,z,t) pontok összesége.
- <u>Ívhossz</u>: Két tetszőleges (x_1, y_1, z_1, t_1) , (x_2, y_2, z_2, t_2) eseményre az ívelem négyzet: $S^2 = c^2(t_2 t_1)^2 d^2$, ahol $d^2 = (x_1 x_2)^2 + (y_1 y_2)^2 + (z_1 z_2)^2$. S a 4D Minkovskigeometriában a távolság. Fontos tulajdonság, hogy $S'^2 = S^2$. Tehát mindig megegyeznek az ívelem négyzetek.
- Sajátidő $\Delta \tau = \frac{1}{c} \int dS$. Adott esemény ideje az adott koordináta rendszerben.
- Anti háromszög egyenlőtlenség: Van három eseményünk, O_1, O_2, O_3 és az ívelem négyzetek $S_{12}^2, S_{13}^2, S_{23}^2$. Minden koordináta-rendszerben igaz, hogy $\tau_{12} + \tau_{23} < \tau_{13}$. Azt kaptuk, hogy 2 pont között a leghoszabb út az egyenes.





Az $S^2 > 0$ eseményeket időszerűnek, a $S^2 < 0$ pedig térszerűnek nevezzük. A $S^2 = 0$ a fénykúp, itt haladnak a fényjelek, ezt fényszerűnek hívjuk.

Galilei-, Lorentz-transzformáció:

Åttérhetünk egyik koordináta rendszerről a másikra. A newtoni mechanikában az egymáshoz képest egyenes vonalú egyenletes mozgást végző inerciarendszerek között az áttérést a *Galilei-transzformációval* lehet megtenni:

$$r' = r + vt \tag{57}$$
$$t = t'$$

Ezzel az a probléma, hogy nem tartja meg az S ívhoszt. Azt a transzformációt kell megtalálni ami a $c^2 \Delta t^2 - \Delta x^2 =$ invariáns mennyiségeket váltja át az egyes rendszerek között, úgy, hogy az egyenlet változatlan marad (Ezt most 1+1D-ban nézzük de igaz 1+3D-re is). A következő lineáris transzformációt, Lorentz-transzformációt használjuk:

$$\begin{pmatrix} ct \\ x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \pm ch(\chi) & sh(\chi) \\ sh(\chi) & \pm ch(\chi) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ct' \\ x' \end{pmatrix}$$
(58)

Ahol χ az úgynevezett rapiditás. A \pm előjel attól függően változik a $ch(\chi)$ -nél, hogy van-e időtükrözés (-), vagy nincs (+). Ha K' v sebességel távolodik K rendszertől, akkor K-ból K'be tarnszformálva + előjelet használunk a $sh(\chi)$ -nél. K'-ből vissza K-ba transzformáláskor használjuk a – előjelet, ekkor úgy vesszük, hogy K - v sebességel távolodik K'-től. Az egyes mennyiségek transzformációja során a következőt kapjuk:

$$t = \frac{t' + \frac{v}{c^2}x'}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \quad x = \frac{vt' + x'}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$
(59)

Látható, hogy a K-hoz képest v sebességel mozgó K' rendszerben kisebb a t értéke, továbbá ez igaz az x-re is. Az előbbit idődilatációnak, utóbbit hosszúság kontrakciónak nevezzük. (t' a mozgó trendszerben eltelt idő, vagyis a sajátidő $\Delta \tau = \Delta t'$)

A térben az események (ct,x,y,z) 4-es vektorral adhatóak meg:

$$x^{\mu} = \begin{pmatrix} ct \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix} \qquad x_{\mu} = \begin{pmatrix} ct \\ -x \\ -y \\ -z \end{pmatrix}$$
(60)

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. Ezek között az átváltás a metrikus tenzorral történik:

$$\eta^{\mu\nu} = \eta_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$
(61)

Átváltás: $x_{\mu} = \eta_{\mu\nu} x^{\nu}, x^{\mu} = \eta^{\mu\nu} x_{\nu}$. Ez alapján bevezethetjük a négyes sebességet:

$$u^{\mu} = \frac{dx^{\mu}}{dS} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \\ \frac{v_x}{c\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \\ \frac{v_y}{c\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \\ \frac{v_z}{c\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\mathbf{v}}{c} \end{pmatrix}$$
(62)

Ahol $dS = cd\tau = cdt\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$. Teljesül, hogy $u^{\mu}u_{\mu} = 1$ Hasonlóan egyenletesen, egy irányba gyorsuló mozgásnál a négyes gyorsulás:

$$a^{\mu} = \frac{d^2 x^{\mu}}{dS^2} = \frac{du^{\mu}}{dS} = \frac{a}{c^2} \begin{pmatrix} \frac{v}{c} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \\ \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$
(63)

Teljesül, hogy $a^{\mu}a_{\mu} = -\frac{a^2}{c^4}$ Bevezetehető a négyes impulzus is a négyes sebesség tömeggel való szorzásával. A tömeget a részecskéhez képest nyugvó rendszerben mérjük, ezt nyugalmi tömegnek nevezzük m_0 . Átszámolható a saját rendszerbe, effektív tömegre (tömeg deffektus):

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$
(64)

$$p^{\mu} = \begin{pmatrix} \frac{m_0 c}{\sqrt{1 - \frac{w^2}{c^2}}}\\ \frac{m_0 \mathbf{v}}{\sqrt{1 - \frac{w^2}{c^2}}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{E}{c}\\ \mathbf{p} \end{pmatrix}$$
(65)

Ahol
$$E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2}; \ p^{\mu} p_{\mu} = m^2 c^2.$$

(Hasznos lehet az optikás diákból átfutni a dgy-seket.)

2. A klasszikus mechanika elvei (Portik Attila)

A klasszikus mechanika elvei, Virtuális munka elve, Hamilton-elv. Legkisebb hatás elve. Lagrange-féle elsőfajú és másodfajú mozgásegyenletek. Hamilton-függvény, kanonikus egyenletek. Kanonikus transzformációk. Szimmetriák és megmaradási tételek

2.1. A klasszikus mechanika elvei

A klasszikus mechanika alapvető szabályait Newton törvényei rögzítik. A matematikusok több évszázadon át tartó érdeklődése a terület iránt számos, a Newton mechanikával egyenértékű leírását eredményezte a klasszikus mechanikának. A klasszikus mechanika elvei Newton törvényeivel ekvivalens, de eltérő matematikai formalizmust használó axiómák, melyek nem bizonyíthatóak, a gyakorlat tapasztalatain alapszanak, így érvényességüket is tapasztalati úton ellenőrízhetjük.

2.2. A virtuális munka elve

A mechanikában az egyensúlyi helyzet tárgyalásánál a kényszererők megadása sok esetben bonyolult vagy nem lehetséges, ilyen esetekben alkalmazzuk a virtuális munka elvét. A virtuális munka elvének felhasználásával anélkül adható meg az egyensúlyfeltétel, hogy ismernénk a kényszererőket.

A virtuális munka elve: Szabad erők virtuális munkája zérus.

Vegyünk egy N anyagi pontból álló mechanikai rendszert. Vezessük be a $\delta \mathbf{r}_i$ mennyiséget, mint az *i*-edik anyagi pont egy infinitezimális elmozdulása a pálya mentén, azaz amit a kényszerfeltételek lehetővé tesznek. Ezt virtuális elmozdulásnak nevezzük. Míg a valós elmozduláshoz mindig időre van szükség, addig a virtuális elmozdulás esetében úgy tekintjük, hogy az elmozdulás ideje zérus. Jelölje az \mathbf{F}_i az *i*. ható erőt. A bevezetett jelölésekkel a következőképpen fogalmazhatjuk meg matematikai formában az elvet:

$$\sum_{i} \mathbf{F}_{i} \delta \mathbf{r}_{i} = 0.$$
(66)

Szabad mozgás esetén minden δr_i tetszőleges, tehát az erővektoroknak kell zérusnak lenniük, vagyis minden *i* esetén $|\mathbf{F}_i| = 0$.

Ha viszont nem szabad mozgást vizsgálunk, akkor a $\delta \mathbf{r}_i$ -k kényszerfeltételeknek is eleget kell tenniük. Tegyük fel, hogy a kényszereket megadhatjuk mint

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots \mathbf{r}_N) = 0, \qquad (67)$$

ahol a \mathbf{r}_k a k. tömegpont helyvektora. N részecske esetén maximum 3N - 1 darab feltételt szabhatunk ki. Legyen Φ_k a k. kényszerfeltétel. Mivel a rendszernek egy $\delta \mathbf{r}_i$ elmozdulás esetén is eleget kell tennie a kényszerfeltéteknek

$$\Phi_k(\mathbf{r}_1 + \delta \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 + \delta \mathbf{r}_2, \dots \mathbf{r}_N + \delta \mathbf{r}_N) = 0$$
(68)

minden k esetén. A jelölés rövidítésére vezessük be a helyvektorok és az elmozdulások halmazára a következő jelölést { $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_N$ } = { \mathbf{r}_i }, { $\delta \mathbf{r}_1, \delta \mathbf{r}_2 \dots \delta \mathbf{r}_N$ } = { $\delta \mathbf{r}_i$ } és { $\mathbf{r}_1 + \delta \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 + \delta \mathbf{r}_1$ $\delta \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_N + \delta \mathbf{r}_N \} = {\mathbf{r}_i + \delta \mathbf{r}_i}$. Az elmozdulás infinitezimális nagyságát kihasználva fejtsük Taylor-sorba a kényszert:

$$\Phi_k\left(\{\mathbf{r}_i + \delta \mathbf{r}_i\}\right) = \Phi_k\left(\{\mathbf{r}_i\}\right) + \sum_{i=1}^N \nabla_i \Phi_k\left(\{\mathbf{r}_i\}\right) \delta \mathbf{r}_i.$$
(69)

Itt a ∇_i az *i*. koordináta szerinti gradiens. Észrevehető, hogy ekkor az első tag triviálisan 0, a második tag az ami a $\delta \mathbf{r}_i$ elmozdulásokat tartalmazza. A kényszerfeltételek tehát a következő alakot öltik

$$\sum_{i=1}^{N} \nabla_{i} \Phi_{k}\left(\{\mathbf{r}_{i}\}\right) \delta \mathbf{r}_{i} = 0.$$
(70)

A kényszerfeltételeket a Lagrange-multiplikátorral vehetjük figyelembe. Így a (66) egyenlet

$$\sum_{i=1}^{N} \left(\mathbf{F}_{\mathbf{i}} + \sum_{k}^{s \leq 3N} \lambda_{k} \nabla_{i} \Phi_{k}(\{\mathbf{r}_{i}\}) \right) \delta \mathbf{r}_{i} = 0.$$
(71)

Ekkor s darab kényszer esetén 3N-s komponense lesz független a $\delta \mathbf{r}_i$ virtuális elmozdulások közül, így csak 3N-s darab együttható lesz zérus, a további együtthatók a multiplikátor megválasztásával tüntethetőek el. Ekkor a virtuális elmozdulásokra tekinthetünk függetlenként.

$$\mathbf{F}_{\mathbf{i}} + \sum_{k=1}^{s} \lambda_k \nabla_i \Phi_k \left(\{ \mathbf{r}_i \} \right) = 0$$
(72)

A kifejezésben megjelenő erő dimenziójú mennyiséget kényszererővel azonósítjuk. Így azt az egyensúlyi feltételt kapjuk, hogy minden anyagi pontra ható *szabad és kényszererők összege zérus:*

$$\mathbf{F}_{i} + \sum_{k} \lambda_{k} \nabla_{i} \Phi_{k} \left(\{ r_{i} \} \right) = \mathbf{F}_{i} + \mathbf{F}'_{i} = 0.$$
(73)

Azt is lehet látni, hogy a kényszererő minden pontban merőleges a felületre, ugyanis a $\nabla_{\mathbf{i}} \Phi_k(\{\mathbf{r}_i\})$ vektor pontosan a kényszerek által kijelölt felület normál vektora.

A fentiek alapján, más ekvivalens formában is megadhatjuk a pontrendszer egyensúlyának feltételét:

Virtuális elmozdulás alatt a kényszererő mindig merőleges az elmozdulásra, tehát mechanikai munkája zéró. A test akkor van egyensúlyi helyzetben, ha szabad erők virtuális munkája zéró.

2.3. Hamilton-elv

A Hamilton-elv (gyakran a legkisebb hatás elve) a mozgás természetéről tett állítás, amiből egy erőhatás alatt álló test pályája meghatározható, illetve a kölcsönhatás és átalakulás egyenletei levezethetők. A befutott pálya olyan, amelynek mentén számított hatás stacionárius, azaz a pálya kis odébbtolására nem változik. Így a pályát nem az erőhatásokra bekövetkező gyorsulások alapján próbáljuk felépíteni, hanem a stacionárius hatás alapján próbáljuk kiválasztani a lehetséges pályák közül.

A legkisebb hatás elvének matematikai megfogalmazásához szükségünk lesz a variációszámítás eszközeire. Vezessük be a rendszer Lagrange-függvényét (\mathcal{L}), ez a függvény összegzi a rendszer dinamikai viselkedését. A Lagrange-függvény a rendszer dinamikai és potenciális energiájának különbségeként adódik, ez általában az idő (t), a pálya, amit a helyvektor jellemez (\mathbf{r}) és a sebesség $(\dot{\mathbf{r}})$ függvénye. Ekkor felírhatjuk a rendszer *hatásintegrálját*(S), ami a pálya funkcionálja. A hatásintegrált felhasználva kimondhatjuk a legkisebb hatás elvét.

A Hamilton-elv vagy a legkisebb hatás elve: A rendszer mechanikai állapota két rögzített időpont között úgy változik az időben, hogy a hatásintegrál szélsőérték legyen:

$$S[\mathbf{r}] = \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t) dt = \text{ext.}$$
(74)

Ezzel ekvivalens megfogalamazás, hogy a fizikailag megvalósuló pálya mentén a hatás stacionárius, a hatásintegrál szélsőérték.

A stacionaritás megállapításhoz a funkcionál variációját kell meghatároznunk. Ehhez nézzük az értékének megváltozását egy virtuális elmozdulás esetén, ez a variációban a lineáris tagokig

$$S[\mathbf{r} + \delta \mathbf{r}] = S[\mathbf{r}] + \delta S[\mathbf{r}] = S[\mathbf{r}] + \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{r}} \delta \mathbf{r} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{r}}} \delta \dot{\mathbf{r}} \right] dt , \qquad (75)$$

egy parciális integrálás után

$$\delta S[\mathbf{r}] = \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{r}}} \right] \delta \mathbf{r} \mathrm{d}t + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{r}}} \delta \mathbf{r} \Big|_{t_1}^{t_2} \,. \tag{76}$$

Ha most feltételezzük, hogy a pálya végpontjai rögzítettek, akkor a második tag eltűnik, ha nem akkor a határ tagot is figyelembe kell vennünk, melyből további feltételek származnak. A kifejezésben szereplő első tag a *varációs derivált*. A stacionaritás feltétele az, hogy a fenti kifejezés eltűnik, rögzített határok mellett ez a variációs deriválás eltűnésével egyenértékű:

$$\frac{\partial S}{\partial r} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{r}}} = 0.$$
(77)

Ez az Euler-Lagrange-egyenlet.

2.4. Lagrange-féle elsőfajú és másodfajú mozgásegyenletek

2.4.1. Lagrange-féle elsőfajú mozgásegyenletek

d'Alembert a virtuális munka és a legkisebb hatás elvével azonos elvet adott meg, ami nem csak leírja az egyenenletet de a mozgástörvényt is megadja:

$$\sum_{i}^{N} \left(\mathbf{F}_{i} - \dot{\mathbf{p}}_{i} \right) \delta \mathbf{r}_{i} = 0, \qquad (78)$$

ez szabad mozgás esetén pontosan a Newtoni mozgás egyenletet adja, hiszen tetszőleges $\delta \mathbf{r}_i$ esetén el kell tűnnie. Ha kényszerek is vannak a rendszerben, akkor ezeket Lagrangemultiplikátorokkal vehetjük figyelembe:

$$\sum_{i}^{N} \left(\mathbf{F}_{i} + \sum_{k}^{s} \lambda_{k} \nabla_{i} \Phi_{k}(\{\mathbf{r}_{j}\}) - \dot{\mathbf{p}}_{i} \right) \delta \mathbf{r}_{i} = 0.$$
(79)

A virtuális munka elvéhez hasonlóan itt is formálisan függetlenként kezelhetjük a megváltozásokat, így

$$\dot{\mathbf{p}}_i = m_i \frac{\mathrm{d}^2 \mathbf{r}_i}{\mathrm{d}t^2} \,. \tag{80}$$

Ezt visszaírva a (79) egyenletbe megkapjuk a Lagrange-féle elsőfajú egyenleteket:

$$m_i \frac{\mathrm{d}^2 \mathbf{r}_i}{\mathrm{d}t^2} = \mathbf{F}_i + \sum_k^s \lambda_k \nabla_i \Phi_k(\{\mathbf{r}_j\}).$$
(81)

2.4.2. Lagrange-féle másodfajú mozgásegyenletek

Az előzőekben a kényszereket multiplikátorok segítségével, mint független egyenletek vettük figyelembe. Választhatunk azonban olyan koordinátázást amely illeszkedik a kényszerekhez. Ilyen koordináták esetén a holonom kényszerek, azaz amelyek csak a koordinátákra és nem azok deriváltjaira adnak megkötéseket, automatikusan teljesülnek. Az állítás az, hogy minden holonom kényszer esetén léteznek ilyen koordináták. Ezeket nevezzük *általános koordinátáknak* és q_k szokás jelölni. Értelemszerűen a \dot{q}_k az általános sebességek. Fontos megjegyzés, hogy ezek nem kell hosszúság illetve sebesség dimenziójúak legyenek. A már megadott elvek érvényesek maradnak általános koordináták esetén is. Így a d'Alembert elv is megadható általános koordinátákkal, a következő módon:

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_k} \frac{\partial q_k}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial t}, \qquad (82)$$

$$\delta \mathbf{r}_i = \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_k} \delta q_k \,. \tag{83}$$

Vezessük be még az általánosított erőt:

$$Q_i = \mathbf{F}_k \frac{\partial \mathbf{r}_k}{\partial q_i} \,. \tag{84}$$

ahol $\mathbf{F}_{\mathbf{k}}$ a szabad erő. A d'Alembert elv a következőképpen fogalmazható meg általános koordinátákkal:

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\frac{\partial K}{\partial \dot{q_k}} - \frac{\partial K}{\partial q_k} + Q_k\right)\delta q_k = 0\,,\tag{85}$$

ahol K a kinetikus energia, azaz $K = \frac{1}{2} \sum_{i} m_i \dot{\mathbf{r}}_i^2$. Tételezzük most fel, hogy csak konzervatív erők hatnak a rendszerre, ekkor ez erő valamely helyfüggő pontenciál gradienseként áll elő

$$\mathbf{F}_i = -\nabla_i V \,. \tag{86}$$

Ezt használva a d'Alembert elvből származó egyenlet a következő alakra hozható:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial K}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial K}{\partial q_k} - \frac{\partial V}{\partial q_k} = 0$$
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial K}{\partial \dot{q}_k} = \frac{\partial (K-V)}{\partial q_k},$$

mivel a $\frac{\partial}{\partial \dot{q_k}} V(\mathbf{r}) = 0$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial(K-V)}{\partial \dot{q}_k} = \frac{\partial(K-V)}{\partial q_k} \tag{87}$$

Bevezetve a rendszer Lagrange-függvényé
t $\mathcal{L}=K-V$ visszakapjuk az Euler-Lagrange egyenleteket

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{q_k}} = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial q_k}\,.\tag{88}$$

Dinamikai rendszerek esetén ezeket az egyenleteket nevezzük Lagrange-féle másodfajú mozgásegyenleteknek.

2.5. A Hamilton-függvény

Az eddig használt Lagrange formalizmus másodrendű differenciálegyenleteket használt. Sok esetben, például numerikus szimulációk esetén hasznosabbak, jobban kezelhetőek az elsőrendű differenciálegyenletek. A másodrendű differenciálegyenletekről áttérhetünk elsőrendű ekre, ezekből azonban kétszer annyira lesz szükségünk. Ehhez először vezessük be a Hamilton-függvényt ami nem más mint a Lagrange-függvény Legendre-transzformáltja. Az f skalárértékű konvex függvény Legendre-transzfromáltja

$$g(y) = x(y)y - f(x(y)),$$
 (89)

ahol $y = \nabla f(x)$. Így a Hamilton-függvény:

$$H = p_k \dot{q_k} - L \,. \tag{90}$$

2.6. A kanonikus egyenletek

A Hamilton-függvény teljes differenciálja:

$$dH(\{p_k\},\{q_k\},t) = \frac{\partial H}{\partial q_k} dq_k + \frac{\partial H}{\partial p_k} dp_k + \frac{\partial H}{\partial t} dt, \qquad (91)$$

ugyanez a Hamilton-függvény definíciója alapján:

$$d(p_k \dot{q}_k - \mathcal{L}) = p_k d\dot{q}_k + \dot{q}_k dp_k - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_k} dq_k - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} d\dot{q}_k - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt = \dot{q}_k dp_k - \dot{p}_k dq_k - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} dt.$$
(92)

A (91) és (92) egyenletek alapján leolvashatjuk a kanonikus egyenleteket.

$$\dot{q_k} = \frac{\partial H}{\partial p_k} \tag{93}$$

$$\dot{p_k} = -\frac{\partial H}{\partial q_k} \tag{94}$$

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} \tag{95}$$

Konzervatív rendszer esetén a Hamilton-függvény éppen a rendszer teljes energiája:

$$H = p_k \dot{q}_k - L = m_k v_k^2 - (K - V) = K + V = E.$$
(96)

Ez tehát az jelenti, hogy ha $\frac{dH}{dt} = 0$ akkor az energia megmarad.

2.7. Kanonikus transzformációk

A *ciklikus koordináták* azok a koordináták, melyektől a Hamilton-függvény nem függ, az ezekhez tartozó konjugált impulzusok állandóak a kanonikus egyenletek miatt és azonnal megoldást szolgáltatnak a mozgásegyenletekre.

$$p_k = \text{const.} \text{ és } q_k = \dot{q}_k t + c = \frac{\partial H}{\partial p_k} t + c$$
(97)

Minél több ciklikus koordinátánk van, annál egyszerűbb megoldani az adott problémát. Ezért fontos szerepe van azoknak a transzformációknak, amelyek változatlanul hagyják a kanonikus egyenleteket, de ciklikus koordinátákra térhetünk át segítségükkel. A *kanonikus transzformációk* olyan koordináták közötti áttérések melyek teljesítik a kanonikus egyenleteket és a variációs elvnek is eleget tesznek. Ezek alapján arra a következtetésre juthatunk, hogy a funkcionál csak egy teljes időderivált erejéig definiált, azaz tetszőleg függvény teljes időderiváltjával kiegészítve nem változnak a mozgásegyenletek. Ezt a függvényt alkotó függvénynek nevezzük és segítségével kifejezhetőek a transzformációk. Az előzőeket tekintsük formálisan is, ehhez használjuk a következő jelölést: a kis betűk jelöljék az eredeti koordinátákat és impulzusokat, a nagybetűk az újakat. A új mennyiségek kifejezhetőek a régiek függvényeként:

$$Q_{k} = Q_{k}(\{q_{i}\}, \{p_{i}\}, t)$$

$$P_{k} = P_{k}(\{q_{i}\}, \{p_{i}\}, t)$$
(98)

a kanonkius egyenletek érvényesek az új koordinátátkra is

$$\dot{Q}_{k} = \frac{\partial H'}{\partial P_{k}},$$

$$\dot{P}_{k} = -\frac{\partial H'}{\partial Q_{k}},$$
(99)

itt a H' az új koordinátákra érvényes Hamilton-függvény. A kanonikus egyenletek alapvetően a variációs elvből származnak így

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \left(\sum_{k}^{3N-s} p_k \dot{q}_k - H(q_k, p_k, t) \right) dt = 0.$$
 (100)

Itt a már említett okok miatt az integrálban lévő kifejezés kiegészíthető egy tetszőleges függvény időderiváltjával. Öszegezve

$$\sum_{k}^{3N-s} p_k \dot{q}_k - H(q_k, p_k, t) = \sum_{k}^{3N-s} P_k \dot{Q}_k - H'(Q_k, P_k, t) + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} f.$$
(101)

Könnyen látható, hogy az f függvény négy típusú lehet:

- $f_1(q_k, Q_k)$
- $f_2(q_k, P_k)$
- $f_3(p_k, Q_k)$
- $f_4(p_k, P_k)$.

Az első esetben

$$\frac{\mathrm{d}f_1}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial f_1}{\partial t} + \sum_{k}^{3N-s} \left(\frac{\partial f_1}{\partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial f_1}{\partial Q_k} \dot{Q}_k \right) \,. \tag{102}$$

A régi és az új koordinátáknak függetleneknek kell lenniük, ezért az egyenlőség csak akkor áll fenn ha a q_k és Q_k együtthatói az egyenlet két oldalán megegyeznek, innen az összefüggés a koordináták között:

$$p_{k} = \frac{\partial f_{1}}{\partial q_{k}}$$

$$P_{k} = -\frac{\partial f_{1}}{\partial Q_{k}}$$

$$H' = H + \frac{\partial f_{1}}{\partial t}.$$
(103)

Látható, hogy minden új paraméter és a Hamilton-függvény is származtatható az alkotó függvényből(f). Az első egyenlet a p_k, q_k és Q_k között, a második a P_k és régi koordináták és impulzusok között teremt kapcsolatot, a harmadik az pedig az új Hamilton-függvényt határozza meg. A további esetekben is hasonlóan járhatunk el, az egyes típusú alkotó függvények között a Legendre-transzformáció teremt kapcsolatot.(Szerintem ez nem kell részletesen.) f_2 esetén:

$$p_{k} = \frac{\partial f_{2}}{\partial q_{k}}$$

$$Q_{k} = \frac{\partial f_{2}}{\partial P_{k}}$$

$$H' = H + \frac{\partial f_{2}}{\partial t}$$
(104)

 f_3 esetén:

$$q_{k} = -\frac{\partial f_{3}}{\partial p_{k}}$$

$$P_{k} = -\frac{\partial f_{3}}{\partial Q_{k}}$$

$$H' = H + \frac{\partial f_{3}}{\partial t}$$
(105)

 f_4 esetén:

$$q_{k} = -\frac{\partial f_{4}}{\partial p_{k}}$$

$$P_{k} = \frac{\partial f_{4}}{\partial Q_{k}}$$

$$H' = H + \frac{\partial f_{4}}{\partial t}$$
(106)

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.

2.8. Szimmetriák és megmaradási tételek

Noether-tétel: Minden folytonos szimmetriához tartozik egy megmaradó mennyiség. Ha a rendszernek szimmetriája a

$$\begin{array}{l}
q_i \longrightarrow q_i + \epsilon f_i(\{q_i\}, \{\dot{q}_i\}) \\
\dot{q}_i \longrightarrow \dot{q}_i + \epsilon \dot{f}_i(\{q_i\}, \{\dot{q}_i\})
\end{array}$$
(107)

transzformáció akkor ehhez tartozik egy megmaradó mennyiség:

$$\sum_{i} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_{i}} f_{i} = \text{állandó}, \qquad (108)$$

mivel a Lagrange-függvény megváltozása a transzformáció során:

$$\mathcal{L}(\{q_i + \epsilon f_i\}, \{\dot{q}_i + \epsilon \dot{f}_i\}) - \mathcal{L}(\{q_i\}, \{\dot{q}_i\}) = 0$$

 $\operatorname{\acute{e}s}$

$$\mathcal{L}(\{q_i + \epsilon f_i\}, \{\dot{q}_i + \epsilon \dot{f}_i\}) - \mathcal{L}(\{q_i\}, \{\dot{q}_i\}) = \mathcal{L}(\{q_i\}, \{\dot{q}_i\}) + \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i}\epsilon f_i + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i}\epsilon \dot{f}_i\right) - \mathcal{L}(\{q_i\}, \{\dot{q}_i\})$$

innen látszik, hogy

$$\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i}\epsilon f_i + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i}\epsilon \dot{f}_i\right) = \epsilon \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i}f_i\right) = 0,$$

amiből következik a (108) egyenlet állítása.

2.9. A tér homogenitása és az impulzus megmaradás

A tér homogenitása adott rendszer esetén nem más mint a rendszer eltolás invarianciája. Ha a rendszernek szimmetriája az eltolás akkor egy tetszőleges irányba $\delta \mathbf{r}$ -rel való eltolásra \mathcal{L} változatlan marad. A $\delta \mathbf{r}$ -el való eltolás során minden vektor a következőképpen transzformálódik:

$$\mathbf{r}'_i = \mathbf{r}_i + \delta \mathbf{r}_i \,. \tag{109}$$

A Noether-tétel alapján a megmaradó mennyiség az össz impulzus:

$$\sum_{i} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_{i}} = \sum_{i} p_{i} = \text{állandó}.$$
(110)

2.9.1. A tér izotrópiája és az impulzusmomentum megmaradás

A tér izotrópiája a rendszer elforgatás invarianciáját jelenti, vagyis hogy a forgatás szimmetriája a rendszernek. A szimmetria transzformáció eredménye hatása a vektorra:

$$\mathbf{r}'_{i} = \mathbf{r}_{i} + \delta \mathbf{r}_{i}, \text{ abol: } \delta \mathbf{r}_{i} = \delta \varphi \ \mathbf{e} \times \mathbf{r}$$

$$\mathbf{p}'_{i} = \mathbf{p}_{i} + \delta \mathbf{p}_{i} \text{ abol: } \delta \mathbf{p}_{i} = \delta \varphi \ \mathbf{e} \times \mathbf{p} .$$
 (111)

A Noether-tétel alapján az impulzusmomentum állandó:

$$\sum_{i} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_{i}} \times \mathbf{q}_{i} = \sum_{i} \mathbf{p}_{i} \times \mathbf{r}_{i} = \mathbf{N} = \text{állandó}.$$
(112)

2.9.2. Az idő homogenitása és az energia megmaradása

Ha a rendszernek szimmetriája az időbeli eltolás, $t' = t + t_0$ akkor a Noether-tétel alapján:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t} = \text{állandó} \,. \tag{113}$$

Amennyiben a Lagrange-függvény nem függ expliciten az időtől a fenti kifejezés nem csak állandó hanem zérus, így megmarad a teljes energia.

3. Egzaktul megoldható fizikai problémák (Kovács Zoltán)

Csillapított és kényszerrezgések, csatolt rezgések, lineáris lánc. Kepler-probléma, bolygómozgás. Kvantummechanikai problémák: potenciálvölgy, oszcillátor, rotátor. Hidrogénatom. Keltő és eltüntető operátorok.

3.1. Csillapított és kényszerrezgések

3.1.1. Csillapított rezgés

Vegyünk egy rúgós rendszert, amibe most bevezetünk egy sebességgel arányos csillapítást, például egy folyadékban súrlódó féket. Ekkor a rendszert a következő differenciálegyenlet írja le:

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

Ezt egy oldalra rendezzük, és bevezetünk két újabb jelölést: $\frac{k}{m} = 2\beta$ és $\frac{D}{m} = \omega_0^2$:

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

A megoldást keressük $x(t) = A(t) \sin(\omega t + \varphi)$ alakban. Ha ezt visszahelyettesítjük, akkor egy sin-es és egy cos-os tagot kapunk. Az egyenlet csak úgy lehet minden t-re 0, ha ezeknek az együtthatói külön-külön 0-t adnak. Ezek alapján két új egyenletet írhatunk fel:

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

Itt a második megoldás alapján jól látszik, hogy A(t) alakja:

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

Ezt a deriváltjaival együtt vissza tudjuk helyettesíteni az első egyenletbe:

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

Itt a zárójeles tag 0-t kell adjon, azaz felírhatjuk ω alakját:

$$\omega = \sqrt{\omega_0^2 - \beta^2}$$

Most már ismerjük x(t)-t:

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

Ez egy exponenciálisan lecsengő oszcillációt ad. A lecsengés tulajdonságait az ω_0 és β viszonya határozza meg:

- (i) Ha $\beta < \omega_0$, akkor alulcsillapított a rendszer. Ekkor a rezgés amplitúdója $\tau = \frac{1}{\beta}$ idő alatt az *e*-ad részére csökken.
- (ii) Ha $\beta > \omega_0$, akkor a rendszer túlcsillapított. Ilyenkor a kezdőfeltételektől függ, hogy csak egyszer, vagy egyszer sem metszi az y(x) = 0 egyenest.
- (iii) A $\beta = \omega_0$ esetet nem tárgyaljuk, mert ez csak matematikailag fordul elő.
3.1.2. Kényszerrezgések

Kényszerrezgéseknél bevezetünk a rendszerbe egy periodikus erőt. Ekkor a mozgásegyenlet alakja:

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

Az előző esethez hasonlóan átrendezve a következőt kapjuk:

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

Az előző pontban megkaptuk a differenciálegyenlet homogén megoldását. Most az inhomogén megoldását keressük, a következő alakban:

$$x(t) = A\sin(\omega t + \delta) = A\sin(\omega t)\cos(\delta) + A\cos(\omega t)\sin(\delta)$$

A deriválások elvégzése és visszahelyettesítés után itt is kapunk egy sin-es és egy cos-os tagot. A cos-os most is 0-t kell adjon, a sin-es viszont most pont a_0 -t kell hogy adja.

$$A[(\omega_0^2 - \omega^2)\cos(\delta) - 2\beta\omega\sin(\delta)] = a_0$$
$$A[(\omega_0^2 - \omega^2)\sin(\delta) + 2\beta\omega\cos(\delta)] = 0$$

Ezt a két egyenletet négyzetre emelve, és összeadva a következő egyenletet kapjuk A-ra:

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

Ezt visszahelyettesítve a második egyenletbe δ -ra kapunk egy összefüggést:

$$\tan(\delta) = \frac{2\beta\omega}{\omega^2 - \omega_0^2}$$

x(t)-re az általános megoldás a csillapított rezgésnél kapott homogén megoldés és az itt kapott partikuláris megoldás összegeként adódik:

$$x(t) = A_0 e^{-\beta t} \sin\left(\sqrt{\omega_0^2 - \beta^2}t + \varphi\right) + \frac{a_0}{\sqrt{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\beta^2\omega^2}} \sin(\omega t + \delta))$$

Itt a mozgás elején a csillapított és a kényszerrezgés összege jelentkezik, majd a csillapított rezgés lecsengése után a kényszert okozó rezgés frekvenciájával, de valamlyen fáziseltolással folytatja a rezgést.

Az amplitúdót deriválva meg tudjuk keresni, hogy milyen gerjesztés mellett fog maximális frekvenciával rezegni. Mivel A csak a nevezőben függ ω -tól, ezért elég a nevező szélsőértékét meghatározni:

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

A második egyenlet megoldása $\omega_r = \sqrt{\omega_0^2 - 2\beta^2}$, amit rezonancia frekvenciának nevezünk. A maximum amplitúdót úgy kapjuk, hogyha ezt visszahelyettesítjük az A egyenletébe:

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

3.2. Csatolt rezgések

Két testet egyenként a falhoz csatolunk D rugóállandójú rugókkal, közéjük pedig egy k rugóállandójú rugót helyezünk. Ekkor a két mozgásegyenlet alakja:

$$m\ddot{x_1} = -Dx_1 + k(x_2 - x_1)$$
$$m\ddot{x_2} = -Dx_2 + k(x_1 - x_2)$$

Ezt a két egyenletet össze
adjuk és kivonjuk egymásból, valamint bevezetjük a következő új változókat:
 $u_1 = \frac{x_1 + x_2}{2}$ és $u_2 = \frac{x_1 - x_2}{2}$, akkor két új egyenletet kapunk:

$$m\ddot{u_1} = -Du_1$$
$$m\ddot{u_2} = -(D+2k)u_2$$

Ezeket *m*-el leosztjuk, és ha bevezetjük a $\frac{D}{m} = \omega_1^2$ és $\frac{D+2k}{m} = \omega_2^2$, akkor két harmonikus oszcillátor mozgásegyenletet kapunk:

$$\ddot{u_1} = -\omega_1^2 u_1$$
$$\ddot{u_2} = -\omega_2^2 u_2$$

Ezeknek a megoldása egyszerűen adódik:

$$u_1 = A_1 \sin(\omega_1 t + \varphi_1)$$
$$u_2 = A_2 \sin(\omega_2 t + \varphi_2)$$

Ha visszatérünk x_1 -re és x_2 -re, akkor az egyenletek:

$$x_1 = A_1 \sin(\omega_1 t + \varphi_1) + A_2 \sin(\omega_2 t + \varphi_2)$$
$$x_2 = A_1 \sin(\omega_1 t + \varphi_1) - A_2 \sin(\omega_2 t + \varphi_2)$$

A rezgés tulajdonságai az $A_{1,2}$ és $\varphi_{1,2}$ paraméterektől fognak függni, amiket a kezdőfeltételek adnak meg. Egy érdekes esetet kapunk akkor, ha vizsgáljuk a $A_1 = A_2 = \frac{A}{2}$, $\varphi_1 = \varphi_2 = \frac{\pi}{2}$ esetet. Ekkor az x-ekre kapott egyenletek:

$$x_1(t) = A \cos\left(\frac{\omega_1 + \omega_2}{2}t\right) \cos\left(\frac{\omega_2 - \omega_1}{2}t\right)$$
$$x_2(t) = A \sin\left(\frac{\omega_1 + \omega_2}{2}t\right) \sin\left(\frac{\omega_2 - \omega_1}{2}t\right)$$

Ha emellé még feltesszük, hogy a két test között egy "gyenge" rugó van csak, azaz $\frac{k}{D}<<1,$ akkor:

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

Vezessük be $\omega_0 = \omega_1 + \omega_2$ jelölést. Ezzel felírva az x koordináták egyenletei:

$$x_1 \approx A_1(t) \cos(\omega_0 t)$$

$$x_2 \approx A_2(t)\sin(\omega_0 t)$$

Ha felírjuk az amplitúdók időgfüggését:

$$A_1(t) = A \cos\left(\frac{\Delta\omega}{2}t\right)$$
$$A_2(t) = A \sin\left(\frac{\Delta\omega}{2}t\right)$$

Ilyenkor az amplitudóknál a lebegés jelenségét tapasztaljuk, azaz az eredő rezgésük frekvenciája megegyezik a frekvenciák különbségével.

Ha a két test egymásra merőlegesen rezeg, akkor az eredmények az úgynevezett Lissajous görbék lesznek.



9. ábra. Néhány példa a Lissajous görbékre, különböző frekvencia arányoknál

3.3. Lineáris lánc

A csatolt rezgések továbbgondolásaként most N darab azonos tömegű kis golyót veszünk, amiket mind azonos rugókkal kapcsolunk össze. Hogy minden golyó mozgásegyenlete ugyanolyan legyen, a két szélső golyót is összekapcsoljuk egymással. Ezt nevezzük periodikus határfeltételnek. Ilyenkor a tetszőlegesen kiválasztott *i*-edik golyó mozgásegyenlete felírható az alábbi formában:

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

Hasonlóan a korábbiakhoz, leosztunk $m\text{-}\mathrm{el}$ és átrendezzük:

$$\ddot{u}_i = \omega_0^2 (u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i)$$

Az egész rendszer leírásához áttérünk mátrixos alakra:

$$\begin{split} \ddot{\mathbf{u}} &= \underline{\underline{D}} \mathbf{u} \\ \\ \underline{\underline{D}} &= \omega_0^2 \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \dots & 1 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 0 & \dots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

Ennek az egynletnek keressük a megoldását $u_i(t) = A_i e^{j\omega t}$ alakban. Továbbá feltételezzük, hogy $A_i = A(q)e^{jiqa}$. Az imaginárius egységet most *j*-vel jelöljük, mivel *i* az indexünk. Továbbá *q* egy reciprok rácsvektor, *a* pedig a lánc elemeinek nyugalmi távolsága. Ezeket felhasználva:

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

Ezt helyettesítjük be a differenciálegyenletünkbe, és rendezés után a következőt kapjuk:

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

Ha az exponenciálisokról áttérünk trigonometrikus alakra, az egyenletet új alakja:

$$\omega^2 = 2\omega_0^2 (1 - \cos(qa))$$

Ha ezt rendezzük ω -ra:

$$\omega = 2\omega_0 \left| \sin\left(\frac{qa}{2}\right) \right|$$

Ezt nevezzük diszperziós relációnak, ami egadja a frekvencia q függését. A reciprokrács tulajdonságai miatt q csak $-\frac{\pi}{a}$ és $\frac{\pi}{a}$ között mozoghat.



10. ábra. Egyatomos lineáris lánc diszperziós relációja

Kétatomos lineáris lánc esetén két külön diszperziós relációt kapunk a két különböző testre. Ennek az alakja:

$$\omega_{\pm}^{2} = \omega_{0}^{2} \left(1 \pm \sqrt{1 - \gamma^{2} \sin^{2} \left(\frac{qa}{2}\right)} \right)$$

Itt két külön ágat kapunk. ω_+-t nevezzük optikai módusnak, ω_--t pedig akusztikus módusnak.



11. ábra. Kétatomos lineáris lánc diszperziós relációja. A piros görbe az akusztikus, a kék görbe az optikai módus.

3.4. Kepler probléma, bolygómozgás

A Kepler probléma a kéttest probléma egy speciális esete. Vizsgáljuk a Nap körül mozgó bolygó viselkedését. A probléma egyszerűsödik, hogyha a napot állónak tekintjük, ekkor tekinthetjük azt a koordinátarendszerünk origójának. Ekkor a kéttest probléma egy egytest problémára egyszerűsödik, ahol egy μ redukált tömegű bolygó kering a Nap körül. A redukált tömeg alakja:

$$\mu = \frac{mM}{m+M}$$

Mivel a Nap tömege jóval nagyobb egy bolygóénál, ezért a redukált tömeg egyszerűsödés után a bolygó tömegével egyezik meg. Így a probléma amit vizsgálunk tovább egyszerűsödik. A bolygóra ható erő a következő formában írható fel:

$$\mathbf{F} = -\frac{GMm}{r^3}\mathbf{r}$$

Itt **r** vektor *M*-ből mutat *m*-be, *G* pedig a gravitációs konstans. Mivel a bolygó egy centrális erőtérben mozog, ezért az x, y síkban fog zajlani, és az *L* impulzusmomentum állandó lesz.

$$L = mr^2 \dot{\varphi} = N = const.$$

A mozgás során az energia is konstans lesz:

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

Az energiát átrendezve a sebességre, és bevezetve $\frac{2E}{m}=h$ új konstanst:

$$\dot{r^2} + r^2 \dot{\varphi}^2 - \frac{2GM}{r} = h$$

Az impulzus
momentum állandóságából tudjuk, hogy $r^2\dot{\varphi} = c$ is állandó lesz, amit felhasználva az egyenlet új alakja:

$$\dot{r^2} + \left(\frac{c}{r}\right)^2 - \frac{2GM}{r} = h$$

Észrevehetjük, hogy ennek az egyenletnek az alakja hasonlít az energia általános alakjához:

$$E_{kin} + \phi(\underline{r}) = E$$

Ahol E_{kin} -nek $\dot{r^2}$ felel meg, $\phi(\underline{r})$ -nek $r^2\dot{\varphi} - \frac{2GM}{r}$, *E*-nek pedig *h*. Vezessük be a $\phi_{eff}(r)$ -t, amire gondolhatunk egy effektív helyzeti energiaként.

$$\phi_{eff}(r) = \frac{c^2}{r^2} - \frac{2GM}{r}$$

Ennek a potenciálnak lesz egy r_1 alsó és egy r_2 felső határa, amik között mozoghat az r értéke. Ezeket a h nagysága határozza meg.



12. ábra. Az effektív potenciál alakja a bolygómozgásnál

Most renezzük az eredeti egyenletünket \dot{r} -re:

$$\dot{r} = \pm \sqrt{h - \left(\frac{c}{r}\right)^2 + \frac{2GM}{r}}$$

Átírom \dot{r} -t a kompozíció deriválás szabályai alapján:

$$\frac{dr}{dt} = \frac{dr}{d\varphi}\frac{d\varphi}{dt} = \frac{dr}{d\varphi}\dot{\varphi} = \frac{dr}{d\varphi}\frac{c}{r^2}$$
$$\frac{dr}{d\varphi}\frac{c}{r^2} = \pm\sqrt{h - \frac{c^2}{r^2} + \frac{2GM}{r}}$$

Itt bevezethetünk néhány helyettesítést:

$$h = (B - A^{2})$$
$$GM = Ac$$
$$B = h + \left(\frac{GM}{c}\right)^{2}$$

Ezeket felhasználva:

$$\frac{d}{d\varphi}\left(-\frac{c}{r}\right) = \pm\sqrt{B - \left(A - \frac{c}{r}\right)^2} = \frac{d}{d\varphi}\left(A - \frac{c}{r}\right)$$

Még egy új változót bevezetünk, ezúttal $\kappa(\varphi) = A - \frac{c}{r}$ -t:

$$\frac{d\kappa}{d\varphi} = \pm \sqrt{B - \kappa^2}$$

Itt látszik, hogy $\kappa\text{-ra}$ a megoldás:

$$\kappa(\varphi) = \sqrt{B}\cos\varphi = \frac{GM}{c} - \frac{G}{r}$$
$$\frac{c}{r} = \frac{GM}{c} - \sqrt{B}\cos\varphi$$

Innen már egy egyszerű r-re rendezésből adódik a pálya egyenlete polárkoordinátákban:

$$r = \frac{c}{\frac{GM}{c} - \sqrt{B}\cos\varphi} = \frac{\frac{c^2}{GM}}{1 - \sqrt{B}\frac{c}{GM}\cos\varphi}$$

Ez egy kúpszelet polárkoordinátás egyenlete, ahol az excentricitást a cos szorzója dja meg:

$$\varepsilon = \sqrt{B} \frac{c}{GM} = \frac{c}{GM} \sqrt{\left(\frac{GM}{c}\right)^2 + h}$$
$$\varepsilon = \sqrt{1 + \frac{c^2}{GM}h}$$

Itt jól látszik, hogy h-tól függően az excentricitás 1-nél kisebb vagy nagyobb lesz. A bolygómozágsra h < 0 teljesül, azaz az excentricitás kisebb lesz 1-nél, és így ellipszipályát kapunk, amelynek egyik gyújtópontjában található a nap. Ezt nevezzük Kepler I. törvényének. Vizsgáljuk meg az ellipszispályán időegység alatt súrolt terület nagyságát. Tegyük fel, hogy Δt idő alatt Δr -el változik az r, és $\Delta \varphi$ -vel változik a φ . Az elmozdulás egy kis háromszöget fog alkotni, amelynek a területe:

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

Most vegyük a $\Delta t \rightarrow 0$ határesetet.

$$\dot{T} = \frac{1}{2}r^2\dot{\varphi}$$

Mint az impulzusmomentum megmaradásából tudjuk, $r^2\dot{\varphi}$ konstans, azaz ennek az új, területsebességnek is konstansnak kell lennie. Ez azt jelenti, hogy a bolygó vezérsugara egyenlő idő alatt egyenlő területeket súrol. Ezt nevezzük Kepler II. törvényének. Hogyha a területre kapott képletet integráljuk a teljes periódusra:

$$\int_0^T \frac{1}{2} r^2 \dot{\varphi} dt = \frac{T}{2} r^2 \dot{\varphi} = ab\pi$$
$$T = \frac{2\pi ab}{r^2 \dot{\varphi}}$$

Az ellipszis a és b paramétereit kifejthetjük az excentricitás képletéből:

$$\varepsilon = \frac{\sqrt{a^2 - b^2}}{a} = \sqrt{1 + \frac{c^2}{GM}h}$$

Vezessünk be egy új változót, ami legyen
a $p=\frac{b^2}{a}.$ Ezzel már tudjuk rendezni az egyenletet:

$$p = \frac{r^4 \dot{\varphi^2}}{GM} h$$

Hogyha ezt felhasználva négyzetre emeljük a T-re kapott egyenlet mindkét oldalát:

$$T^2 = \frac{4\pi^2 a^3 p}{r^4 \dot{\varphi^2}} = \frac{4\pi^2 a^3}{GM}$$

Itt leosztunk $a^3 - el$:

$$\frac{T^2}{a^3} = \frac{4\pi^2}{GM} = const$$
$$\frac{T_1^2}{a_1^3} = \frac{T_2^2}{a_2^3}$$

Azaz a bolygók keringési idejeinek négyzetei úgy aránylanak egymáshoz, mint az ellipszispályák félnagytengelyeinek köbei. Ezt nevezzük Kepler III. törvényének.

3.5. Potenciálvölgy

Vegyünk egy véges potenciálvölgyben mozgó részecskét. A potenciál alakja:

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

Tegyük fel, hogy $-V_0 < E < 0.$ A Schrödinger egyenletet ilyenkor 3 különböző tartományra kell felírnunk:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\psi_{1,3}'' = -|E|\psi_{1,3}$$
$$\frac{-\hbar^2}{2m}\psi_2'' - V_0\psi_2 = -|E|\psi_2$$

Ezeket átrendezzük:

$$\begin{split} \psi_{1,3}^{''} &= \frac{2m|E|}{\hbar^2} \psi_{1,3} = \kappa^2 \psi_{1,3} \\ \psi_2^{''} &= \frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2} \psi_2 = -k^2 \psi_2 \end{split}$$

Ezek megoldása a 3 különböző tartományon:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x} & \text{ha } x < -a\\ C\sin(kx) + D\cos(kx) & \text{ha } x \in [-a, a]\\ Fe^{\kappa x} + Ge^{-\kappa x} & \text{ha } a < x \end{cases}$$

Ahhoz, hogy a hullámfüggvény ne szálljon el egyik irányban sem, szükséges, hogy B = F = 0 teljesüljön. A hullámfüggvényről tudjuk, hogy folytonosnak kell lennie a határokon, és ugyanez igaz a deriváltjára is.

$$\psi_1(-a) = \psi_2(-a) \quad \psi_2(a) = \psi_3(a)$$
$$\frac{d\psi_1}{dx}(-a) = \frac{d\psi_2}{dx}(-a) \quad \frac{d\psi_2}{dx}(a) = \frac{d\psi_3}{dx}(a)$$

Ennek az egyenletnek kétféle megoldása van, a szimmetrikus eset, amikor C = 0 és A = G, és az antiszimmetrikus eset, amikor D = 0 és A = -G. Először vizsgáljuk a szimmetrikus esetet, amikor az egyenletek megoldásai:

$$Ae^{-\kappa a} = D\cos(ka)$$
$$-\kappa Ae^{-\kappa a} = -kD\sin(ka)$$

Ha ezt a két egyenletet leosztjuk egymással, akkor az eredmény:

$$\kappa = k \tan(kx)$$

Az antiszimmetrikus esetre hasonló módon a következő eredményt kapjuk:

$$\kappa = -k\cot(kx)$$

Ezeket az egyenleteket analitikusan nem lehet megoldani, viszont numerikus megoldásokat találhatunk. Ehhez vezessük be a következő új változókat:

$$u = \kappa a \quad v = ka$$

Láthatjuk, hogy κ és k definíciójából adódik, hogy a $u^2 = u_0^2 - v^2$, ahol $u_0^2 = \frac{2ma^2V_0}{\hbar^2}$. A végeredményeink átírva:

$$\sqrt{u_0^2 - v^2} = \begin{cases} v \tan v & \text{(szimmetrikus eset)} \\ -v \cot v & \text{(antiszimmetrikus eset)} \end{cases}$$

Ezt ha ábrázolni akarjuk, akkor u_0 függvényében kapunk egy adott sugarú negyedkört. Ha ezután felrajzoljuk a $v \tan v$ és $-v \cot v$ görbéket.



13. ábra. Példa a grafikus megoldásra $u_0=20$ esetén

3.6. Oszcillátor

Az oszcillátor-potenciál általános alakja:

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

Erre a potenciálra felírva a Schrödinger egyenlet:

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

Vezessük $\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ és
 $k=\frac{2E}{\hbar\omega}$ dimenziótlan változókat. Az egyenlet új alakja:

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

Ennek az egyenletnek keressük az aszimptotikus megoldásait, amikor $\xi \to \infty.$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial \xi^2} \approx \xi^2 \psi$$

Ennek a differenciálegyenletnek megoldása:

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

Hogy az egyenlet normált maradjon, teljesülnie kellB=0-nak. Most keressükAalakját egy $h(\xi)$ polinom alakjában.

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

Ha ennek a deriváltjait visszahelyettesítjük a Schrödinger egyenletbe:

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

Most keressük h-t sor alakjában: $h(\xi) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \xi^j$. Hogyha ezt behelyettesítjük az egyenletbe, és rendezzük, akkor egy rekurziós relációt kapunk a_j -re:

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

A rekurziós képletből következik, hogy csak páros vagy páratlan megoldásai lesznek a függvénynek. Továbbá a hatványsornak végesnek kell lennie, hogy ne "győzze le" az exponenciálist. Ezért lesz egy j = n, amikor 2n + 1 - k = 0. Viszont k-ról tudjuk, hogy:

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

Egy adott n értéknél $h(\xi)$ pont egy H_n Hermite polinom lesz:

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

A Hermite polinomok általános alakja:

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

3.7. Rotátor

Először meg kell határoznunk a gömbi koordinátarendszerben vett Laplace-operátor elemeit:

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

Számítsuk ki $\hat{L}^2\text{-et}$ is:

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

Mivel \hat{L}^2 a forgáscsoport Casimir-operátora, ezért a csoport minden más elemével kommutál. Ez azt jelenti, hogy létezik közös sajátfüggvény-rendszerük is. Mivel \hat{L}_z -vel a legegyszerűbb számolni, ezért azzal keressük a közös sajátfüggvényeit. Először oldjuk meg az \hat{L}_z sajátértékproblémáját:

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

Bevezettük $l_z = m\hbar$ jelölést. Itt m egy egész szám, amit a φ -re vonatkozó periódusos határfeltételből kapunk meg. Ezt visszahelyettesítve \hat{L}^2 sajátérték-egyenletébe:

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

Ezután 0-ra rendezünk, leosztunk az exponenciális tagokkal és átírjuk az első két tagot:

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

Bevezetünk egy új változót: $\xi = \cos \vartheta$, aminek a deriváltja: $d\xi = -\sin \vartheta d\vartheta$. Így az egyenlet alakja:

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

Ez az egyenletnek szingularitása van $\xi = \pm 1$ -ben. Hogy ezt feloldjuk, a Θ -t keressük $\Theta = (1 - \xi^2)^{\alpha}$ alakban. Ezt behelyettesítve a fenti egyenlet első tagjába és deriválva:

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

Ha $|\xi| \approx 1$, akkor láthatóan a második tag fog dominálni. Ennek kell korrigálni az $-\frac{m^2}{1-\xi^2}\Theta = -m^2(1-\xi^2)^{\alpha-1}$ Ebből az következik, hogy $4\alpha^2 = m^2$. Így felírva az aszimptotikus megoldás:

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

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

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

Hogyha ezt deriváljuk, és visszahelyettesítjük az eredeti egyenletbe:

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

Itt az egyik összegzés 2 taggal a másik előtt ér véget, és ezek a tagok kiejthetik egymást. A maradék két tag is leegyszerűsödik, mivel a kezdeti feltételek alapján szabadon választhatjuk

meg, hogy a páros vagy páratlan c_j -ket. Ha ezek közül bármelyik 0, akkor az összes többi páros vagy páratlan tag 0 lesz. Így az egyenlet teljesül minden $c_j \xi^h$ -re, ha az együttható 0 valamilyen j = k esetén:

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

Vezessük be az l = |m| + k jelölést:

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

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

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

A többi sajátfüggvényt kommutációs relációkból kapjuk. Az \hat{L}_z és \hat{L}^2 normált sajátfüggvényeknek:

$$Y_{lm} = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} i^{l} \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right]^{\frac{1}{2}} \sin^{|m|} \vartheta P_{l}^{|m|}(\cos\vartheta) e^{im\varphi}$$

Ezekre teljesülnek a következő feltételek:

$$L_z Y_{lm} = m\hbar Y_{lm}$$
$$\hat{L}^2 Y_{lm} = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}$$

3.8. Hidrogénatom

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

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

A megoldást keressük $\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r)Y(\vartheta, \varphi)$ alakban. A szögfüggő és a sugárfüggő tagokat külön oldalra rendezve az egyenlet:

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

A szögfüggő rész belsejét átírhatjuk a következő alakra:

$$\frac{\partial^2 Y}{\partial \vartheta^2} + \cot \vartheta \frac{\partial Y}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial Y^2}{\partial \varphi^2} = -\lambda Y$$

Itt ismerjük a megoldásokat, amik a gömbfüggvények, $\lambda = l(l+1)$ sajátértékkel. Az is látszik, hogy az energiát csak a radiális rész határozza meg. Írjuk fel a radiális rész egyenletét, 0-ra hozva:

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

Dimenziótlanítsuk ezt az egyenletet $r_0 = \sqrt{-\frac{\hbar^2}{2\mu E}}, \xi = 2\frac{r}{r_0}$ és $\varepsilon = \frac{\mu e^2 r_0}{\hbar^2}$ bevezetésével:

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

Szokásos módon keressük az aszimptotikus megoldást a végtelenben. Ekkor a diferenciálegyenlet alakja:

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

A teljes megoldást keressük $R(\xi) = R_a(\xi)v(\xi)$ alakban. Ezt az eredeti egyenletbe visszahelyettesítve:

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

Keressük $v(\xi)$ -t hatványsor alakjában. A hatványsor nem kezdődhet 0-val, mert akkor divergálna az egyenlet 0-ban.

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

Ezt helyettesítsük be az egyenletbe, és írjuk ki a legalacsonyabb ξ^{s-2} és ξ^{r+s+1} együtthatókat:

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

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

Ha a második egyenletet rendezzük, akkor kapunk egy rekurziós relációt c-re:

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

Az első egyenlet adja meg az s értékét. Két lehetőség van, s = l és s = -l - 1, de ezek közül csak az első nem divergál.

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

Vezessünk be egy új p változót, amire teljesül:

$$p + l + 1 - \varepsilon = 0$$
$$\varepsilon = p + l + 1 = n$$

Ezt az ε -ra kapott kifejezést visszahelyettesítve megkapjuk az energiát:

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2 n^2}$$

A sajátfüggvényt vizsgáljuk tovább, most legyen $v(\xi) = \xi^l w(\xi)$ alakú a v:

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

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

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

Írjuk fel újra a radiális rész megoldását:

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

Most már fel tudjuk írni a teljes hullámfüggvényünket:

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

Az energia csak az n főkvantumszámtól függ. Egy adott n esetén l lehetséges értékei 0, 1, 2, ... n– 1. Az l a mellékkvantumszám. Az m mágneses kvantumszám lehetséges értékeit l határozza meg. Minden l-nél -l, -l+1, ... l-1, l értéket vehet fel, ami összesen (2l+1) értéket jelent. Ez alapján egy adott E_n sajátértéknél összesen

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

független sajátfüggvény van. Ez azt jelenti, hogy egy energiaszintek n^2 -esen degeneráltak.

3.9. Keltő és eltüntető operátorok

Írjuk fel a harmonikus oszcillátor Schrödinger egyenletét:

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

Vezessünk be két új operátort, a_+ -t és a_- -t:

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

Ezeket nevezzük keltő és eltüntető operátoroknak, vagy léptetőoperátoroknak. Észrevehetjük, hogy a szorzataik:

$$\hat{a}_{-}\hat{a}_{+} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \frac{\hbar}{2}\omega$$
$$\hat{a}_{+}\hat{a}_{-} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - \frac{\hbar}{2}\omega$$

Ebből következik, hogy a két operátor kommutátora:

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

Ezekkel az operátorokkal felírva a Schrödinger-egyenlet alakja leegyszerűsödik:

$$\left(\hat{a}_{+}\cdot\hat{a}_{-}+\frac{\hbar\omega}{2}\right)\psi(x)=E\psi(x)$$

Ha egy ψ megoldása a hullámegyenletnek Eenergiával, akkor a keltő és eltüntető operátorokkal tudunk új megoldásokat generálni.

$$\left(\hat{a}_{+}\cdot\hat{a}_{-}+\frac{\hbar\omega}{2}\right)\hat{a}_{+}\psi(x) = \left(E+\hbar\omega\right)\hat{a}_{+}\psi$$

Az eltüntető operátorral hasonlóan új megoldást kapunk, $E - \hbar \omega$ energiával. Észrevehetjük, hogy a lefele léptetést nem mehet a végtelenségig, mert az energia értéke egy idő után negatív lenne. ψ és $\hat{a}_+\psi$ megoldások mindig normálhatók lesznek, viszont $\hat{a}_-\psi$ -re ez nem mindig igaz. Viszont attól, hogy nem normálható, még lehet véges az integrálja, azaz 0. Ez alapján feltételezzük, hogy létezik egy olyan ψ_0 alapállapoti hullámfüggvény, amire $\hat{a}_-\psi_0 = 0$ teljesül.

$$\frac{1}{\sqrt{2m}} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - im\omega x \right) \psi_0(x) = 0$$
$$\frac{d}{dx} \psi_0 = -\frac{m\omega}{\hbar} x \psi_0$$
$$ln\psi_0(x) = -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 + lnC$$
$$\psi_0(x) = Ce^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} = Ce^{-\frac{\xi}{2}}$$

Ez az alapállapoti hullámfüggvény. Most vizsgáljuk meg, mekkora energia tartozik hozzá:

$$\left(\hat{a}_{+}\cdot\hat{a}_{-}+\frac{\hbar\omega}{2}\right)\psi_{0}(x) = \frac{\hbar\omega}{2}\psi_{0}(x)$$
$$E_{0} = \frac{\hbar\omega}{2}$$

Ha ezt léptetjük feljebb \hat{a}_+ -al, akkor visszakapjuk-e az összes lehetséges megoldást? Ha létezne köztes energiaérték, akkor onnan megint le tudnánk léptetni 0-ig, amit kizártunk. Ez alapján tehát megtaláltuk az összes lehetséges megoldást.

$$\psi_n(x) = A_n \cdot a_+ \cdot a_+ \cdot \dots \cdot a_+ \psi_0(x) = A_n a_+^n \psi_0(x)$$

Itt a_{+}^{n} pont a Hermite-polinomokat adja.

4. Folytonos közegek mechanikája

Rugalmas és képlékeny alakváltozások, Hooke-törvény, speciális deformációk. A deformáció jellemzése, feszültség- és deformációs tenzor. Folyadékok tulajdonságai, hidrosztatika, felületi feszültség, görbületi nyomás, felhajtóerő. Áramlások jellemzése, Bernoulli-egyenlet, tökéletes folyadék áramlása, Euler-egyenletek, viszkózus folyadék áramlása, örvények, turbulencia, Reynolds-szám.

4.1. Rugalmas és képlékeny alakváltozások, Hooke-törvény, speciális deformációk

A legegyszerűbb rugalmas deformáció a lineáris nyújtás, ami kísérleti tapasztalatok alapján:

$$\Delta l = \frac{1}{E} \frac{Fl}{A} , \qquad (114)$$

ahol F a nyújtó erő, A a vizsgált minta keresztmetszete és E az ún. Young-modulus [Pa] (átalában $E \approx 100$ GPa). Definiálható a relatív megnyúlás, mint

$$\varepsilon = \frac{\Delta l}{l} \,. \tag{115}$$

Fontos, hogy a rugalmasság csak $\varepsilon\approx 10^{-3}$ értékig teljesül, efelett maradandó alakváltozás léphet fel. Ezen felül felírható a feszültség is, mint

$$\sigma = \frac{F}{A} . \tag{116}$$

Az eddigiek alapján felírható a Hooke-törvény az alábbi alakban:

$$\sigma = E\varepsilon . \tag{117}$$

A ruglmas energiasűrűség felírható a mechanikai munka alapján:

$$W = \int_{0}^{\Delta l} dx \ F(x) = \frac{EA}{l} \int_{0}^{\Delta l} dx \ x = \frac{1}{2} \frac{EA}{l} \Delta l^2 \qquad \Longrightarrow \qquad \frac{W}{Al} = \frac{1}{2} E \left(\frac{\Delta l}{l}\right)^2 = \frac{1}{2} E \varepsilon^2 = \frac{1}{2} \varepsilon \sigma = w$$
(118)

Az alábbiakban néhány speciális deformáció jellemzése olvasható.

• Haránt összehúzódás: hosszmenti nyújtás esetén változhat a minta keresztmetszete (d) is:

$$\frac{\Delta d}{d} = -\nu \frac{\Delta l}{l} , \qquad (119)$$

ahol ν az ún. Poisson-szám (általában $\nu = 0.3 \pm 0.2$).

• Összenyomás: kezdeti $V = ld^2$ térfogatú hasáb összenyomása $V' = (l + \Delta l)(d + \Delta d)^2$ térfogatra. Ekkor a relatív térfogatváltozás (Δ -ban első rendig):

$$\frac{\Delta V}{V} = \frac{|V' - V|}{V} = \frac{(l + \Delta l)(d + \Delta d)^2 - ld^2}{ld^2} \approx 2\frac{\Delta d}{d} + \frac{\Delta l}{l} = (1 - 2\nu)\varepsilon = (1 - 2\nu)\frac{\sigma}{E}.$$
(120)

Látható, hogy ν mértéke befolyásolja a térfogatváltozás előjelét. Összenyomás felírható, mint egy külső p nyomás hatása:

$$\frac{\Delta V}{V} = -Kp = -\frac{3(1-2\nu)}{E}p \,. \tag{121}$$

Felhasználtuk az előbb eredményt a térfogatváltozásra, valamint bekerült egy 3-as faktor a nyomás feltehető izotrópsága miatt. K az ún. kompresszió modulus.

• Nyírás: ha tiszta nyírásról beszélünk, akkor V = állandó. Ha a nyírási modulus μ és a nyírás szöge γ , akkor a nyírási feszültség felírható, mint

$$\tau = \mu \gamma . \tag{122}$$

• Csavarás: speciális nyírás. Egy R sugarú és l magasságú hengert tiszta nyírás során megcsavarunk valamilyen φ szöggel. A csavaráskor kijelölt ívhossz (ha $\varphi \ll 1$) $i = r\varphi = l\gamma$, ahol γ továbbra is a nyírás szöge és r majd a sugárirányú változónk lesz. Ezek alapján a nyírási feszültség:

$$\tau = \mu \frac{r}{l} \varphi . \tag{123}$$

Ha azt akarjuk megnézni, hogy mekkora erő hatott az egyes $\Delta A = 2\pi r \Delta r$ területő és Δr vastag körgyűrűkre, akkor egyszerűen felírható, hogy $\Delta F = \tau \Delta A$. A forgatónyomaték pedig $\Delta M = r\tau \Delta A$. A teljes forgatónyomaték ezek alapján:

$$M = \int_{0}^{R} dr \ r\tau \Delta A = 2\pi\mu\varphi \frac{1}{l} \int_{0}^{R} dr \ r^{3} = \frac{\pi}{2}\mu\varphi \frac{R^{4}}{l} .$$
 (124)

Ez alapján pl. az elfordulás mértéke megkapható a forgatónyomatékból.

• Hajlítás: ha befogunk egy l hosszú és A = ab keresztmetszetű elhanyagolható tömegű rudat, majd valamilyen F erővel húzni kezdjük a szabad végét lefelé, akkor meg tudjuk határozni, hogy milyen y(x) függvény fogja leírni a meghajlott rúd alakját, ahol xa befogási ponttól mért távolság. Hajlításkor ki fog alakulni egy ún. neutrális zóna, melynek hossza nem fog változni (fölötte nyúlik, alatt összenyomódik a rúd). Ezen neutrális zóna egy $\Delta \varphi$ szög által kijelölt szakaszához tudunk rendelni egy R(x) sugarú simulókört. R(x) valójában az ívhossztól függene, de kis hajlítás esetén az közelítőleg megegyezik x-szel.

Az elmondottak alapján a neutrális zónában a deformáció zérus, azaz $\varepsilon(R) = 0$. Felírható a relatív megnyúlás a neutrális zóna felett ξ -vel:

$$\varepsilon(\xi) = \frac{\Delta\varphi(R+\xi) - \Delta\varphi R}{\Delta\varphi R} = \frac{\xi}{R} .$$
 (125)

A Hooke-törvény ebben az esetben is igaz ($\sigma = E\varepsilon(\xi)$). Nyugalomban az eredő erőnek el kell tűnnie. Ez a főggőleges erőkre teljesül (gravitációs és belső erők), ezen felül felírható, hogy

$$F = \int dA \ \sigma = 0 \ . \tag{126}$$

A vízszintes irányú erők akkor ejtik ki egymást, ha a neutrális zóna alatt és felett ható ellentétes irányú erők is éppen kiejtik egymást (emiatt lesz a neutrálás zóna éppen b/2 magasságban). Ezen felül teljesülnie kell az eredő forgatónyomaték eltűnésének is. Ebben az esetben beszélhetünk belső és külső forgatónyomatékokról. Egy kis ΔA területű anyagdarabra ható belső forgatónyomaték a következő:

$$M_{\rm b} = \sigma \xi \Delta A = \frac{E}{R} \xi^2 \Delta A . \qquad (127)$$

A teljes forgatónyomaték pedig:

$$M_{\rm b} = \frac{E}{R} \int dA \,\xi^2 = \frac{E}{R} I \,, \qquad (128)$$

ahol I az ún hajlítási nyomaték, és a rúd keresztmetszetének alakjától függ. A külső forgatónyomaték alakja egyszerű:

$$M_{\mathbf{k}} = F(l-x) \ . \tag{129}$$

Felírható a neutrális zónához írt kör egyenlete (x_0 nem fontos, lényeg, hogy nem az origó a középpont), majd *y*-ra rendezve, és azt kétszer deriválva *x* szerint a következőt írhatjuk fel:

$$y^{2} + (x - x_{0})^{2} = R^{2} \implies y = \pm \sqrt{R^{2} - (x - x_{0})^{2}} \implies y'' \approx \pm \frac{1}{R}.$$
(130)

Válasszuk a negatív előjelet, így a megoldandó differenciálegyenlet:

$$M_{\rm k} - M_{\rm b} = F(l - x) + IEy'' = 0.$$
(131)

Határfeltételek megadásával (y(0) = 0, y'(0) = 0) a megoldás kereshető polinom alakjában: $y(x) = a + bx + cx^2 + dx^3$.

4.2. Deformáció jellemzése, feszültség- és deformációs tenzor

A deformáció jellemzése általánosítható az $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ elmozdulástér bevezetésével. Ez a deformáció során bekövetkező elmozdulásokat írja le valamilyen referenciaállapothoz képest. Legegyszerűbb eset, ha merev testekről beszélünk, ugyanis ekkor $\mathbf{u} =$ állandó.

Ha két helyvektor távolság
a $\Delta {\bf r},$ akkor a deformáció utáni távolság megkapható az alábbi alakban:

$$\Delta \mathbf{s} = \underbrace{\mathbf{r} + \Delta \mathbf{r} + \mathbf{u}(\mathbf{r} + \Delta \mathbf{r})}_{\text{egyik vektor}} - \underbrace{\mathbf{r} - \mathbf{u}(\mathbf{r})}_{\text{másik vektor}} = \Delta \mathbf{r} + \mathbf{u}(\mathbf{r} + \Delta \mathbf{r}) - \mathbf{u}(\mathbf{r}) \approx \Delta \mathbf{r} + \text{grad}(\mathbf{u})\Delta \mathbf{r} ,$$
(132)

ahol grad $(\mathbf{u}) = \hat{\boldsymbol{\beta}}$ az ún disztorzió tenzor. Indexesen írással: $\partial_j u_i = \beta_{ij}$. Ez alapján

$$|\Delta \mathbf{s}| = \sqrt{(\Delta r_i + \beta_{ij} \Delta r_j)(\Delta r_i + \beta_{ik} \Delta r_k)} .$$
(133)

A relatív hosszváltozás pedig ($\hat{\boldsymbol{\beta}}$ -ban első rendig):

$$\frac{|\Delta \mathbf{s} - \Delta \mathbf{r}|}{|\Delta \mathbf{r}|} = \frac{\sqrt{|\Delta \mathbf{r}|^2 + \Delta r_i \beta_{ij} \Delta r_j + \Delta r_i \beta_{ik} \Delta r_k + \beta_{ij} \beta_{ik} \Delta r_j \Delta r_k}}{|\Delta \mathbf{r}|} - 1.$$
(134)

A gyökjel alatti utolsó tag elhagyható a közelítés miatt. Ezen felül észrevehető, hogy a ij és ik cserére szimmetrikusak a kifejezések, azaz $\hat{\beta}$ -nak csak a szimmetrikus része jelenik meg. Ez alapján bevezethető $\hat{\varepsilon}$ deformáció tenzor, mint a disztorzió szimmetrikus része:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} (\beta_{ij} + \beta_{ji}) . \tag{135}$$

Tovább alakítva a relatív megnyúlásra felírt kifezejést (bevezetve $\mathbf{n} = \Delta \mathbf{r} / |\Delta \mathbf{r}|$ egységvektort):

$$\frac{|\Delta \mathbf{s} - \Delta \mathbf{r}|}{|\Delta \mathbf{r}|} = \frac{\sqrt{|\Delta r|^2 + 2\Delta r_i \varepsilon_{ij} \Delta r_j}}{|\Delta \mathbf{r}|} - 1 = \sqrt{1 + 2n_i \varepsilon_{ij} n_j} - 1 \approx n_i \varepsilon_{ij} n_j = \mathbf{n} \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \mathbf{n} .$$
(136)

Ez alapján számítható adott irányokba a hosszváltozás. A relatív térfogatváltozás ez alapján már sejthető alakja:

$$\frac{|\Delta V' - \Delta V|}{\Delta V} \approx \operatorname{Tr}(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = \operatorname{Tr}(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}) .$$
(137)

Észrevehető, hogy a nemdiagonális elemek így nem adnak járulékot a térfogatváltozáshoz. Azok a tiszta nyírást írják le.

A folytonos közeg mozgásegyenletének felírásához meg kell különböztetnünk külső és belső erőket. Vizsgáljuk egy külső erőtérbe tett test egy V' térfogatú alrendszerét:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_{\mathbf{k}} + \mathbf{F}_{\mathbf{b}} = \int_{V'} dV \, \mathbf{f} + \mathbf{F}_{\mathbf{b}} , \qquad (138)$$

ahol **f** valamilyen külső térfogati erősűrűség. Hivatkozva a fellépő erők kis hatótávolságára az erők szempontjából elegendő az alrendszer felületét figyelembe venni. Az erő és a felület között legyen lineáris kapcsalat:

$$\Delta \mathbf{F}_{\mathrm{b}} = \hat{\boldsymbol{\sigma}} \Delta \mathbf{A} , \qquad (139)$$

ahol megjelenik az ún. feszültségtenzor. Így az erő a Gauss-tételt is kihasználva:

$$\mathbf{F} = \int_{V'} dV \, \mathbf{f} + \oint_{\partial V'} d\mathbf{A} \, \hat{\boldsymbol{\sigma}} = \int_{V'} dV \left[\mathbf{f} + \operatorname{div} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \right] \,. \tag{140}$$

Az alrendszer összimpulzus-sűrűsége:

$$\mathbf{p} = \int_{V'} dV \ \varrho \mathbf{v} = \int_{V'} dV \ \varrho \dot{\mathbf{u}} \ . \tag{141}$$

Newton-törvény alapján a mozgásegyenlet (integrálisan) :

$$\mathbf{F} = \dot{\mathbf{p}} \qquad \Longrightarrow \qquad \int_{V'} dV \left[\mathbf{f} + \operatorname{div} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \right] = \int_{V'} dV \ \varrho \ddot{\mathbf{u}} \ . \tag{142}$$

A differenciális mozgásegyenlet pedig:

$$\mathbf{f} + \operatorname{div} \hat{\boldsymbol{\sigma}} = \varrho \ddot{\mathbf{u}} \ . \tag{143}$$

Kísérleti tapasztalatok alapján a feszültségtenzor szilárd anyagban a deformációtenzorral arányos. Lineáris kapcsolatot feltételezve az általánosított Hooke-törvény írható fel:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} . \tag{144}$$

A négyindexes mennyiség 81 adatot jelent, azonban a deformáció és feszültségtenzor (forgatónyomaték vizsgálatával látható be) szimmetrikus, így kl és ij csere lehetséges. Felírtuk korábban az energiasűrűséget, és ez a kifejezés is általánosítható:

$$w = \frac{1}{2}\varepsilon\sigma \qquad \Longrightarrow \qquad w = \frac{1}{2}\varepsilon_{ij}C_{ijkl}\varepsilon_{kl} .$$
 (145)

Látható, hogy a kifejezés szimmetrikus (ij) - (kl) párcserére is. Így a 81 adatból 21 lett. Izotróp anyagra ez lehet még kevesebb is, ugyanis ott nincsenek kitüntetett irányok. A koordinátarendszertől független mennyiség a tenzor nyoma, így az energiasűrűségben is csak az fog megejelenni. Két módon szerepelhet: a nyom négyzete $(\text{Tr}(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}})^2)$ és a négyzet nyoma $(\text{Tr}(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^2))$:

$$w = \mu \varepsilon_{ij} \varepsilon_{ij} + \frac{\lambda}{2} \varepsilon_{mm}^2 \,. \tag{146}$$

A megjelenő μ és λ mennyiségek az ún. Lamé-együtthatók (most már 2 adat elegendő). A feszültségtenzor felírható, mint

$$\frac{\partial w}{\partial \varepsilon_{kl}} = 2\mu \delta_{ik} \delta_{jl} \varepsilon_{ij} + \lambda \delta_{ki} \delta_{li} \varepsilon_{mm} = 2\mu \varepsilon_{kl} + \lambda \delta_{kl} \varepsilon_{mm} .$$
(147)

4.3. Folyadékok tulajdonságai, hidrosztatika, felületi feszültség, görbületi nyomás, felhajtóerő

Folyadékok leírására nem célszerű az elmozdulástér, mivel nincsenek használható fix pontok. Áttérünk a $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ sebességtérre. Hidrosztatikában a sztatikus egyenlet írható fel, azaz

$$\operatorname{div}\hat{\boldsymbol{\sigma}} + \mathbf{f} = 0 \ . \tag{148}$$

A feszültségtenzor a folyadék (feltehetően) nyírásmentes nyomásából ered (valamint itt sincsenek kitüntetett irányok), így

$$\Delta \mathbf{F} = \hat{\boldsymbol{\sigma}} \Delta \mathbf{A} \qquad \Longrightarrow \qquad \Delta F = -p \Delta A \ . \tag{149}$$

A feszültségtenzor így $\hat{\boldsymbol{\sigma}} = -p\mathbf{I}$. A mozgásegyenletben szereplő divergencia is változik: div $\hat{\boldsymbol{\sigma}} = -\text{grad}p$. A felhajtóerő vizsgálatakor a külső erősűrűség a gravitációhoz köthető, így:

$$\mathbf{f} = \rho \mathbf{g} = -\rho \operatorname{grad} \Phi . \tag{150}$$

A mozgásegyenletből megkapható a hidrosztatikai nyomás:

$$\operatorname{grad} p + \varrho \operatorname{grad} \Phi = 0 \implies p + \varrho \Phi = \operatorname{állandó}.$$
 (151)

A felhajtó
erő felírható, mint a hmélyen folyadékba merülő
 a^2b térfogatú testre ható erők eredője:

$$F_{\rm f} = F_{\downarrow} - F_{\uparrow} = a^2 \varrho g h - a^2 \varrho g (h+b) = -V \varrho g . \qquad (152)$$

Ez a sztatikus mozgásegyenletből közvetlenül is megkapható:

$$\mathbf{F}_{\mathrm{f}} = \int_{V} dV \operatorname{div} \hat{\boldsymbol{\sigma}} = -\int_{V} dV \operatorname{grad} p = -\int_{V} dV \ \varrho \mathbf{g} = -V \varrho \mathbf{g} \,. \tag{153}$$

A felületi feszültséggel kapcsolatos kísérleti tapasztalat a következő. Egy szappanhártya a lehető legkisebb felület elérésére törekszik. Azonban, ha a hártya egy olyan kereten van, melynek van egy l hosszúságú mozgatható oldala, akkor az erre az oldalra ható erő (nem túl intuitív módon) nem a felülettel, hanem l-lel lesz arányos:

$$F = 2\alpha l . (154)$$

A 2-es faktor a hártya két oldala miatt jelenik meg, α pedig egy arányossági tényező (melyre teljesül az Eötvös-törvény, azaz $\propto 1/T$). A felület megváltoztatásához szökséges munka:

$$W = F\Delta x = 2\alpha l\Delta x = \alpha \Delta A . \tag{155}$$

A pl. egy buborék esetén fellépő görbületi nyomás a felületi feszültség segítségével értelmezhető. Ha veszünk egy szabálytalan alakú Δs_1 és Δs_2 oldalívű felületdarabot, akkor az oldalakhoz simulóköröket húzhatunk, melyek legyenek rendre R_1 és R_2 sugarúak. Az oldalakhoz tartozzon $\Delta \varphi \ll 1$ középponti szög. A felületelem egy sarkában felírhatók a felületi feszültségből adódó erők. Az erők vízszintes komponensei rendre ki fognak esni, azonban a függőlegesek adnak járulékot (és még megjelenik egy 2-es faktor, mivel egy oldalhoz két sarok tartozik). Az erők:

$$\Delta F_1 = 2\alpha \Delta s_1 \sin \frac{\Delta \varphi}{2} \approx \alpha \Delta s_1 \frac{\Delta s_2}{R_2} , \qquad (156)$$

$$\Delta F_2 = 2\alpha \Delta s_2 \sin \frac{\Delta \varphi}{2} \approx \alpha \Delta s_2 \frac{\Delta s_1}{R_1} \,. \tag{157}$$

İgy a teljes erő és a görbületi nyomás:

$$\Delta F = \alpha \underbrace{\Delta s_1 \Delta s_2}_{\Delta A} \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \qquad \Longrightarrow \qquad p = \frac{\Delta F}{\Delta A} = \alpha \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right). \tag{158}$$

4.4. Áramlások jellemzése, tökéletes folyadék áramlása, Bernoulliegyenlet

Az anyagmegaradás alapján felírható a kontinuitási egyenlet:

$$\frac{d}{dt} \int_{V} dV \ \varrho(\mathbf{r}, t) + \oint_{\partial V} d\mathbf{A} \ \varrho(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = 0 \ .$$
(159)

Az első a térfogatbeli anyagmennyiség időbeli változását, míg a második a beáramló anyagmennyiséget írja le. A V térfogat egy kis ΔA felületelemén Δt idő alatt beáramló anyag tömege:

$$\Delta m = \rho \mathbf{v} \Delta \mathbf{A} \Delta t . \tag{160}$$

A Gauss-tétel alapján a kontinuitási egyenlet átírható differenciális alakba:

$$\dot{\varrho} + \operatorname{div}(\varrho \mathbf{v}) = 0 \ . \tag{161}$$

Ha a folyadék összenyomhatatlan, aza
z $\varrho=$ állandó, akkor ${\rm div}{\bf v}=0.$ Stacionárius áramlás es
etén pedig csak helyfüggés van, ekkor

$$\operatorname{div}(\varrho \mathbf{v}) = 0. \tag{162}$$

A mozgásegyenlet felírásához figyelembe kell venni a sebesség összetettebb időfüggését a láncszabály ("anyagi derivált") alapján:

$$\dot{\mathbf{u}} = \mathbf{v} \qquad \Longrightarrow \qquad \ddot{\mathbf{u}} = (\mathbf{v}\nabla)\mathbf{v} + \partial_t \mathbf{v} .$$
 (163)

Ez alapján az egyenlet:

$$\rho((\mathbf{v}\nabla)\mathbf{v} + \partial_t \mathbf{v}) = \mathbf{f} + \operatorname{div}\hat{\boldsymbol{\sigma}} .$$
(164)

Stacionárius áramlás és ideális folyadék esetén az egyenlet egyszerűsödik:

$$\varrho(\mathbf{v}\nabla)\mathbf{v} = \mathbf{f} - \operatorname{grad} p \,. \tag{165}$$

Látható, hogy stacionárius áramlás esetén

$$\oint_{\partial V} d\mathbf{A} \ \varrho \mathbf{v} = 0 \ . \tag{166}$$

Ha a folyadék összenyomhatatlan ($\varrho=$ állandó):

$$\oint_{\partial V} d\mathbf{A} \, \mathbf{v} = 0 \;. \tag{167}$$

Ez alapján valamilyen áramlási cső elején és végén teljesül, hogy $A_1v_1=A_2v_2.$ A munkatétel alapján

$$W = \Delta E_{\rm kin} = \frac{1}{2} v_2^2 \Delta m - \frac{1}{2} v_1^2 \Delta m .$$
 (168)

Ez meg fog egyezni a nyomásból származó munkával:

$$W = p_1 A_1 v_1 \Delta t - p_2 A_2 v_2 \Delta t . \tag{169}$$

Összevonva a munkára felírt két kifejezést:

$$\frac{1}{2}v_2^2 - \frac{1}{2}v_1^2 = \frac{p_1}{\varrho} - \frac{p_2}{\varrho} \qquad \Longrightarrow \qquad \frac{1}{2}v^2 + \frac{p}{\varrho} = \text{állandó} . \tag{170}$$

Ez az ún. Bernoulli-egyenlet/törvény (figyelembe vehető a helyzeti energia, valamint felírható összenyomható folyadékra is).

4.5. Euler-egyenletek, viszkózus folyadék áramlása

Ha a feszültségtenzort viszkózus/súrlódó folyadékra írjuk fel, akkor az eddigieket ki kell egészítenünk:

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}} = -p\mathbf{I} + \hat{\boldsymbol{\sigma}}'(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^t) . \tag{171}$$

Az új tag kísérleti tapasztalatok szerint a deformációs tenzor időderiváltjától $(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^t)^1$ fog függeni. Ha a folyadék izotróp, akkor használható az izotróp közegre kapott feszültségtenzor alakja:

$$\sigma'_{ij} = 2\eta \varepsilon^t_{ij} + \eta' \delta_{ij} \varepsilon^t_{ll} \,. \tag{172}$$

Az η és η' együtthatók a viszkozitást jellemzik. A deformációs tenzor deriváltja az alábbi alakban fejezhető ki:

$$\varepsilon_{ij}^{t} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial r_j} + \frac{\partial v_j}{\partial r_i} \right) \,. \tag{173}$$

Észrevehető, hogy hai=j,akkor $\varepsilon_{ii}^t={\rm div}{\bf v}.$ A feszültségtenzor:

$$\sigma'_{ij} = \eta \left(\frac{\partial v_i}{\partial r_j} + \frac{\partial v_j}{\partial r_i} \right) + \eta' \delta_{ij} \text{div} \mathbf{v} .$$
(174)

Véve mindkét oldal divergenciáját:

$$\frac{\partial \sigma'_{ij}}{\partial r_i} = \eta \frac{\partial^2 v_j}{\partial r_i^2} + \eta \frac{\partial}{\partial r_j} \operatorname{div} \mathbf{v} + \eta' \frac{\partial}{\partial r_j} \operatorname{div} \mathbf{v} \qquad \Longrightarrow \qquad \operatorname{div} \hat{\boldsymbol{\sigma}}' = \eta \Delta \mathbf{v} + (\eta + \eta') \operatorname{graddiv} \mathbf{v} \ .$$
(175)

A kapott alakot visszahelyettesítve a mozgásegyenletbe a Navier–Stokes-egyenlethez jutunk:

$$\varrho((\mathbf{v}\nabla)\mathbf{v} + \partial_t \mathbf{v}) = -\operatorname{grad} p + \eta \Delta \mathbf{v} + (\eta + \eta')\operatorname{graddiv} \mathbf{v} + \mathbf{f}.$$
(176)

Ha a folyadék súrlódása elhagyható, akkor az Euler-egyenletet kapjuk:

$$\varrho((\mathbf{v}\nabla)\mathbf{v} + \partial_t \mathbf{v}) = -\operatorname{grad} p + \mathbf{f}.$$
(177)

4.6. Örvények, turbulencia, Reynolds-szám

Az örvényesség jellemzésére felírható az ún. örvényvektor:

$$\boldsymbol{\omega} = \frac{1}{2} \operatorname{rot} \mathbf{v} \,. \tag{178}$$

¹Azért kapott ilyen béna jelet az időderivált, mert megadta magát a LaTeX...

Ha a rendszer örvénymentes, akkor $\omega = 0$. További jellemzője lehet a rendszernek a cirkuláció (felhasználva a Stokes-tételt):

$$\Gamma = \oint_{\partial A} d\mathbf{r} \ \mathbf{v} = 2 \int_{A} d\mathbf{A} \ \boldsymbol{\omega} \ . \tag{179}$$

A cirkuláció azonosan zérus, ha az áramlást leíró görbe ponttá húzható össze. Ha valamilyen "akadály" is része a rendszernek, akkor 0-tól különböző értéket is felvehet.

A Reynolds-szám a Navier–Stokes-egyenlet két oldalán szereplő alábbi két tag arányából kapható meg:

$$\eta \Delta \mathbf{v} \sim \eta \frac{v}{l^2}$$
 és $\varrho(\mathbf{v}\nabla)\mathbf{v} \sim \varrho \frac{v^2}{l}$. (180)

Az arány:

$$R = \frac{\varrho \frac{v^2}{l}}{\eta \frac{v}{l^2}} = \frac{\varrho}{\eta} v l .$$
(181)

A Reynolds-szám nagysága alapján következtetni lehet az áramlás turbulens viselkedésére. Minél nagyobb, annál valószínűbb. Ezen felül használható még hasonlósági áramlások esetén is. Ha két elrendezés Reynolds száma közel megegyező, akkor az egyik használható a másik modellezésére.

5. Fenomenologikus termodinamika (Szokody Márk, Friss Gergely, Mocskonyi Mirkó)

Termodinamikai állapotjelzők, hőtágulás, ideális gáz, kinetikus modell. Nyílt és zárt folyamatok, Carnot-folyamat. Főtételek. Termodinamikai potenciálok, fundamentális egyenlet. Van der Waals- gázok. Fázisátalakulások jellemzői, típusai, Gibbs-féle fázisszabály, fázisdiagramok. Kémiai potenciál, fázisegyensúlyok.

A termodinamika a klasszikus fizika egy ága. Olyan rendszereket tárgyal, amelyben a hőmérsékletnek fontos szerepe van. Az anyagokat csak makroszkopikus méretskálán vizsgálja, nem veszi figyelembe, hogy atomokból épülnek fel (ez nem is meglepő, hiszen az termodinamika születésekor erről még nem tudtak). Fenomenologikus, ami annyit tesz, hogy kísérletek és megfigyelések alapján axiómákat állítunk fel és ezekre alapozva konzisztensen építjük fel az elméletet, írjuk fel egyenleteinket.

5.1. Termodinamikai állapotjelzők

Termodinamikai rendszerről akkor beszélünk, ha a rendszer tömege és mérete sokkal nagyobb, mint az őt felépítő alkotóelemek tömege és mérete – ezzel is indokolható, hogy miért nem vesszük figyelembe az atomokat. A szerkezeti részletekkel sem foglalkozunk, tulajdonképpen az anyag szerkezetének, atomjainak "átlagával" dolgozunk a termodinamikában. Egy termodinamikai rendszer alkotóelemei között fellépő kölcsönhatások rövidtávúak, így a felületi effektusok elhanyagolhatóak. Emiatt a feltevés miatt pl. bolygók mozgásának leírására nem alkalmas a termodinamika. Egy egyszerű termodinamikai rendszer az előbb felsoroltakon kívül izotrop és homogén, valimint kettő független állapotjelzővel leírható. Az állapotjelzők jellemzik a rendszer makroszkopikus tulajdonságait, pl. hőmérséklet, térfogat, stb. Egy állapotban egyértelműen meghatározottak. Nem függnek a múlttól, azaz értéküket csak az aktuális állapot határozza meg. Az állapotjelzők függvénye is állapotjelző, így valójában végtelen sok állapotjelző van. Kettő csoportba lehet sorolni őket: extenzív és intenzív állapotjelzők. Előbbiek arányosak a rendszer kiterjedésével és több rendszer kölcsönhatásakor összeadódnak. Az intenzív állapotjelzők nem arányosak a rendszer kiterjedésével és több rendszer kölcsönhatásakor kiegyenlítődnek. A rendszerek kölcsönhatása után az állapotjelzők időben állandóak, a rendszerek egyensúlyban vannak. Tegyük fel, hogy van három rendszerünk: A, B és C. Ha A és B valamint B és C egyensúlyban vannak, akkor A és C is egyensúlyban vannak. Ez a termodinamika 0. főtétele. Az állapotjelzők között az állapotegyenlet teremt kapcsolatot, mely kapcsolat anyagra jellemző, pl.: f(p, V, T) = 0. Ebben a példában lévő egyik állapotjelző kifejezhető a másik kettővel, amelyből a következő egyenlőségek vezethetők le:

$$\frac{\partial V}{\partial p}\Big|_{T} = \frac{1}{\frac{\partial p}{\partial V}\Big|_{T}}$$
$$\frac{\partial V}{\partial p}\Big|_{T} \cdot \frac{\partial p}{\partial T}\Big|_{V} \cdot \frac{\partial T}{\partial V}\Big|_{p} = -1$$

0 - - - |

Utóbbit nevezzük hármas-szabálynak.

Extenzív állapotjelző		Intenzív állapotjelző		
jel	elnevezés	jel	elnevezés	
V	térfogat	p	nyomás	
Ν	részecskeszám	μ	kémiai potenciál	
S	entrópia	Т	hőmérséklet	
M	mágnesezettség	B	mágneses indukció	
\boldsymbol{P}	polarizáció	E	elektromos térerősség	
U	belső energia			

1. táblázat. Extenzív és intenzív állapotjelzők.

5.2. Hőtágulás

Hőtágulásnak nevezzük azt a fizikai jelenséget, amikor egy anyag térfogata megváltozik a hőmérséklet változása miatt. Jellemzően az anyagok a hőmérséklet növelésével térfogatukat növelik, de léteznek kivételek (pl.: víz 0 - 4 °C között, vas másodrendű fázisátalakulása). A méretváltozás gyakran lineáris kapcsolatban van a hőmérséklettel. Először olyan anyagot vizsgáljunk, melynek hossza a többi kiterjedéshez képest nagy. Ekkor figyelhető meg a lineáris hőtágulás. A tapasztalat szerint ennek mértéke függ a hőmérsékletváltozástól és a kezdeti hossztól:

$$L = L_0 + L_0 \alpha \Delta T = L_0 (1 + \alpha \Delta T)$$

 α -t hívjuk lienáris hőtágulási együtthatónak, ami megadja, miként változik egy anyag hossza a hőmérséklet megváltoztatásával. Általános esetben a következő módon számolható:

$$\alpha = \frac{1}{L} \frac{\partial L}{\partial T} \qquad [\alpha] = \mathbf{K}^{-1}$$

Megjegyzendő, hogy ez a közelítés csak vékony szálakra és csak bizonyos tartományokban érvényes. Hasonló módon – egy nem "csak" hosszal rendelkező anyag esetében a térfogati hőtágulási együttható adja meg, miként változik a térfogat a hőmérséklet megváltoztatásával, miközben a nyomás állandó:

$$\beta = \frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial T} \bigg|_{p} \qquad [\beta] = \mathbf{K}^{-1}$$

Kis hőmérsékletváltozás esetén $\beta \approx 3\alpha$.

5.3. Egyéb együtthatók

Ha azt vizsgáljuk, hogy az anyag nyomása hogyan változik a hőmérsékletváltozás hatására – állandó térfogat mellett – akkor megkapjuk a **feszültségi együtthatót**:

$$\gamma = -\frac{1}{p} \frac{\partial p}{\partial T} \bigg|_{V} \qquad [\gamma] = \mathbf{K}^{-1}$$

Azt is vizsgálhatjuk, hogy egy anyag térfogata hogyan változik, ha megváltoztatjuk a nyomást. Erre vezettük be a **kompresszibilitást**, ami egységnyi térfogatú anyag térfogatváltozását mutatja a nyomásváltozás hatására, állandó hőmérsékleten:

$$\kappa = -\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial p} \bigg|_{T} \qquad [\kappa] = \mathrm{Pa}^{-1}$$

5.4. Gázmodellek

5.4.1. Ideális gáz kinetikus modellje

Az ideális gáz olyan hipotetikus anyag, mellyel jól közelíthetőek bizonyos rendszerek és az egyenleteink egyszerű alakban előállnak. Kis nyomáson ("ritka gáz") és nagyon magas hőmérsékleten szinte minden gáz ideálisként videlkedik. A kinetikus modell szerint a gázok megérthetőek atomi felépítésük alapján, viselkedésük törvényszerűségei leírhatóak a mozgó testeknél megismert fizikai törvényekkel. Az alkotórészek nagy száma miatt ($6 \cdot 10^{23}$) viszont mindegyik molekula nyomonkövetése lehetetlen, így átlagol, majd a makroszkopikus fizikai mennyiségeket ezekkel az átlagokkal azonosítja. A motivációt a Brown-mozgás 1827-es felfedezése adta.

Az alábbi feltételezéseket tesszük:

- A gázmolekulák apró gömbök, melyek térfogata elhanyagolható a gáz teljes térfogatához képest.
- A molekulák egymással, illetve az edény falával tökéletesen rugalmasan ütköznek.
- A gáz alkotórészei között nincs kölcsönhatás.
- Nincs kitüntetett irány, a mozgás teljesen rendezetlen.

A gázt alkotó molekulákat egy 6N dimenziós fázistér jellemez (3 hely- és 3 sebességkoordináta, valamint N részecske). A nyomást az edény falának ütköző részecskék okozzák. Tegyük fel, hogy egy kocka alakú edényben a részecskék egyenlően elosztva az edény falaira merőlegesen mozognak, azonosan v sebességgel és tömegük μ . A részecskék impulzusa $I = \mu v$. Newton II. törvénye szerint az egyik lapra ható erő:

$$F = \frac{\Delta I}{\Delta t} \tag{182}$$

A visszapattanáskor egy részecske impulzusváltozása $2\mu\nu$. Abban a térfogatban, amelyből a részecskék el tudják érni a falat Δt idő alatt, $v \cdot \Delta t \cdot A \cdot \nu$ részcske van, ahol A az oldallap felülete és ν a részecskék számsűrűsége ([ν] = m^{-3}), így

$$\Delta I = \frac{1}{6} \cdot 2\mu\nu A v^2 \Delta t \tag{183}$$

A nyomás definíciójából:

$$p = \frac{F}{A} = \frac{1}{3}\mu\nu v^2 = \frac{1}{3}\mu\frac{N}{V}v^2$$
(184)

V-vel átszorozva és bevezetve egy részecske $\epsilon_{kin} = \frac{1}{2}\mu v^2$ kinetikus energiáját:

$$pV = \frac{2}{3}N\epsilon_{kin} \tag{185}$$

Az ideális gáz állapotjelzőit a gáztörvények kötik össze.

Gay-Lussac első törvénye. Adott mennyiségű ideális gáz térfogata egyenesen arányos a hőmérséklettel.

$$\frac{V}{T} = const, \text{ ha } p = const \tag{186}$$

Az olyan állapotváltozást, melyben a nyomás állandó, izobárnak nevezzük.

Gay-Lussac második törvénye. Adott térfogatú gáz nyomása egyenesen arányos a hőmérséklettel.

$$\frac{p}{T} = const$$
, ha $V = const$ (187)

Ábrázolva adott térfogatú és anyagmennyiségű gáz nyomását – vagy adott nyomáson a térfogatot – a hőmérséklet függvényében, egyenest kapunk, mely a hőmérséklet tengelyét –273.15°C-nál metszi el. Ez az abszolút hőmérsékleti skála kezdőpontja. A fázisátalakulás miatt az egyenesről valójában letér a görbe. Az olyan állapotváltozást, melyben a térfogat állandó, izochornak nevezzük.

Boyle–Maritotte-törvény. A térfogat és a nyomás szorzata adott hőmérsékleten állandó.

$$pV = const$$
, ha $T = const$ (188)

Az olyan állapotváltozást, melyben a hőmérséklet állandó, izotermnek nevezzük. E három törvényt összevonva megkaphatjuk az ideális gázra vonatkozó egyesített gáztörvényt:

$$\frac{p_1 V_1}{T_1} = \frac{p_2 V_2}{T_2} \tag{189}$$

Az Avogadro-törvény szerint a különböző gázok megegyező térfogata azonos körülmények között azonos számú részecskét tartalmaz. Ezt figyelembe véve felírható az úgynevezett egyetemes gáztörvény:

$$pV = nRT \tag{190}$$

ahol $R=8.314\frac{\rm J}{\rm K}$ az egyetemes gázállandónpedig az anyagmennyiség mol-ban. A (190) egyenletet szokták az ideális gáz állapotegyenletének is hívni. Ha ez teljesül, egy anyagot ideális gáznak nevezünk. Az egyenletet az $n=\frac{N}{N_A}$ és a $k_B=\frac{R}{N_A}$ felhasználásával ($N_A=6\cdot 10^{23}\frac{1}{\rm mol}$ az Avogadro-állandó) a következő alakban is írhatjuk:

$$pV = Nk_BT \tag{191}$$

ahol $k=1.38\frac{\rm J}{\rm mol\cdot K}$ a Boltzmann állandó. Összevetve a (185) és (191) egyenleteket, azt kapjuk, hogy

$$\epsilon_{kin} = \frac{3}{2}k_B T \tag{192}$$

A rendszer teljes energiája az eddigiek alapján:

$$U = N\epsilon_{kin} = \frac{3}{2}Nk_BT = \frac{3}{2}pV \tag{193}$$

Ekvipartíció-tétel. Minden kvadratikus szabadsági fokra $\frac{1}{2}k_BT$ energia jut. Szobahőmérsékleten egyatomos gáz esetében a szabadsági fokok száma egy atomra f = 3 (ideális gáz eredményét megkapjuk), kétatomos molekulára f = 5 illetve több atomos molekulára és szilárd testre f = 6. A kettő vagy több atomos molekulákból álló gázok szabadsági fokainak száma valójában hőmérséklettől függ. Alacsonyabb hőmérsékleten nem jelentkezik mindegyik szabadsági fok. Növelve a hőmérsékletet megjelennek a forgási, majd a rezgési szabadásgi fokok is. Pontos magyarázat a kvantummechanika segítségével adható.

5.4.2. Van der Waals gáz

Van der Waals Nobel-díjat érdemlő ötlete az volt, hogy módosítsuk az ideális gázra vonatkozó feltevéseket a következők szerint: a részecskéknek legyen valamekkor r (kölcsönhatási) sugara, és a részeckék között legyen valami rövid hatótávú $(1/r^2$ -nél gyorsabban lecsengő), vonzó kölcsönhatás. Előbbi feltevés alapján az egy részecske által bejárható térfogat megváltozik:

$$V' = V - NV_{kh} = V - nN_A V_{kh} = V - bn$$
(194)

Ezt beírva a (190) ideális gáz állapotegyenletébe az látható, hogy a nyomás divergál V = bn esetben. Ez úgy értelmezhető, hogy ekkor a molekulák összeérnek, jobban nem nyomhatóak össze. A második feltételezésből, azaz a vonzó jellegű kölcsönhatást vizsgálva, az adódik, hogy a nyomás kisebb, mint az ideális gáz esetében. A nyomást egy $\propto V^{-2}$ taggal kell korrigálni, így a Van der Waals gáz állapotegyenlete:

$$(p + a\frac{n^2}{V^2})(V - bn) = nRT$$
(195)

A p - V diagramon (14. ábra) látható, hogy alacsony hőmérsékleten a görbének van lokális minimuma és maximuma is, míg magas hőmérsékleten egyik sem. Van tehát egy kritikus hőmérséklet (T_c), amikor a görbe deriváltja az inflexiós pontban 0. Az ehhez tartozó nyomás a kritikus nyomás (p_c), míg a térfogat a kritikus térfogat (V_c). $T > T_c$ esetben a gáz egyre jobban hasonlít az ideális gázra. $T < T_c$ esetében azt láthatjuk, hogy van egy szakasz, ahol a térfogat csökkentésével a nyomás is csökken, azaz a kompresszibilitás negavít. Tapasztalatból tudjuk, hogy ilyen nincs, a valóságban ilyenkor fázisátalakulás történik és a nyomás állandó marad a térfogat csökkenése mellett (a fázisátalakulás végéig). A kritikus értékek onnan kaphatóak meg, hogy az inflexiós pontban vett érintő meredeksége 0:

$$\frac{\partial p}{\partial V}\Big|_{T}(V_{c}, T_{c}) = 0 \qquad \frac{\partial^{2} p}{\partial V^{2}}\Big|_{T}(V_{c}, T_{c}) = 0$$
(196)

$$\Rightarrow V_c = 3bn \qquad T_c = \frac{8}{27} \frac{a}{Rb} \qquad p_c = \frac{1}{27} \frac{a}{b^2} \tag{197}$$



14. ábra. Van der Waals gáz p - V diagramja

5.5. I. főtétel

A termodinamika első főtétele természeti törvény, azaz más törvényekből nem vezethető le, a kísérleti tapasztalatokon alapul. A belső energia megváltozása, a munka és a hő között teremt kapcsolatot. Joule volt az első, aki rájött, hogy a hő is energia, miközben azt vizsgálta, hogy szénnel vagy árammal éri meg jobban fűtenie a sörfőzőket. Ha a környezettől elszigetelt rendszeren munkát végzünk (pl. összenyomással, árammal, stb.), akkor belső energiája megváltozik. A belső energia állapotjelző, így minden állapothoz egyértelműen hozzárendelhető. Ha azonos a kezdeti és végső belső energia, akkor a különböző munkák egyenértékűek: $\Delta U = W$. Azonban, ha a rendszer nincs elzárva a környezetétől, akkor a belső energia megváltozása nem egyenlő a munkával ($\Delta U \neq W$), nem mindegy hogy jutunk el egyik pontból a másikba. A két mennyiség különbsége adja a hőt: $Q = \Delta U - W$. Q > 0 ha a rendszer hőt vesz fel és Q < 0 ha az hőt ad le. A munka esetében W > 0, ha a környezet végez munkát a rendszeren és W < 0 a fordított esetben. Átrendezve hőre kapott egyenletet kapjuk a termodinamika I. főtételét, melyet differenciális alakban is írhatunk:

$$\Delta U = Q + W \tag{198}$$

$$dU = \delta Q + \Delta W \tag{199}$$

A belső energia állapotjelző, azonban Q és W nem, értékük függ az úttól, de adott ΔU esetében összegük mindig megegyezik. Eddig a munkáról általánosan beszéltünk, azonban legtöbbször térfogati munkáról lesz szó. Ennek oka, hogy kvázisztatikus folyamatokat vizsgálunk, melyek lassú változások, így minden pillanatban jól definiáltak az állapotjelzők. Ekkor a főtétel a

$$dU = \delta Q - pdV \tag{200}$$

alakot ölti.

Az első főtétel következménye, hogy nincs elsőfajú perpetuum mobile, azaz örökmozgó. Egy ilyen rendszer periodikusan működik, tehát $\Delta U = 0$, ami miatt nem végezhet munkát csak akkor, ha hőt vesz fel a környezetétől.

5.6. Nyílt folyamatok

Nyílt folyamatoknak nevezzük az olyan folyamatokat, melyek kezdő és végállapota különbözik. A vizsgált folyamatok kvázi-sztatikusak, valamint speciális eseteket tárgyalunk.

5.6.1. Izoterm-folyamat

Izoterm folyamat során állandó hőmérsékleten van a rendszer. Ekkor $\Delta U = 0$ és pV = áll. A munka egy egyszerű integrállal számolható (ideális gáznál):

$$W = -\int_{V_1}^{V_2} p dV = -nRT \cdot ln \frac{V_2}{V_1}$$
(201)

5.6.2. Izochor-folyamat

Allandó térfogaton végbemenő folyamatot hívunk izochor folyamatnak. Ekkor a (200) egyenletben szereplő dV = 0, azaz $dU = \delta Q$. Mérni az állandó térfogaton vett mólhőt tudjuk:

$$C_V = \frac{1}{n} \frac{\delta Q}{dT} = \frac{1}{n} \frac{\partial U}{\partial T} \bigg|_V$$
(202)

ahol az utolsó egyenlőséghez azt használtuk fel, hogy $U(V,T) \rightarrow dU = \frac{\partial U}{\partial V}\Big|_T dV + \frac{\partial U}{\partial T}\Big|_V dT$. Mind ideális és mind Van der Waals gáz esetében $C_V = f/2 \cdot R$,

5.6.3. Izobar-folyamat

Izobar folyamat során a nyomás állandó. U(p,T) és V(p,T) differenciájának felhasználásával levezethető a hő és az entalpia (H = U + pV) kapcsolata, valamint az állandó nyomáson vett mólhő:

$$C_p = \frac{1}{n} \frac{\delta Q}{dT} = \frac{1}{n} \frac{\partial H}{\partial T} \Big|_p \tag{203}$$

Ideális gáz esetében $C_p = f/2 + 1 = R$. C_p és C_V között a Robert-Meyer egyenlet teremt kapcsolatot.

5.6.4. Adiabatikus-folyamat

Adiabatikus folyamat során nincs hőcsere, azaz $\delta Q = 0$ (és így a mólhő is). Ekkor az első főtétel és U(p, V) differenciájának felhasználásával megkapható p(V). Ez általában bonyolult, de ideális gázra $p(V) = KV^{-\kappa}$ jön ki, ahol $\kappa = (f+2)/f$. Tehát $pV^{\kappa} =$ áll.

5.6.5. Politrop-folyamat

Politrop folyamatnak nevezzük az olyan folymatokat, melyek során a mólhő állandó. Felhasználva U(V,T) differenciáját valamint azt, hogy $\delta Q = nCdT$ kapható, hogy $pV^k =$ áll., ahol $k = \frac{C_p - C}{C_V - C}$. Ha beírjuk a többi folyamatra jellemző mólhő értékét, abból is megkaphatjuk, melyik folyamat során mi állandó, vagyis a politrop-folyamat tekinthető általánosnak, míg a többi ennek speciális esete.

5.7. Körfolyamatok

Termodinamikában körfolyamatnak számítanak az olyan folyamatok, ahol a rendszer a kezdeti állapotába tér vissza, miközben az állapotjelzők felveszik kezdeti értéküket. A folyamat közben a munkavégzés és hőcsere nullától különböző, ebből is látszik, hogy nem állapotjelzők:

$$\oint dU = \oint \delta Q + \oint \delta W = 0 \quad \text{de} \quad \oint \delta Q \neq 0 \quad \text{és} \quad \oint \delta W \neq 0 \quad (204)$$

Továbbra is kvázi-sztatikus folyamatokat vizsgálunk. A körfolyamatok során hőleadő (Q_{le}) és hőfelvevő (Q_{fel}) szakaszok is vannak, ezek alapján két csoportra bontjuk őket: hőerőgépek, melyek hőt alakítanak át mechanikai munkává, illetve hőszívattyúk, melyek mechanikai munkát alakítanak át hővé. Egy egyszerű folyamatot figyelve, ahol egy-egy szakaszban van hőfelvétel illetve -leadás a teljes hő: $Q = Q_{fel} - Q_{le} = -W$. Természetesen nem tökéletes gépek és folyamatok vannak, ezért bevezetjük a hatásfokot is:

$$\eta = -\frac{W}{Q_{fel}} = 1 - \frac{Q_{le}}{Q_{fel}} \tag{205}$$

5.7.1. Carnot-körfolyamat

A Carnot-körfolyamat izotermikus és adiabatikus folyamatkból tevődik össze. 1824-ben találta ki Sadi Carnot. Ez egy idealizált hőerőgép, ami két hőtartállyal és maximális hatásfokkal rendelkezik valamint reverzibilis folyamat. Ez a legkevesebb hőtartállyal rendelkező periodikus és reverzibilis gép, valamint a hatásfoka anyagtól független. Ha irreverziblitás lép fel (pl. súrlódás), akkor csökken a hatásfok. Bármilyen körfolyamat összeállítható kellően sok hőtartályú Carnot-folyamatként (így maximálva a hatásfokot). Az $A \to B$ és a $C \to D$ folyamatok izotermikus tágulás és összenyomás, illetve a $B \to C$ és $D \to A$ szakaszok adiabatikus tágulás és összenyomás.



15. ábra. Carnot-körfolyamat és gép.

2. táblázat. Carnot-körfolyamat szakaszai

Folyamat	$A \to B$	$B \to C$	$C \to D$	$D \to A$
ΔU	0	$-nC_V(T_h - T_c)$	0	$nC_V(T_h - T_c)$
W	$-nRT_h \cdot ln \frac{V_B}{V_A}$	$nC_V(T_h - T_c)$	$nRT_c \cdot ln \frac{V_C}{V_D}$	$-nC_V(T_h-T_c)$
Q	$nRT_h \cdot ln \frac{V_B}{V_A}$	0	$-nRT_c \cdot ln \frac{V_C}{V_D}$	0

Az adiabatikus folyamatok munkái egymást kioltják, azaz az összes munka az izoterm szakaszok alapján mondható meg:

$$W = -nR(T_h \cdot ln\frac{V_B}{V_A} - T_c \cdot ln\frac{V_C}{V_D}) = nR(T_h - T_c)ln\frac{V_B}{V_A}$$
(206)

Ahol az utolsó egyenlőséghez az adiabatákra igaz $pV^{\kappa} =$ áll. összefüggést és az ideális gáz állapotegyenletét használtuk fel. Így a hatásfok a következő (hőfelvétel az $A \rightarrow B$ szakaszon van):

$$\eta = 1 - \frac{T_c}{T_h} \tag{207}$$

A 2. táblázatból az is leolvasható, hogy a redukált hők összege 0:

$$\frac{Q_{fel}}{T_h} + \frac{Q_{le}}{T_c} = 0 \tag{208}$$

Ha visszafele járatjuk a Carnot-gépet, akkor hűtőszivattyút vagy -gépet kapunk. Mindkét esetben a hidegebb tartályból juttatnak hőt a melegebbe. A különbség az, hogy hűtőszivattyú esetében a melegebb tartályba leadott hőt hasznosítják a további hőelvonásra, míg a hűtőgépek esetében valamilyen külső W > 0 munkát vesznek igénybe (pl.áram). Emiatt a hatásfokok különböznek, ezek rendre:

$$\eta_{hsz} = \frac{T_h}{T_h - T_c} > 1 \tag{209}$$

$$\eta_{hg} = \frac{T_c}{T_h - T_c} \tag{210}$$

5.8. II. főtétel

A termodinamika első törvénye az energiaváltozással járó folyamatok irányáról nem mond semmit, azonban az a tapasztalati tény, hogy vannak folyamatok, melyek nem játszódhatnak le visszafele (irreverzibilisek). Ilyen pl. az egyensúlyi állapot felé lezajlódó folyamatok, súrlódásos mozgások, stb. A termodinamika második főtételét Clausius fogalmazt meg elsőnek: *"Hő nem mehet alacsonyabb hőmérsékletű helyről magasabb hőmérsékletű helyre anélkül, hogy a környezetben valami változás vissza ne maradjon."* Másképpen mondva nincs Clausis-féle gép. Kelvin később szintén megfogalmazta ezt a tételt: Nem konstruálható olyan periodikusan működő gép – Kelvin-gép – amely csupán egy hőtartállyal áll kapcsolatban, és munkát végez. Másképp szólva nincs másodfajú örökmozgó. Használjuk ki azt, hogy Carnot-folyamatok esetén a redukált hők összege zérus. Ez természetesen csak kvázi-sztatikus, reverzibilis folyamat
esetén igaz. Irreverzibilis folyamat esetén a redukált hők összege negatív. Mivel egy tetszőleges körfolyamat felosztható Carnot-folyamatok összességére, így a redukált hők összegét (integrálját) vizsgálhatjuk:

$$\sum_{i} \frac{\Delta Q_i}{T_i} \longrightarrow \oint \frac{\delta Q}{T} = \oint dS = 0 \qquad \text{kvázi-sztatikus esetben}$$
(211)

Az így bevezetett dS az S entrópia differenciája. Ez már egy (extenzív) állapotjelző, hiszen két pont entrópiáját nézve $S(B) = S(A) + \int \frac{\delta Q}{T}$, azaz kvázi-sztatikus, reverzibilis körfolyamat esetén az entrópia nem változik. Clausius 1861-ben az entrópia segítségével is kimondta a második főtételt:

$$dS \ge \frac{\delta Q}{T}$$
 = ha kvázi-sztatikus
> ha nem kvázi-sztatikus (212)

Ez alapján összevonhatjuk a két főtételt, így csak az összefüggésben csak az állapotjelzők szerepelnek:

$$dU \le TdS - pdV \tag{213}$$

5.9. III. főtétel

A termodinamika harmadik főtétele foglalkozik az entrópia mennyiségével $T \to 0$ esetben. Az abszolút nulla hőmérséklethez közeledve a rendszer entrópiája egy konstans értékhez tart. Homogén szilárd/folyékony anyag esetében ez a konstans érték 0. Ez az alapján is látható, hogy $T \to 0$ esetben két termodinamikai potenciál (lásd később), a Gibbs-potenciál és az entalpia, 0 K-en érintik egymást, tehát értékük és deriváltjuk is megegyezik. Abszolút 0 fokon a rendszer a legkisebb energia állapotába kerül, azonban a zavaró tényezők ezen alakíthatnak. Előbbi esetben egy mikroállapota van a rendszernek, így $S \to 0$, azonban utóbbi esetben $S_0 > 0$ -hoz tart az entrópia. A (211) egyenletben lévő $\frac{\delta Q}{T}$ akkor nem divergál $T \to 0$ esetben, ha $\delta Q = nC_V dT \to 0$ teljesül, tehát az anyag mólhője (\equiv hőkapacitása) is nullához tart. Ennek következtében nagyon kis hőváltozás is – a külvilágtól nem tudjuk tökéletesen elszigetelni a rendszert – jelentős felmelegedést okozhat. Másképp fogalmazva: nem tudunk 0 K hőmérsékletet előállítani.

5.10. Termodinamikai potenciálok, fundamentális egyenlet

A fentiekben bevezetett extenzív entrópia bevezethető statisztikus fizikai definícióval, mint

$$S = k_B \ln \Omega, \tag{214}$$

ahol k_B a Boltzmann-állandó, Ω pedig a rendszer mikroállapotainak száma, mely függhet a gáz belső energiájától, térfogatától, valamint részecskeszámától. Egy mikroállapot leírásához meg kell adnunk minden részecske koordinátáját a fázistéren, azaz N részecske esetén 6Nparaméterre van szükségünk. Ha adott U energia és V térfogat mellett számítjuk ki Ω t, úgy, hogy a részecskéket megkülönböztethetetlenekként kezeljük (osztunk N!-sal, így lesz ugyanis extenzív az S(U, V, N) függvény, egyébként ellent mondana a II. főtételnek; ld. Gibbsparadoxon). Ideális gázra elvégezve a számolást (a részecskék térbeli elhelyezésének, valamint adott U energia mellett az impulzuslosztás lehetőségeit kiszámítva minden állapotot egyenlő valószínűségűnek tételezve föl, azaz mikrokanonikus eloszlás szerint) az entrópiára kapjuk, hogy:

$$S(U, V, N) = Ck_B N + k_B N \ln\left(\frac{V}{N}\left(\frac{U}{N}\right)^{\frac{3}{2}}\right),$$
(215)

ahol C konstans. Megjegyzésképpen ez az eredmény a statisztikus fizikai fázistérbeli integrálból kiszámított Ω -val megkapott entrópiával egyezik meg.

Mivel a II. főtétel szerint $dS = \frac{1}{T}dU + \frac{p}{T}dV$, ezért $\frac{\partial S}{\partial U}\Big|_{V} = \frac{1}{T}$, valamint $\frac{\partial S}{\partial V}\Big|_{U} = \frac{p}{T}$. Ezekből az ideális gáz adott entrópiáját fölhasználva kijönnek az állapotegyenletek az állapotjelzők között. Ha az S kifejezését atrendezzük U-ra akkor az U(S, V, N) függvényből az ideális gázra vonatkozó összefüggések szintén következnek. Ellenpéldaként ha tekintjük az $U(T, V, N) = \frac{f}{2}nRT$ összefüggést ideális gázra, ez nem teremt kapcsolatot (p, V, T) között. Termodinamikai potenciálnak nevezzük tehát azokat a függvényeket, melyek teljes mértékben reprezentálják a rendszer termodinamikai állapotát.

A fentiekben a részecskeszám állandó volt, azonban ezt is belevesszük mostantól a differenciába, az együtthatója pedig a fentiekhez hasonló definíció szerint: $\frac{\partial S}{\partial N}\Big|_{U,V} = -\frac{\mu}{T}$, ahol μ a kémiai potenciál. Az U = U(S, V, N) egyenletet fundamentális egyenletnek nevezzük, vagy differenciális alakban:

$$dU = TdS - pdV + \mu dN.$$
(216)

Az elnevezés azért indokolt, mivel a termodinamikai potenciálok az U(S, V, N) függvényből Legendre-transzformációval (pontosabban a mínusz is hozzá jön még) megkaphatóak. A transzformáció egy f(X) termodinamikai potenciálhoz és a belőle származtatott u(X) = f'(X) állapotegyenlethez a következő függvényt rendeli:

$$g(U) = f(x(U)) - x(U)U,$$
(217)

ahol $x(U) = u^{-1}(X)$, ami szintén állapotegyenlet. Belátható, hogy g'(U) = -x(U) (negatív Legendre), tehát g(U) is termodinamikai potenciál. Ezt egy, vagy akár több változóban is elvégezhetjük, így különféle termodinamikai potenciálokat nyerve, ld.a 3. táblázatot. Ezek

Potenciál neve	Definíció	Természetes változói	Differencia
Belső energia	U	S, V, N	$\mathrm{d}U = T\mathrm{d}S - p\mathrm{d}V + \mu\mathrm{d}N$
Entrópia	S	U, V, N	$\mathrm{d}S = \frac{1}{t}\mathrm{d}U + \frac{p}{T}\mathrm{d}V - \frac{\mu}{T}\mathrm{d}N$
Szabadenergia	F = U - TS	T, V, N	$\mathrm{d}F = -S\mathrm{d}T - p\mathrm{d}V + \mu\mathrm{d}N$
Entalpia	H = U + pV	S, p, N	$\mathrm{d}H = T\mathrm{d}S + V\mathrm{d}p + \mu\mathrm{N}$
Gibbs-potenciál	G = U - TS + pV	T, p, N	$\mathrm{d}G = -S\mathrm{d}T + V\mathrm{d}p + \mu\mathrm{d}N$
Nagykanonikus potenciál	$\Phi = U - TS - \mu N$	T,V,μ	$\mathrm{d}\Phi = -S\mathrm{d}T - p\mathrm{d}V - N\mathrm{d}\mu$

3. táblázat. Termodinamikai potenciálok

közül mindegy, hogy melyiket használjuk, a problémához illőt természetesen a legkényelmesebb alkalmazni. A fundamentális egyenletből következik még a Gibbs-Duham-reláció. Extenzív állapotjelzőkre $U(\lambda S, \lambda V, \lambda N) = \lambda U(S, V, N)$ (tulajdonképpen ez közelítés, feltesszük, hogy az anyagon belüli kölcsönhatások rövidtávúak, valamint hogy nincsen felületi effektus), azaz elsőrendű homogén függvények, valamint intenzívekre (pl. hőmérsékletre) $T(\lambda S, \lambda V, \lambda N) =$ T(S, V, N), vagyis nulladrendű homogén függvények. $U \lambda$ szerinti deriváltjából adódik, hogy

$$\frac{\partial U}{\partial S}(\lambda S, \lambda V, \lambda N) \cdot S + \frac{\partial U}{\partial V}(\lambda S, \lambda V, \lambda N) \cdot V + \frac{\partial U}{\partial N}(\lambda S, \lambda V, \lambda N) \cdot N = TS - pV + \mu N = U(S, V, N).$$
(218)

Ez az Euler-összefüggés, melynek differenciálásából adódik a Gibbs-Duham-reláció, fölhasználva a fundamentális egyenletet:

$$SdT - Vdp + Nd\mu = 0, (219)$$

ahol látható, hogy az extenzív mennyiségek helyett az intenzív mennyiségek differenciáltak.

5.11. Fázisátalakulások jellemzői, típusai, fázisdiagramok, fázisegyensúly

Tekintsünk egy egykomponensű rendszert, amelyet meghatároz az S(U, V, N) termodinamikai potenciál, valamint a rendszer legyen stacionárius pontban. A rendszer stabilitásának feltétele ekkor az, hogy az entrópia maximális, tehát az S(U, V, N) háromváltozós függvény Hesse-mátrixa negatív definit legyen. Amennyiben ez nem teljesül, úgy instabil az állapot, ilyen instabilitások lépnek fel fázisátalakulások során. Ilyenkor a rendszer több fázisra esik szét, mégpedig akkor alakul ki az egyensúly, ha az intenzív állapotjelzők a két fázisban megegyeznek, azaz $T_1 = T_2$, $p_1 = p_2$, $\mu_1 = \mu_2$. Minden más termodinamikai jellemző más lehet.

Tekintsünk el ezek után az N függéstől, így a Hesse-mátrix negatív definitsége két feltételnek felel meg: $\frac{\partial^2 S}{\partial U^2} < 0 \Rightarrow c_V > 0$, valamint $\frac{\partial^2 S}{\partial V^2} < 0 \Rightarrow \kappa_T > 0$, ahol κ_T az állandó hőmérsékleten vett kompresszibilitás. Ha ezek nem teljesülnek, akkor hőmérséklet- illetve nyomáskülönbségek lépnek fel a rendszerben. A kompresszibilitásra vonatkozó feltétel például a VdW-gáz esetében a pozitív deriválttal rendelkező tartományon nem teljesül, így ott fázisátmenet lép fel. Mivel ott a hőmérséklet, valamint a nyomásegyensúly egy izotermán sokféleképp teljesíthető a 14. ábrán láthatóan, így a kémiai potenciál értéke dönt, az jelöli ki az egyensúlyi értékeket. Az instabil tartományt elérve két fázisra bomlik a rendszer, melyek az egyik fázis eltűnéséig egyensúlyban vannak. A tartomány két oldalán különbözőek a kompresszibilitások, a hőtágulási együtthatók, tehát a három egyensúlyban levő intenzív változón kívül az állapotjelzők.

Az VdW-gáz előbbi fázisátmenete elsőrendű fázisátalakulás. Elsőrendű fázisátalakulásnak nevezzük az olyan fázisátalakulásokat, melyekben szerepel látens-hő. Ekkor az átalakulás során a hőmérséklet állandó, miközben egy kevert fázisú állapot jön létre, melyek a fázisátmenet tartományán egymással egyensúlyban vannak. Ekkor bizonyos állapotjelzőknek ugrása van.

Fontos eset továbbá a másodrendű fázisátalakulás, ekkor nem lép fel látens hő. Ezt folytonos fázisátalakulásnak is szokás nevezni, ekkor az állapotjelzők folytonosak, nincs ugrás, csak valamely deriváltak ugranak. A VdW-gáz esetében ilyen fázisátalakulás zajlik le, ha áthaladunk a kritikus ponton. Mivel ott az izoterma meredeksége zérus, ezért a kompresszibilitás divergál, ami meg is figyelhető kísérletileg, ezt a jelenséget hívják kritikus opaleszcenciának. A 16. ábrán látható a szén-dioxid VdW-gáz fázisdiagramja, amely a p-T diagramon mutatja az egyes fázisok jelenlétét, illetve határait. Nevezetes pontok a hármaspont, valamint a kritikus pont.



16. ábra. Szén-dioxid fázisdiagramja (VdW-gáz)

Nevezetes fázisdiagram a vízé is, mely a 17. ábrán látható. Itt is megfigyelhető a hármaspont (a három fázis határán), valamint a kritikus pont. Látszik, hogy a víz-jég átmenetnél fellépő térfogatnövekedés miatt a fázisok közötti határnak a p-T diagramon van negatív meredekségű szakasza a szilárd-folyadék fázisátmenet mentén.

5.11.1. Gibbs-féle fázisszabály

Anyagi rendszerekre megállapítható, amelyekben több anyagi komponens van jelen, hogy

$$f + F = K + 2,$$
 (220)

ahol f a szabadsági fokok száma, F a rendszer különböző fázisainak száma, míg K a rendszerben jelen levő komponensek száma. Itt a szabadsági fokok száma úgy értelmezendő, mint a rendszer egymástól független intenzív állapotjelzőinek maximális száma. Ennek a szabálynak az érvényességi köre azon rendszerek, ahol a külön komponensek nem hatnak egymással kölcsön, valamint a fázisok közti egyensúlyt csak a hőmérsékletek, nyomások, valamint a koncentrációk befolyásolják. Egyensúlyban a fázisok kémiai potenciáljai megegyeznek, azaz ezek az egyenlőségek összefüggéseket jelentenek az intenzív állapotjelzők között, csökkentve ezzel a szabadsági fokok számát. Konkrétan K(F-1) ilyen összefüggés van jelen. Az összefüggés eredete az, hogy minden fázis komponenseit K-1 intenzív állapotjelző határozza



17. ábra. Víz fázisdiagramja

meg, így az összes állapot jelző száma (K-1)F + 2, ahol a kettes a külső nyomást és hőmérsékletet jelenti. Figyelembe véve az intenzív változók közti összefüggéseket a szabadsági fokok számára kapjuk, hogy f = (K-1)F + 2 - K(F-1) = K + 2 - F.

5.12. Kémiai potenciál

A kémiai potenciál a részecskeszámhoz konjugált mennyiség a fundamentális egyenletben, definíció szerint $\mu = -T \frac{\partial S}{\partial N}|_{U,V}$, így a szemléletes jelentése a részecskeszám-változás követ-keztében bekövetkező energiaváltozás. Mivel N extenzív, ezért a kémiai potenciál intenzív állapotjelző, $\mu(T, p)$.

6. Elektro- és magnetosztatika, áramkörök (Csillag Barnabás)

Coulomb- és Gauss-törvény, szuperpozíció elve. Vezetők, szigetelők, dielektromos polarizáció. Kondenzátor. Magnetosztatika, Lorentz-erő. Stacionárius áram, áramköri törvények: Kirchhoff-törvények, Ohm-törvény.

6.1. Elektrosztatika

6.1.1. Coulomb- és Gauss-törvény, szuperpozíció elve

Az elektromosan aktív anyag a töltésén keresztül képes más töltött anyagra erőhatást gyakorolni. A töltés SI mértékegysége a Coulomb (C). Ponttöltésnek nevezzük azt a töltéssel rendelkező absztrakt objektumot, amely egyetlen pontot foglal el a térben. A Coulomb-törvény azt mondja ki, hogy egy q_1 és egy q_2 nagyságú ponttöltés között ható erő a következőképpen írható fel:

$$\mathbf{F} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q_1 q_2 (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^3},\tag{221}$$

ahol \mathbf{r}_1 , \mathbf{r}_2 a részecskék helyvektorai, $\epsilon_0 = 8.854 \cdot 10^{-12} \frac{Vm}{C}$ a vákuum permittivitása.

Valójában az egyik ponttöltés nem közvetlenül a másik töltésre hat, hanem kelt egy úgynevezett elektromos vektormezőt, és ezt a vektormezőt érzékeli a másik töltés. Az első ponttöltés által keltett elektromos vektormező (tér):

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|^3}.$$
(222)

Az elektromos mezőbe helyezett q_2 ponttöltést erőhatást érez, melynek nagysága

$$\mathbf{F}_2 = q_2 \mathbf{E}(\mathbf{r}_2). \tag{223}$$

Tapasztalatok szerint egy makroszkopikus test által kifejtett erőhatás felírható úgy, mint az anyag egyes darabkái által kifejtett erők összege - ez a szuperpozíció elve. Ez az elektromos teret illetően azt jelenti, hogy több töltés együttes tere az egyes töltések által keltett tér összege egy ponttöltésrendszer esetén:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^n q_i \cdot \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|^3},\tag{224}$$

ahol a töltések nagysága és helye rendre $q_1, q_2, \dots, q_n, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n$.

Egy makroszkopikus anyag töltésének sűrűsége függhet a helytől. Vegyünk egy $\Delta V = \Delta x \Delta y \Delta z$ térfogatelemet \mathbf{r}_i pont körül, amelyben a $\frac{\mathbf{r}-\mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_i|^3}$ mennyiség csak kicsit változik. Ha ezen térfogatban $q_i = \rho(\mathbf{r}_i) \cdot \Delta V$ töltés található, akkor a teljes test által keltett elektromos tér a következő alakban írható:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^n \rho(\mathbf{r}_i) \Delta V \cdot \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|^3},\tag{225}$$

Ha a $\rho(\mathbf{r})$ függvény $\Delta V \rightarrow 0$ határesetben értelmes marad, akkor az összegzésről áttérhetünk integrálra:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \rho(\mathbf{r}') \cdot \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} d^3 r'.$$
(226)

Levezethető, hogy az elektromos térerősség zárt felületre vett integrálja egyenlő a felület által bezárt töltés nagyságával:

Ezt nevezik Gauss-törvénynek. Az összefüggés a Gauss-tételt felhasználva átalakítható:

Mivel ez minden térfogatra igaz, ezért levonható az alábbi következtetés:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho(\mathbf{r})}{\epsilon_0}.$$
(229)

Ez a Gauss-törvény differenciális alakja.

Elektrosztatikában a térerősség zárt görbére vett integrálja nulla: $\oint \mathbf{E}(\mathbf{r})dl = 0 \rightarrow \nabla \times E = \mathbf{0}$, vagyis az elektromos térerősség konzervatív. Konzervatív erőterekhez rendelhető egy potenciál a következő módon:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla(U(\mathbf{r})) \to -\int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}_1} \mathbf{E}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = U(\mathbf{r}) - U_0, \qquad (230)$$

ahol U_0 megválasztható. Konvenció alapján úgy szokás megválasztani, hogy a teljes potenciál a végtelenben nulla legyen. Az elektrosztatikus potenciált feszültségnek nevezeik, mértékegysége a Volt (V). A (229) és a (230) egyenleteket felhasználva könnyen belátható a következő összefüggés:

$$\Delta\left(U(\mathbf{r})\right) = -\frac{\rho(\mathbf{r})}{\epsilon_0},\tag{231}$$

amelyet Poisson-egyenletnek neveznek.

6.1.2. Vezetők

Az elektromos vezetők csoportjába tartoznak a fémek illetve a szupravezetők. Nagyon kicsi, elektrosztatikai szempontból elhanyagolható energiával mozognak bennük és rajtuk a töltések. Ebből kifolyólag egy vezetőn belül az elektromos térerősség jó közelítéssel nulla, így a vezető belsejében és felületén a potenciál konstans, vagyis a vezető ekvipotenciális. Az elektromos tér a vezető felületére merőleges (ha nem lenne az, akkor a felületen addig mozognának a töltések, míg az nem lesz).

6.1.3. Szigetelők, dielektrikumos polarizáció

Definíció szerint a dielektrikum elektromosan szigetelő anyagot jelent, amelyben nincsenek szabad töltéshordozók, így nagyon nagy a fajlagos ellenállása.

Tekintsük az anyag egy kis, nulla töltésű darabkáját. Ennek eleve lehet valamilyen töltéseloszlása, de ha külső elektromos teret alkalmazunk, akkor mindenképpen kialakul egy nemtriviális töltéseloszlás, vagyis az anyagdarab polarizálódik. Ezen molekuláris töltéseloszlást azonban makroszkopikus szinten vizsgálva a legtöbb anyag esetében nagyon jó közelítést jelent az a feltételezés, miszerint az anyag polarizációja közelíthető dipólmomentumok összegével.

Így egy Q nagyságú ponttöltés, és egy $\mathbf{p} = q \cdot \mathbf{a}$ nagyságú dipólus által keltett együttes potenciál:

$$\Phi(\mathbf{r}) = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_p)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_p|^3},$$
(232)

ahol **a** az anyagdarabon belül a negatív töltésből pozitív töltésbe mutató helyvektor, \mathbf{r}_0 a ponttöltés helye, \mathbf{r}_p pedig az anyagdarabka tömegközéppontjának helyvektora. Ezt általánosítva, ha nem egy ponttöltést veszünk, hanem egy $\rho(\mathbf{r})$ töltéseloszlást, továbbá egy kiterjedt, polarizálható dielektrikumot V térfogattal, $\mathbf{P} = \frac{1}{V} \sum_i \mathbf{p}_i$ polarizációsűrűséggel, akkor az ezáltal keltett potenciál a következőképpen írható fel::

$$\Phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 r' + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\mathbf{P}(\mathbf{r}') \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} d^3 r'.$$
(233)

A második tagban levő integrál tovább alakításával állítható elő az alábbi alak:

$$\Phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\mathbf{r}') - \nabla \mathbf{P}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 r', \qquad (234)$$

vagyis a polarizációból eredő járulék pontosan olyan alakú, mint a töltéssűrűség járuléka. Ebből kifolyólag definiálható egy úgynevezett polarizációs töltéssűrűség:

$$\rho_{pol} = -\nabla \mathbf{P},\tag{235}$$

így a teljes töltéssűrűség:

$$\rho_{tot} = \rho + \rho_{pol},\tag{236}$$

Így az elektromos térerősség:

$$\nabla \mathbf{E} = \frac{1}{\epsilon_0} \rho_{tot} \quad \Rightarrow \quad \nabla \left(\mathbf{E} + \frac{1}{\epsilon_0} \mathbf{P} \right) = \frac{\rho}{\epsilon_0}.$$
 (237)

Bevezetve az elektromos eltolás mezőt:

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}.\tag{238}$$

Ennek értelmezése az, hogy ha beteszünk a rendszerbe ρ töltéssűrűséget, akkor az anyag polarizációja miatt a valódi töltéssűrűség nem ρ . Az elektromos tér egyenleteibe a teljes töltéssűrűség jön be. A polarizációt figyelembe véve definiálhatjuk a **D** elektromos eltolást, amelynek forrása már az expliciten betett töltéssűrűség.

A legtöbb anyagban a $\mathbf{D}(\mathbf{E})$ összefüggés lineárisan közelíthető amennyiben nincs polarizáció elektromos tér hiányában, és nem valamilyen extrém hőmérsékleti tartományban vagyunk:

$$\mathbf{P} = \epsilon_0 \chi \mathbf{E} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{D} = \epsilon_0 (1 + \chi) \mathbf{E} = \epsilon_0 \epsilon_r \mathbf{E}, \tag{239}$$

ahol χ az elektromos szuszceptibilitás, ϵ_r a relatív permittivitás, és ϵ a permittivitás vagy dielektromos állandó - ezek anizotróp anyagban szimmetrikus mátrixok, izotróp anyagban skalárok.

Az elektromos eltolást felhasználva felírható az anyagban érvényes Gauss-törvény differenciális alakja:

$$\nabla \mathbf{D} = \rho. \tag{240}$$

6.1.4. Kondenzátor

A kondenzátor egy olyan elektrosztatikai objektum, amely két vezető testből áll, és alkalmas az elektromos töltés tárolására. A kondenzátorokra jellemző mennyiség az elektromos kapacitás, melynek jelölése C, SI-beli mértékegysége a farad (F), amely $\frac{C}{V}$. A kapacitás adott közegben egymás környezetében elhelyezkedő két elektromosan vezető testen az egységnyi feszültség hatására megjelenő elektromos töltés tárolási mennyiségét adja meg. Ha adott két fém test, az egyiken q, a másikon -q töltés helyezkedik el, akkor a kondenzátor kapacitása

$$C = \frac{q}{\Delta\Phi},\tag{241}$$

ahol $\Delta \Phi$ a két test közti feszültségkülönbség.

Tipikus példa kondenzátorra az A felületű, egymástól d távolságra elhelyezkedő lemezekből álló síkkondenzátor. Könnyen belátható, hogy ennek lemezei közt a Gauss-tétel alapján az elektromos térerősség $E = \frac{q}{\epsilon A}$ a lemezekre merőleges irányban, a feszültségkülönbség $\Delta \Phi = E \cdot d$, és így a kapacitás $C = \epsilon \frac{A}{d}$.

Egy másik gyakori példa kondenzátorra az R_1 , R_2 sugarú gömbökből álló kondenzátor. A Gauss-törvény alapján ismét könnyen felírható az elektromos térerősség, csak most gömbi koordinátákban a sugár mentén:

$$E \cdot 4\pi r^2 = \frac{q}{\epsilon} \quad \Rightarrow \quad E = \frac{1}{4\pi\epsilon} \frac{q}{r^2},$$
(242)

ebből számolható a feszültségkülönbség:

$$\Delta \Phi = \int_{R_1}^{R_2} E(r) dr = \frac{q}{4\pi\epsilon} \left(\frac{1}{R_1} - \frac{1}{R_2} \right) \implies q = 4\pi\epsilon \frac{R_1 R_2}{R_2 - R_1} \cdot \Delta \Phi \implies C = 4\pi\epsilon \frac{R_1 R_2}{R_2 - R_1}.$$
(243)

6.2. Magnetosztatika

6.2.1. Áramok

Definíció szerint az áramerősség az adott felületen egységnyi idő alatt áthaladó töltésmennyiség. Jelölése I, SI mértékegysége az Ampere $(A = \frac{C}{s})$. Ehhez szorosan kapcsolódik az áramsűrűség **J**, mely az egységnyi idő alatt egységnyi felületen átlépő töltésmennyiséget jelöli (SI-ben: $\frac{A}{m^2}$), és amelynek a felületre vett integrálja adja az áramerősséget:

$$\int_{F} \mathbf{J} \, d\mathbf{f} = I. \tag{244}$$

Az áramerősséget felhasználva definiálható egy kontinuitási egyenlet a töltéssűrűség megmaradására. Ha veszünk egy zárt F felületet, amelyben $\rho(\mathbf{r}, t)$ töltéssűrűség található, és amely V térfogatot ölel körbe, akkor

$$\int_{V} \frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} dV + \int_{F} \mathbf{J} \, d\mathbf{f} = 0, \qquad (245)$$

ha \mathbf{J} előjeles mennyiség, és kifelé mutat a térfogatból.

6.2.2. Lorentz-erő

A Lorentz-erő az elektromágneses térben mozgó töltésre ható erő. Alakja:

$$\mathbf{F} = q\mathbf{v} \times \mathbf{B} \tag{246}$$

A Lorentz-erő merőleges a részecske sebességére, így:

$$F = qvB\sin\alpha \tag{247}$$

ahol α a részecske **v** sebességvektora és a **B** mágneses indukciós tér vektora által bezárt szög.

Mivel a Lorentz-erő merőleges a részecske sebességére, így infinitezimális elmozdulására is, ezért a homogén indukciós tér nem végez munkát a töltött részecskén, vagyis a részecske sebességének nagyságát nem, csak az irányát képes megváltoztatni. A mágneses indukciós térben haladó pozitív töltéssel rendelkező részecskére ható erő irányát könnyű meghatározni a jobbkéz-szabály alapján.

Amennyiben elektromos tér (\mathbf{E}) is hat a részecskére, a fenti formulát kiegészítve vele kapjuk a Lorentz-erő általános alakját:



18. ábra. Jobbkéz-szabály

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \tag{248}$$

Ennek két komponense közül az elektromos arányos és egyirányú az elektromos térerősséggel, a mágneses arányos és merőleges a mágneses indukcióra és a töltés sebességére.

Általánosítva töltés- és áramsűrűségre:

$$\mathbf{F} = \int d^3 \mathbf{x} \,\rho(\mathbf{x}) \left(\mathbf{E}(\mathbf{x}) + \mathbf{v}(\mathbf{x}) \times \mathbf{B}(\mathbf{x}) \right) = \int d^3 \mathbf{x} \left(\rho(\mathbf{x}) \mathbf{E}(\mathbf{x}) + \mathbf{J}(\mathbf{x}) \times \mathbf{B}(\mathbf{x}) \right)$$
(249)

$$= \int d^3 \mathbf{x} \,\rho(\mathbf{x}) \mathbf{E}(\mathbf{x}) + I \int d\mathbf{s} \times \mathbf{B}(\mathbf{s}) \tag{250}$$

6.2.3. A magnetosztatika alapegyenletei

A Lorentz-erőből levezethető, hogy egy hosszú egyenes vezetőben folyó stacionárius áram által keltett mágneses indukció iránya körkörös a vezető körül, nagysága pedig:

$$|\mathbf{B}| = \frac{I\mu_0}{2\pi r},\tag{251}$$

ahol r a vezetőtől mért legkisebb távolság, I a vezetőben folyó áramerősség, és $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \frac{Vs}{Am}$ a vákuum mágneses permeabilitása.

A magnetosztatika alapegyenletei vákuumban a következők:

$$\oint_F \mathbf{B} \, d\mathbf{f} = \mathbf{0},\tag{252}$$

$$\oint \mathbf{B} \, d\mathbf{r} = \mu_0 I, \tag{253}$$

ahol F tetszőleges zárt felület. Az első egyenlet azt jelenti, hogy a mágneses indukció bármely zárt felületre vett integrálja nulla. Ez azon állítással ekvivalens, hogy nincs mágneses monopólus. A második egyenlet, amelyet Ampere-törvénynek neveznek, azt jelenti, hogy a mágneses indukció egy tetszőleges nyílt felület peremére vett körintegrálja arányos a felületen átmenő áramerősséggel - ez a hosszú egyenes vezető esetében is világosan látszik. A (252) egyenlet a Gauss-tételt felhasználva átalakítható:

$$\nabla \mathbf{B} = 0. \tag{254}$$

Az Ampere-törvény a Stokes-tételt felhasználva a következő alakra hozható:

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \cdot \mathbf{J}.\tag{255}$$

Ebből levezethető a Biot-Savart törvény, amely az elhanyagolható vastagságú áramjárta vezetők által keltett mágneses indukciót írja le:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0 I}{4\pi} \int_{\gamma} \frac{d\mathbf{r}' \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3},\tag{256}$$

ahol γ a vizsgált vezetőt leíró görbe a térben.

6.3. Stacionárius áram

6.3.1. Kirchhoff-törvények

Stacionárius áramról beszélünk, amikor egy töltésáramlás esetében tetszőleges zárt felületre igaz a következő egyenlet:

$$\oint_{F} \mathbf{J} \, d\mathbf{f} = 0 \quad \to \nabla \cdot \mathbf{J} = 0,$$
(257)

amely azt jelenti, hogy a töltésáramnak nincs forrása, és a töltések nem halmozódhatnak fel. Ebből következik Kirchhoff első törvénye, a csomóponti törvény:

$$\sum_{i} I_i = 0. \tag{258}$$

A törvény értelmében az adott csomópontba befolyó áramok összege megegyezik az onnan elfolyó áramok összegével.

Amennyiben az adott rendszerben teljesül, hogy az elektromos tér konzervatív, vagyis a térerősség zárt görbére vett integrálja nulla:

$$\oint \mathbf{E} \, d\mathbf{r} = \mathbf{0},\tag{259}$$

úgy igaz a második Kirchoff-törvény, a huroktörvény:

$$\sum_{i} U_i = 0, \tag{260}$$

amely annyit tesz, hogy bármely zárt hurokban a feszültségek előjeles összege nulla. Ezt úgy is meg lehet fogalmazni, hogy zárt hurokban a feszültségforrások összege megegyezik a feszültségesések összegével.

6.3.2. Ohm-törvény

Amennyiben nem extrém alacsony vagy extrém magas hőmérsékleti tartományban vizsgálódunk, úgy vezetőkben az elektromos tér és az áramsűrűség közti kapcsolat lineárissal közelíthető:

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E},\tag{261}$$

ahol σ a vezetőképességet jelöli, melynek mértékegysége SI-ben $\frac{1}{\Omega m}$. Ez az Ohm-törvény differenciális alakja. Az integrális alak:

$$I = \frac{\Phi}{R},\tag{262}$$

ahol R az elektromos ellenállást jelöli, SI mértékegysége az Ohm (Ω). Ha az áram egy A keresztmetszetű vezetőn keresztül folyik d hosszúságban, akkor az ellenállás és a vezetőképpesség között az alábbi reláció áll fenn:

$$R = \frac{d}{\sigma A},\tag{263}$$

továbbá ez alapján definiálható egy $\rho = \frac{1}{\sigma}$ fajlagos ellenállás.

7. Elektrodinamika (Szakállas Nikolett)

Elektromágneses indukció, Faraday-törvény. Váltakozó áram, rezgőkör, transzformátor. Maxwell-egyenletek, anyagi összefüggések, illesztési feltételek. Elektromágneses potenciálok, mértékinvariancia. Elektromágneses tér energiája és impulzusa.

7.1. Elektromágneses indukció, Faraday-törvény

7.1.1. Elektromágneses indukció

Az elektromágneses indukció olyan elektromágneses kölcsönhatás, amelynek során az időben változó mágneses tér egy vezetőkörben elektromos feszültséget indukál. A mágneses tér időbeli változását és az indukált feszültség nagyságát megadó összefüggést Faraday-féle indukciós törvénynek nevezzük.

Az elektromágneses indukció létrejöhet mozgási indukció és nyugalmi indukció révén is.

A mozgási indukció során a mágneses mező és a vezető mozog egymáshoz viszonyítva. Ha egy mágneses erőtérben elektromosan vezető anyag relatív elmozdulása történik, és az elmozdulásnak van a mágneses erővonalak irányára merőleges összetevője, akkor a vezetőben elektromos feszültség indukálódik. Az indukált feszültség nagysága: $U = B \cdot l \cdot v$ (B az indukció nagysága, l a vezető hossza és v a mozgás sebessége).

A nyugalmi indukció során sem a vezető, sem a mágneses mező nem mozog. Ebben az esetben az indukciót az időben változó fluxus (Φ) - a mágneses fluxus szemléletesen a felületet metsző mágneses indukcióvonalak számával egyezik meg - hozza létre. A nyugalmi indukció során keletkezett feszültség nagysága: $U = -\frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}t}$.

Önindukció esetén a mágneses mező változása, és az elektromos mező megjelenése ugyanott, egy tekercsben történik. Bekapcsoláskor az önindukció késlelteti a tekercsen átfolyó áram kialakulását, kikapcsoláskor megakadályozza a tekercs áramának azonnali megszűnését.

7.1.2. Faraday-törvény

Faraday figyelte meg, hogy két egymás melletti áramkör esetén az egyikben átfolyó áram megváltozása hatással van a másik áramkörre. Ebben a körben keletkező indukálódó feszültség arányos a mágneses fluxus megváltozásával:

Feszültség: U =
$$\oint \mathbf{E} d\mathbf{l}$$
 Mágneses fluxus: $\Phi = \int \mathbf{B} d\mathbf{f}$
A Stokes-tételt használva: U = $-\frac{d\Phi}{dt} \Rightarrow \int \left[\operatorname{rot} \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \right] d\mathbf{f} = 0$
Ezeket felhasználva Maxwell III. törvénye: $\operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$

Tehát *Faraday indukciós törvénye* szerint az időben változó mágneses mező feszültséget indukál. Az indukált elektromotoros feszültség nagysága a vezetőkör által körülfogott mágneses mező fluxusának időbeli deriváltjával (változási gyorsaságával) egyezik meg. A negatív előjel arra utal, hogy az indukálódó elektromos tér olyan mágneses teret kelt, mely az indukciót létrehozó változás ellen van \Rightarrow Lenz-törvény: az indukált feszültség hatására a körben áram fog folyni, mely olyan irányú, hogy mágneses hatásával gátolni igyekszik az őt létrehozó indukáló folyamatot.

(N menetszámú tekercs esetén az egész kap egy N szorzót.)

7.2. Váltakozó áram, rezgőkör, transzformátor

7.2.1. Váltakozó áram

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 és váltakozó feszültség időfüggvénye felírható a következő alakban:

$$i(t) = I \cdot \sin(\omega t + \phi)$$
 $u(t) = U \cdot \sin(\omega t + \phi)$

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.

A váltakozó áramok és feszültségek intenzitásának jellemzésére a csúcsérték mellett (különösen a villamos energetikában) az effektív értéket is használják. Szinuszos függvény effektív értéke I és U csúcsérték esetén:

$$\mathbf{I}_{eff} = \frac{1}{\sqrt{2}}\mathbf{I} \qquad \qquad \mathbf{U}_{eff} = \frac{1}{\sqrt{2}}\mathbf{U}$$

Az effektív érték annak az egyenáramnak (vagy egyenfeszültségnek) az értékével egyenlő, amely azonos idő alatt ugyanakkora munkát végez (hőt termel), mint a vizsgált váltakozó áram. 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. A szinuszos feszültséget vagy áramot mérő műszerek is az effektív értéket mutatják.

Egy periodikus időfüggvényt, így a váltakozó áram időfüggvényét is jellemezhetjük néhány jellegzetes adatával. Ezek a függvény T periódusideje, illetve az ebből számítható f = 1/T frekvencia, a függvény középértéke, effektív értéke I_{eff} és abszolút középértéke I_a (amely a függvény abszolút értékének átlaga).

7.2.2. Rezgőkör

A rezgőkör (vagy RLC-áramkör) olyan passzív elemekből (tekercsből, kondenzátorból és ellenállásból) álló elektromos áramkör, amely külső energia hatására rezgésbe, oszcillációba hozható. Megkülönböztetnek soros és párhuzamos rezgőköröket aszerint, hogy bennük a tekercs és a kondenzátor soros illetve párhuzamos kapcsolásban áll-e. Általánosan a következő differenciál egyenletet írhatjuk fel:

$$L\frac{d^2}{dt^2}Q + R\frac{d}{dt}Q + \frac{Q}{C} = \epsilon$$

A jobb oldalon az áramforrások elektromotoros erejei állnak összevonva. Ez a differenciál egyenlet teljesen analóg a mechanikai kényszerrezgésekkel, ezért a megoldása is hasonló eredményekre vezet: exponenciális lecsengésre, vagy periodikus, de csillapított rezgésre. Az eszköz oszcilláló működése azon alapul, hogy a benne található tekercs és kondenzátor egymással periodikusan energiát cserél, míg az áramkörbe helyezett ellenállás csillapító jellegű, disszipatív hatást fejt ki.

Működése:

A két áramköri elem - a tekercs és a kondenzátor - képes energiát felvenni egy külső energiaforrásból, amit később le is tudnak adni. A kondenzátornak elektromos energiára van szüksége az elektromos erőtér (elektromos mező) felépítéséhez (a kondenzátor feltöltéséhez), ami aztán a kisülésnél felszabadul. Ugyanígy a tekercsnek is szüksége van elektromos energiára a mágneses erőtér (mágneses mező) felépítéséhez. A mágneses erőtér megszűnése közben ez az energia szabadul fel.

Ha a két összekapcsolt áramköri elem bármelyikével energiát közlünk, akkor az energia elkezd "ingázni" a két áramköri elem között. A tekercs és a kondenzátor felváltva működik energiaforrásként és energiatárolóként. Az "ingázás" eredménye az elektromos rezgés, amely egy oszcilloszkópon vizuálisan is megfigyelhető.

A feltöltött kondenzátor a tekercsen keresztül kisül. Ezalatt a tekercsben az áram mágneses erőteret hoz létre, amíg az elektromos tér a kondenzátorban meg nem szűnik. A kisülési folyamat végén az összes energia a mágneses erőtér formájában a tekercsben van. Ahogy megszűnik az áram, a mágneses erőtér elkezd összeomlani, és az ez által indukált feszültség áramot indít, ami által a kondenzátor ellentétes irányban ismét feltöltődik.

Általános RLC-körben azt érdemes tudni, hogy az áramkörbe tett kapacitás (C) hatására az áramerősség sietni, induktivitás (L) hatására késni fog a feszültséghez képest. A rezgőkör saját, egyben rezonanciafrekvenciája az a frekvencia, amikor a rezgőkör magára hagyva is képes rezegni. A legnagyobb amplitudó a rezonanciafrekvencián f_{rez} áll elő. A rezgőkör saját- ω és rezonanciafrekvenciája és fázistolása δ :

$$\omega = \frac{1}{\sqrt{LC}}$$
 $f_{rez} = \frac{1}{2\pi\sqrt{LC}}$ $\delta = \operatorname{arctg}\frac{\omega L - \frac{1}{\omega C}}{R}$

7.2.3. Transzformátor

Legegyszerűbb esetben két tekercs (primer és szekunder) helyezkedik el a közös, többnyire zárt vasmagon. 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 energia
átvitel. A működés alapfeltétele a primer oldali váltakozó áramú táplálás, mi
vel csak a változó mágneses fluxus képes a szekunder oldalon feszültséget kelteni. A transzformátor a kölcsönös indukció elvén alapul. Ide
ális esetben a primer és a szekunder tekercsek között a csatolás tökéletes, azaz mindkét tekercs ugyanazt a mágneses flux
ust (Φ) veszi körül. Ekkor a Faraday-féle indukciós törvény alapján (Maxwell II. egyenlete) a
z N_2 menetszámú szekunder tekercsben indukált feszültség:

$$U_2 = -N_2 \frac{d}{dt} \Phi$$

A primer tekercs is ugyanezt a fluxust veszi körül, tehát feszültsége ugyanilyen alakú, csak a 2-es index helyett 1-est kell írni.

Az ideális transzformátor áramáttételét Maxwell **IV.** 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. 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:

$$N_1I_1-N_2I_2=0 \Rightarrow \frac{I_1}{I_2}=\frac{N_2}{N_1}$$

Ez a transzformátor áttételi egyenlete.

Tehát ezek alapján a transzformátor az áramerősséget és/vagy a feszültséget $\frac{N_2}{N_1}$ -szeresére növeli vagy ennek reciprokszorosával csökkenti.

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.

7.3. Maxwell-egyenletek, anyagi összefüggések, illesztési feltételek

7.3.1. Maxwell-egyenletek

Mit fejeznek ki az egyenletek? Az I. egyenlet leírja, hogy az elektromos tér forrásai a töltések. A II. egy kísérleti tény, miszerint nincs mágneses monopólus. A III. azt állítja, hogy az időben változó mágneses tér elektromos teret kelt. Végül a IV. kimondja, hogy az áram és az időben változó elektromos tér mágneses teret kelt. Az integrális alakokból a Gauss- és Stokes-tételek segítségével megkaphatjuk a lokális vagy differenciális alakokat.

A Maxwell-egyenletek anyag jelenléte nélkül, vákuumban:

Differenciális alak
I. div
$$\mathbf{E} = \frac{1}{\epsilon_0} \rho$$

II. div $\mathbf{B} = 0$
III. rot $\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$
IV. rot $\mathbf{B} = \mu_0 \left(\mathbf{J} + \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right)$
Integrális alak

$$\iint \mathbf{E} d\mathbf{f} = \frac{1}{\epsilon_0} \iiint \rho dV$$

$$\iint \mathbf{B} d\mathbf{f} = 0$$

$$\oint \mathbf{E} d\mathbf{l} = -\frac{d}{dt} \iint \mathbf{B} d\mathbf{f}$$

$$\oint \mathbf{B} d\mathbf{l} = \mu_0 \left(\iint \mathbf{J} d\mathbf{f} + \epsilon_0 \frac{d}{dt} \iint \mathbf{E} d\mathbf{f} \right)$$

7.3.2. Anyagi összefüggések

Az anyag jelenlétében érvényes egyenletek **I.** és **IV.** tagjában megjelentek a **D** elektromos eltolás vektor, a **H** mágneses térerősségvektor. Ezekre éppen azért van szükség, hogy az anyagi válaszokat (anyag polarizációja, mágnesezettségből adódó mikroszkopikus áramok és polarizációs töltések árama) figyelembe tudjuk venni, és az egyenletek jobb oldalán továbbra is csak a vákuumra felírt mennyiségek maradjanak.

A Maxwell-egyenletek anyag jelenlétében:

Differenciális alak
I. div
$$\mathbf{D} = \rho$$

II. div $\mathbf{B} = 0$
III. rot $\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$
IV. rot $\mathbf{H} = \left(\mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}\right)$
Integrális alak
Integr

Az elektromos eltolás vektor $\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}$, ahol \mathbf{P} a polarizációs vektor. A \mathbf{D} forrása a külső töltéssűrűség. Anyagon belül nemcsak az általunk "betett" töltések (külső forrás) sűrűségét kell figyelembe vennünk, hanem az anyagét is, tehát a polarizált töltéseket is.

A **H** mágneses térerősségvektor $\mathbf{H} = \frac{1}{\mu_0}\mathbf{B} - \mathbf{M}$ a mágneses tér és az elektromos áram kapcsolatát leíró segéd vektormennyiség. Itt **M** mágnesezettség vektor az anyagban keletkező lokális mágneses dipólsűrűséget jelöli.

7.3.3. Illesztési feltételek

- $E_{2n} E_{1n} = \frac{\sigma_{tot}}{\epsilon_0}$ két homogén anyag határán az eltérő polarizációk miatt felületi töltséssűrűség alakul ki. Azaz az elektromos erőtér felületre merőleges, normális komponense a két térrészt elválasztó rétegen át ugrik, az ugrás nagysága a σ felületi töltéssűrűséggel arányos.
- $E_{2t} = E_{1t}$ a felület irányában (azzal párhuzamosan) nincs polarizációs töltéssűrűség. Vagyis a felülettel párhuzamos, tangenciális komponens folytonosan megy át két közeg határfelületén.
- $B_{n2} = B_{n1}$ a mágneses indukció vektor normális komponense a két térrész között folytonosan megy át (ha nincs külső adódó felületi áramsűrűség).
- $\mathbf{n} \times (\mathbf{B}_2 \mathbf{B}_1) = \frac{\mathbf{j}}{\epsilon_0 c^2}$ 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{j} , és az 1-es térrészből a 2-es térrészbe mutató normálvektortól \mathbf{n} függ.

7.4. Elektromágneses potenciálok, mértékinvariancia

7.4.1. Elektromágneses potenciálok

Vektoranalitikai megfontolásból bevezethetünk egy vektorpotenciál nevű mennyiséget (mivel $\operatorname{div} \mathbf{B} = 0$): $\mathbf{B} = \operatorname{rot} \mathbf{A}$. Ezt beírva III.-ba:

$$0 = \operatorname{rot}\mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \operatorname{rot}\left[\mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}\right]$$

Egy nulla rotációjú vektormező átírható gradiens alakban:

$$\mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -\text{grad}\Phi \Rightarrow \mathbf{E} = -\text{grad}\Phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

Itt **A** a vektor- és Φ a skalárpotenciál. Ezt behelyettesítve a **I.**-be és **IV.**-be :

$$-\operatorname{div}\mathbf{E} = \Delta\Phi + \frac{\partial}{\partial t}\nabla\mathbf{A} = -\frac{\rho}{\epsilon_0}$$
(264)

$$-\operatorname{rot}\mathbf{B} = \Delta \mathbf{A} - \nabla \cdot (\nabla \mathbf{A}) = -\mu_0 \mathbf{J} + \frac{1}{c^2} \nabla \frac{\partial}{\partial t} \Phi + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{A}$$
(265)

7.4.2. Mértékinvariancia

A és Φ nem fizikai mennyiségek, csak E és B. Ebből kifolyólag, ha olyan vektor- illetve skalárpotenciált választunk, amely ugyanazt az E-t és B-t adja, akkor az ekvivalens az eredeti választással (mértékinvariancia, mértékszabadság).

Időfüggő esetben A-t továbbra is egy gradienssel lehet megváltoztatni, mert annak rotációja nulla, viszont az elektromos tér bonyolultabb kifejezése miatt a skalárpotenciál másképp változtatandó:

$$\mathbf{A'} = \mathbf{A} + \operatorname{grad} \Psi \qquad \qquad \Phi' = \Phi - \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

A és Φ terek mértékorbitok: ekvivalencia osztályokat jelölnek az összes téren belül. A mértékpályákhoz azonos fizika tartozik. Megtehetjük tehát azt, hogy a mérték-orbitokból mindig kiválasztunk egy reprezentáns elméletet. 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.

7.4.3. Mértékek

Ugyan ez már nem a tétel része, viszont hasznos a vizsgára a tanult mértékeket is átnézni, melyek alább ismertetésre kerülnek.

• Coulomb-mérték

Megköveteljük, hogy div $\mathbf{A} = 0$. Ez teljesíthető, hiszen ha ez eredetileg nem nulla, akkor megkövetelve a div $\mathbf{A}' = 0$ -t azt kapjuk, hogy:

$$0 = \operatorname{div} \mathbf{A}' = \operatorname{div} \mathbf{A} + \Delta \Psi \Rightarrow \Delta \Psi = -\operatorname{div} \mathbf{A}$$

A skalárpotenciál nem változik,

$$\Delta \Phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0}$$

Ezzel a megoldással rögzítjük az időfüggő konstans értékét nullára. Miután megvan a Φ értéke, visszaírva a (265) egyenletbe:

$$\Delta \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{A} = -\mu_0 \mathbf{J} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \nabla \Phi$$
(266)

Itt a bal oldal divergenciája nulla, ezzel konzisztens a jobb oldal is a kontinuitási egyenlet miatt:

$$\operatorname{div}\left[\mathbf{J} - \epsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \nabla \Phi\right] = \operatorname{div} \mathbf{J} - \epsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \Delta \Phi = \operatorname{div} \mathbf{J} + \frac{\partial}{\partial t} \rho = 0$$

Fogalmazhatunk úgy is, hogy J-t felbontjuk transzverzális és longitudinális tagokra:

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_t + \mathbf{J}_l \qquad \qquad \nabla \mathbf{J}_t = 0 \qquad \qquad \nabla \times \mathbf{J}_l = 0$$

Ezzel (266) bal oldala tisztán transzverzális, jobb oldalán $\nabla \Phi$ tisztán longitudinális. A transzverzális módusra vonatkozó egyenlet:

$$\Delta \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{A} = -\mu_0 \mathbf{J}_t$$

• Lorenz-mérték

Itt azt követeljük meg, hogy $\nabla \mathbf{A} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \Phi = 0$. Ekkor:

$$\Delta \Phi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \qquad \qquad \Delta \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{A} = -\mu_0 \mathbf{J}$$

Mindkét mértékben tér- és időderiváltak kombinációja jelenik meg, az ún. D'Alambertoperátor:

$$\Box = \Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}$$

7.5. Elektromágneses tér energiája és impulzusa

7.5.1. Az energia mérlegegyenlete

Elektromágneses tér esetén figyelembe kell vennünk az indukció jelenlétét, tehát az időfüggés nem hanyagolható el. Nézzük meg, hogy egy töltés mozgatásához mekkora teljesítmény szükséges. A teljesítményre vonatkozó összefüggés általában $P_F = \mathbf{vF}$ (ahol $\mathbf{F} = q\mathbf{E}$) alakban áll elő, azonban ha elektromágneses kölcsönhatás van jelen, a kifejezés átalakul:

$$P_F = \mathbf{v}q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) = q\mathbf{v}\mathbf{E} \Rightarrow P_F = \int d^3\mathbf{x} \mathbf{J}(\mathbf{x})\mathbf{E}(\mathbf{x})$$

A tér felépítéséhez szükséges teljesítmény ennek az ellentettje (hiszen \mathbf{F} a mozgó töltésekre ható erő, nekünk ez ellen kell dolgoznunk), tehát:

$$\mathbf{P} = -\mathbf{P}_F = -\int d^3 \mathbf{x} \mathbf{J}(\mathbf{x}) \mathbf{E}(\mathbf{x}) \Rightarrow \mathbf{p} = -\mathbf{E} \mathbf{J}$$

ahol p a teljesítménysűrűség.

Felhasználva a Maxwell-egyenleteket (kiegészítve az egészet egy 0 = Hrot E - Hrot E taggal):

$$-\mathbf{E}\mathbf{J} = \mathbf{E}\Big(-\mathrm{rot}\mathbf{H} + \frac{\partial}{\partial t}\mathbf{D}\Big) = \mathbf{E}\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{D} - \mathbf{E}\mathrm{rot}\mathbf{H} + \mathbf{H}\mathrm{rot}\mathbf{E} - \mathbf{H}\mathrm{rot}\mathbf{E} = \mathbf{E}\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{D} + \mathbf{H}\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{B} - \mathbf{E}\mathrm{rot}\mathbf{H} + \mathbf{H}\mathrm{rot}\mathbf{E}$$

Az első két tag teljes időderivált alakban írható:

$$\mathbf{E}\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{D} + \mathbf{H}\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{B} = \frac{\partial}{\partial t}\mathbf{u}$$

Ahol u az energiasűrűség és lineáris anyagokban a következő alakot ölti:

$$\mathbf{u} = \frac{1}{2} \left(\mathbf{D}\mathbf{E} + \mathbf{B}\mathbf{H} \right) = \frac{\epsilon}{2} \mathbf{E}^2 + \frac{1}{2\mu} \mathbf{B}^2$$

Az utolsó két tag teljes divergencia. Definiáljuk a Poynting-vektort:

$$\mathbf{S} = \mathbf{E} imes \mathbf{H}$$

Ennek véve a divergenciáját, visszakapjuk a kívánt tagokat. Összesítve, eljutunk az energia mérlegegyenletére (mely az energiamegmaradást fejezi ki):

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{u} + \mathrm{div}\mathbf{S} + \mathbf{J}\mathbf{E} = 0$$

Ezt a teljes térre integrálva, a divergencia nem ad járulékot, vagyis u integrálja az elektromágneses tér energiájaként értelmezhető.

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \mathrm{d}^3 \mathbf{x} \mathbf{u} = \int \mathrm{d}^3 \mathbf{x} (-\mathbf{J} \mathbf{E}) = \mathbf{P}$$

Ily 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.

7.5.2. Az impulzus mérlegegyenlete

Hasonló módon járhatunk el az impulzusváltozásnál is: ha egy próbatöltést helyezünk elektromágneses térbe, akkor a rá ható erő a Lorentz-erő:

$$\mathbf{F} = \int \mathrm{d}^3 \mathbf{x} (\rho \mathbf{E} + \mathbf{J} \times \mathbf{B}) \Rightarrow \mathbf{f} = \rho \mathbf{E} + \mathbf{J} \times \mathbf{B}$$

Ahol **f**, 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:

$$\rho \mathbf{E} + \mathbf{J} \times \mathbf{B} = \mathbf{E} \operatorname{div} \mathbf{D} - \mathbf{B} \times (\operatorname{rot} \mathbf{H} - \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{D}) = \mathbf{E} \operatorname{div} \mathbf{D} + \mathbf{B} \times \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{D} - \mathbf{B} \times \operatorname{rot} \mathbf{H} = \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{B} \times \mathbf{D}) - \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B} \times \mathbf{D} + \mathbf{E} \operatorname{div} \mathbf{D} + \mathbf{H} \operatorname{div} \mathbf{B} - \mathbf{B} \times \operatorname{rot} \mathbf{H} = -\frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{D} \times \mathbf{B}) + \mathbf{E} \operatorname{div} \mathbf{D} + \mathbf{H} \operatorname{div} \mathbf{B} - \mathbf{B} \times \operatorname{rot} \mathbf{H} - \mathbf{D} \times \operatorname{rot} \mathbf{E}$$

Az első tag teljes időderivált, a második tag pedig egy teljes divergencia. Bevezetve:

$$\mathbf{g} = \mathbf{D} \times \mathbf{B} = \frac{1}{c^2} \mathbf{S}$$
$$T_{ij} = \frac{1}{2} (\mathbf{D}\mathbf{E} + \mathbf{B}\mathbf{H}) \delta_{ij} - E_i D_j - H_i B_j$$

mennyiségeket azt kapjuk, hogy:

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{g}_i + \partial_j \mathbf{T}_{ij} + (\rho \mathbf{E} + \mathbf{J} \times \mathbf{B})_i = 0$$

Integráljuk ki a teljes térre a kifejezést:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int d^3 \mathbf{x} g_i = -\int d^3 \mathbf{x} (\rho \mathbf{E} + \mathbf{J} \times \mathbf{B})_i$$

A jobb oldal az anyagra ható erő ellenereje, tehát a bal oldal nem más, mint az elektromágneses tér impulzusa, vagyis **g** az elektromágneses tér impulzussűrűsége, a T_{ij} pedig a mérlegegyenletek szokásos értelmezése szerint, az impulzus áramsűrűsége vagy az ún. Maxwell-féle feszültségtenzor.

8. Hullámegyenlet és hullámjelenségek (Mocskonyi Mirkó)

Hullámegyenletek származtatása, megoldásai, rugalmas és elektromágneses hullámok. Diszperzió, csoport- és fázissebesség, Doppler-effektus. Interferencia, diffrakció. Elektromágneses hullámok terjedése vákuumban, dielektrikumban és vezetőkben. Polarizáció. Retardált potenciálok. Dipólsugárzás.

A hullámegyenlet számos helyen megjelenik a fizikában, ahol valamilyen fizikai mennyiség a következő differenciálegyenlet megoldásaként áll elő:

$$\partial_t^2 \psi(t, \mathbf{r}) = c^2 \, \triangle \psi(t, \mathbf{r}), \tag{267}$$

ahol c a hullám adott közegbeli terjedési sebessége. Ez tehát egy térben és időben másodrendű parciális differenciálegyenlet. A d'Alembert-operátoros jelölést használva: $\Box \psi = 0$. Ha a hullámegyenletben az időfüggést $e^{i\omega t}$ -ként leválasztjuk, akkor belőle a Helmholtz-egyenlet adódik.

8.1. Megoldásai

8.1.1. Síkhullám

Az egyik féle megoldása az egyenletnek az ún. síkhullám megoldás, melynek általános, ${\bf n}$ irányba terjedő alakja:

$$\psi(t, \mathbf{r}) = f(\mathbf{nr} \mp ct) \implies c^2 f'' = c^2 |\mathbf{n}|^2 f'', \tag{268}$$

vagyis ha **n** egységvektor, akkor megoldása a hullámegyenletnek. A síkhullám megnevezés azért jogos, mivel azon pontok halmaza, amelyek adott időben azonos fázisúak, az **nr** egyenletű síkon helyezkednek el. A síkhullámok a hullámegyenlet megoldásainak terében bázist alkotnak a következő alakban:

$$\psi = \psi_0 \mathrm{e}^{i(\omega(\mathbf{k})t \pm \mathbf{kr})},\tag{269}$$

ez egy **k** módus. Az $\omega(\mathbf{k})$ kapcsolatot nevezzük diszperziós relációnak, amely a különböző hullámok terjedését jellemzi a közegben. A hullámegyenletbe a síkhullámmódust visszaírva erre $\omega = ck$ adódik, ahol $k = |\mathbf{k}|$. Az általános megoldás a hullámszámvektorra történő integrálással kapható meg:

$$\psi(t, \mathbf{r}) = \int \frac{\mathrm{d}^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} a(\mathbf{k}) \mathrm{e}^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}.$$
(270)

8.1.2. Gömbhullámok

Térben gömbszimmetrikus megoldásai a hullámegyenletnek, ekkor $\psi(t, \mathbf{r}) = \psi(t, r)$, azaz csak az origótól való távolságtól függ. Ekkor a Laplace-operátort gömbi koordinátarendszerben írjuk fel, onnan is csak a radiális része kell:

$$\partial_t^2 \psi = c^2 \frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r \psi) = c^2 \frac{\partial_r^2 (r\psi)}{r} \Rightarrow \partial_t^2 (r\psi) = c^2 \partial_r^2 (r\psi).$$
(271)

Ennek egy módusa:

$$\psi = \frac{\psi_0}{r} e^{i(\omega(\mathbf{k})t \pm kr)},\tag{272}$$

amelyre szintén $\omega = ck$.

8.1.3. Speciális esetek

Néhány említésre méltó eset a fentebbi általános megoldásokon túl fontos lehet. Ilyen az állóhullám, melyre $\psi \sim e^{-i\omega t} \cos \mathbf{kr}$, ahol is adott helyen állandó az amplitúdó. A másik az ún. evaneszcens hullám, amikor formálisan ω vagy \mathbf{k} helyére komplex számokat írunk. Ekkor a valós exponenciális függvények időbeli, vagy térbeli lecsengést fognak adni.

8.2. Származtatása

Az egyenletet számos helyen megkapjuk, ezek közül tekintünk meg néhányat. Például golyós-rugós rendszerek megfelelő folytonos határátmenetével is megkapható az egyenlet, azonban ezt nem tárgyaljuk.

8.2.1. Rugalmas hullámok

Izotróp, lineáris közeg mozgásegyenlete:

$$\rho \ddot{\mathbf{u}} = \mathbf{f} + \mu \, \triangle \mathbf{u} + (\lambda + \mu) \nabla (\nabla \mathbf{u}). \tag{273}$$

Ha $\mathbf{f} = 0$, azaz nincs külső erő, akkor véve az egyenlet divergenciáját, illetve rotációját, hullámegyenleteket kapunk ($\nabla \mathbf{u} = v$ és $\nabla \times \mathbf{u} = \mathbf{w}$ jelölésekkel):

$$\rho \partial_t^2 v = (2\mu + \lambda) \, \triangle v; \qquad \rho \partial_t^2 \mathbf{w} = \mu \, \triangle \mathbf{w}. \tag{274}$$

Belátható, hogy **u** rotációmentes része longitudinális hullámot ír le, a divergenciamentes része pedig transzverzálisat (a síkhullám divergenciájára $\nabla \to i\mathbf{k}$, a rotációjára $\nabla \times \to i\mathbf{k} \times$). Tehát a terjedési sebességekre:

$$c_l = \sqrt{\frac{2\mu + \lambda}{\rho}}; \qquad c_t = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}},$$
(275)

vagyis $c_l > c_t$.

Megjegyzésképpen a hanghullámra is hullámegyenlet kapható, ekkor a Navier-Stokesegyenletet és a kontinuitás egyenletetet fölhasználva, ha a hangot egy nyugalomban levő közegre tett sűrűség-, valamint nyomásperturbációként kezeljük. Kiderül, hogy rotációmentes sebességvektora lesz, azaz a hanghullám longitudinális.

8.2.2. Elektromágneses hullámok

A Maxwell-egyenletek:

$$\nabla \mathbf{E} = \frac{\rho}{\varepsilon}; \ \nabla \mathbf{B} = 0; \ \nabla \times \mathbf{E} = -\partial_t \mathbf{B}; \ \nabla \times \mathbf{B} = \mu \mathbf{j} + \mu \varepsilon \partial_t \mathbf{E},$$
(276)

ahonnan

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = \frac{1}{\varepsilon} \nabla \rho - \Delta \mathbf{E} = -\mu \partial_t \mathbf{j} - \mu \varepsilon \partial_t^2 \mathbf{E}, \qquad (277)$$

valamint

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{B}) = -\Delta \mathbf{B} = \mu \nabla \times \mathbf{j} - \mu \varepsilon \partial_t^2 \mathbf{B}.$$
 (278)

Ezekből a d'Alembert-operátorral:

$$\Box \mathbf{E} = \frac{1}{\varepsilon} \nabla \rho + \mu \partial_t \mathbf{j}; \quad \Box \mathbf{B} = -\mu \nabla \times \mathbf{j},$$
(279)

ahol a fénysebességet használva $\mu \varepsilon = \frac{n^2}{c^2}$, *n* a törésmutató. Érdemes tudni, hogy a potenciálokra is hasonlóak az egyenletek; Coulomb-mértékben Φ -re a Laplace-egyenlet, **A**-ra a homogén d'Alembert-egyenlet (hullámegyenlet) teljesül, Lorenz-mértékben mindkettőre az utóbbi.

A hullámegyenlet $\rho = 0$, $\mathbf{j} = 0$ esetben adódik, ekkor a síkhullámmegoldás:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_{\mathbf{0}} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}; \qquad \mathbf{B} = \mathbf{B}_{\mathbf{0}} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}, \tag{280}$$

ahol a diszperziós reláció $\omega = \frac{c}{n}k$. Mivel $\nabla \mathbf{E} = 0$ és $\nabla \mathbf{B} = 0$, ezért $i\mathbf{k}\mathbf{E} = i\mathbf{k}\mathbf{B} = 0$. Továbbá $\nabla \times \mathbf{E} = i\mathbf{k} \times \mathbf{E} = -\partial_t \mathbf{B} = i\omega \mathbf{B}$, azaz $\mathbf{k} \perp \mathbf{E} \perp \mathbf{B}$, valamint $E_0 = cB_0$. Ez azt jelenti, hogy az elektromágneses hullámnak két transzverzális módusa van.

8.3. Diszperzió, csoport- és fázissebesség

Láttuk, hogy a diszperziós reláció az $\omega(\mathbf{k})$ függvény, amely leírja az adott közegben a különböző hullámszámmal rendelkező síkhullámok terjedését. Izotróp közegben csak k-tól függ, hullámegyenlet esetén a lineáris $\omega = ck$ összefüggés. Ez alapján definiálhatóak a csoport- és fázissebesség. Ha tekintünk egy valós haladó hullámmódust az

$$\psi = a\cos(\omega t - \mathbf{kr} + \phi) \tag{281}$$

alakban, akkor látható, hogy ez térben és időben periodikus. Most általános diszperziós relációval dolgzunk. Egy t_0 időpontban kiválasztott \mathbf{r}_0 ponttal azonos fázisú pontok halmaza:

$$\omega t_0 - \mathbf{kr_0} + \phi = \omega t - \mathbf{kr} + \phi + 2n\pi, \qquad (282)$$

ahol n egész szám. Ezt $\mathbf{k}/|\mathbf{k}|^2$ -tel szorozva és átrendezve kapjuk:

$$\mathbf{r} = \mathbf{r_0} + (t - t_0) v_f \hat{\mathbf{k}} + \lambda n \hat{\mathbf{k}} + \beta \hat{\mathbf{k}}_\perp, \qquad (283)$$

ahol $v_f = \frac{\omega}{k}$, $\lambda = \frac{2\pi}{k}$. Tehát $t = t_0$ -nál az $\mathbf{r_0}$ -lal azonos fázisban a k-ra merőleges síkok lesznek, melyek az $\mathbf{r_0} + \beta \hat{\mathbf{k}}_{\perp}$ síktól $\lambda n \hat{\mathbf{k}}$ távolságokra fekszenek. Az idővel ezek a hullámfrontok v_f sebességgel haladnak tovább, azaz ez az azonos fázisú pontok sebessége, a fázissebesség.

Most tegyünk össze azonos irányú síkhullámokat, ez effektíven egy 1D-s problémaként írható le:

$$\psi(t,x) = \int \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} a(k) \mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}.$$
(284)

Tegyük fel, hogy a(k) egy k_0 körül erősen csúcsos függvény, továbbá, ahol $a(k) \neq 0$, ott $\omega(k)$ lassan változik (most a hullámszámvektorok egyirányúak). Ekkor t = 0-nál a $k \to k - k_0$ változócserével és $r(k) = a(k - k_0)$ jelöléssel (r(k) 0 körül csúcsos függvény):

$$\psi(0,x) = e^{ik_0x} \int \frac{dk}{2\pi} r(k) e^{ikx} = e^{ik_0x} r(x).$$
(285)

Ez az r(x) függvénnyel modulált síkhullám lassan változik (kis hullámszámok jelentősek csak benne, tehát nagy a hullámhossz). A diszperziós reláció sorfejtése:

$$\omega(k) \approx \omega_0 + (k - k_0) \frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}\Big|_{k=k_0},\tag{286}$$

innen definiáljuk a csoportsebességet: $v_{cs} = \frac{d\omega}{dk}\Big|_{k=k_0}$, amivel

$$\psi(t,x) = \int \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} a(k) \mathrm{e}^{i(kx - (\omega_0 + (k - k_0)v_{cs})t)} = \mathrm{e}^{ik_0(x - v_f t)} r(x - v_{cs} t).$$
(287)

A második egyenlőséghez ugyanazt a változócserét végeztük el, mint fentebb. Így az eredetihez hasonló modulált síkhullámot kaptunk, ahol a burkoló v_{cs} -vel, a csoportsebességgel halad. Ez tehát a hullámcsomag terjedési sebessége. A kifejezésben v_f továbbra is a fázissebesség. Fontos, hogy információközléshez hullámcsomagra van szükség, mivel a végtelen síkhullámokban nincs szerkezet, ami jelentéssel bírna, tehát az információközlés sebességét is a csoportsebesség adja. Tehát ismert diszperziós reláció alapján a csoport-, és fázissebesség kiszámítható a fenti definíciók alapján.

8.4. Doppler-effektus

Ha a hullámforrás és a megfigyelő a hullámterjedés közegében egymáshoz képest mozog, akkor fellép a Doppler-effektus, vagyis a megfigyelő a kibocsátott hullám frekvenciáját az eredetitől különbözőnek észleli. Az egyszerűség kedvéért 1D-ben nézzük meg a jelenséget. A forrás és a megfigyelő mozgásának függvényében a megfigyelt és a kibocsátott frekvencia kapcsolata:

$$f = f_0 \frac{c \pm v_m}{c \pm v_f},\tag{288}$$

ahol v_m a megfigyelő sebessége (+, ha a forrás felé mozog, -, ha elfelé mozog), v_f a forrás sebessége (+, ha a forrás távolodik a megfigyelőtől, -, ha közeledik).

Relativisztikusan is fellép Doppler-effektus, mely radiális mozgásra v relatív sebességgel:

$$f = f_0 \sqrt{\frac{1 + \frac{v}{c}}{1 - \frac{v}{c}}}.$$
 (289)

Érdekes módon teljesen transzverzális mozgás esetén is fellép Doppler-effektus:

$$f = f_0 \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}.$$
(290)

8.5. Interferencia, diffrakció

Két különböző hullám találkozásakor azok szuperpozíciója (ψ -k összege) jelenik meg. Ahhoz, hogy interferenciakép alakulhasson ki, bizonyos feltételeknek teljesülnie kell. A két hullám frekvenciájának meg kell egyeznie, továbbá koherensnek kell lenniük, azaz, a köztük lévő fáziskülönbségnek állandónak kell lennie (ez elérhető például, ha egy hullámnyalábot kettéosztunk, majd később egyesítünk, amikor már eltér a fázisuk). További feltétel, hogy a két hullám ne legyen egymásra merőleges polarizációjú. Ekkor lesznek olyan pontok, ahol a két hullám maximálisan erősíti, illetve gyengíti egymást a fáziskülönbség függvényében.

Diffrakció alatt a hullámok akadályok miatti elhajlását értjük. Ekkor az akadálynál a hullám amplitúdója zérus lesz, a kialakult diffrakciót pedig a Huygens-Fresnel-elv szerint értelmezzük. Azt mondja ki, hogy a megfigyelt hullámfelület az egyes pontokból kiinduló gömbhullámok eredője, azaz az interferáló gömbhullámok összege. Például egy kétrés-kísérlet esetén a rések mögött elhelyezett ernyőn a jól ismert $d \sin \vartheta = m\lambda$ feltételt kapjuk a maximális erősítésre, ahol λ a hullámhossz.

8.6. Elektromágneses hullámok terjedése vákuumban, dielektrikumban, vezetőkben

Az elektromágneses hullám alakja a 280. egyenletben látható, vákuumban a terjedési sebessége $c = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}}$. Dielektrikumban, ha az anyagi egyenletek lineárisak ($\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}, \mathbf{H} = \frac{1}{\mu} \mathbf{B}$), akkor a vákuumal megegyező módon kezelhetőek, amennyiben ε_r nem függ a frekvenciától ($\mu_r \approx 1$).

Vezető anyagban a differenciális Ohm-törvény $\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$ alakú, ahol σ a fajlagos vezetőképesség. Ekkor feltéve, hogy a vezetőben nem halmozódik fel töltés ($\rho = 0$), a 279. egyenlet alapján az Ohm-törvényt használva:

$$\Box \mathbf{E} = \mu \sigma \partial_t \mathbf{E}, \qquad \Box \mathbf{B} = -\mu \sigma \nabla \times \mathbf{E} = \mu \sigma \partial_t \mathbf{B}, \tag{291}$$

ezek a távíró-egyenletek. Ezeket megoldva az derül ki, hogy $\sigma > 0$, azaz vezetők esetén a hullámok lecsengenek, a hullámszámvektornak lesz képzetes része, valamint az elektromos és mágneses tér között fáziseltolódás lesz tapasztalható. A $\sigma = 0$, azaz a szigetelő eset viszont a hullámegyenletet adja. A lecsengés oka, hogy a vezetőben induló áramok hővesztesége a hullám energiáját csökkentik. Azonban ha mindez látható fénytartományban is igaz lenne, akkor a szigetelők átlátszóak, a vezetők pedig nem. Ekkor azonban a vezetőképesség már frekvenciafüggő, sőt komplex is lehet. Ilyenkor az Ohm-törvényben szereplő mennyiségek sem lesznek már fázisban.

Ha alacsony frekvenciás határesetet veszünk, akkor az $\frac{1}{c^2}$ -es második deriváltas tagokat elhanyagolva a távíró-egyenletekből a hővezetési egyenletre jutunk (kvázistacionárius közelítés). Ekkor az elektromos térre vonatkozó egyenlet megszorozva σ -val:

$$\Delta \mathbf{j} = \mu \sigma \partial_t \mathbf{j}. \tag{292}$$

Ha az áramsűrűség csak a z koordináta függvénye, akkor az egyenletet megoldva kapjuk az ún. skin-effektust. Eszerint a vezetők felszínén folyik csak áram, ugyanis a megoldás z-ben lecseng.

A permittivitás frekvenciafüggését megérthetjük, ha fölírjuk, hogy az anyagban létrejövő polarizáció az elektromos tér hatására jön létre, arra az időbeli válasz (ami késhet, tehát a korábbi időpontoktól függ). Mivel az időfüggés homogén, ezért

$$P(t) = \varepsilon_0 \int_{-\infty}^{\infty} dt' \chi(t - t') E(t') \implies P(\omega) = \varepsilon_0 \chi(\omega) E(\omega),$$
(293)

ahol Fourier-térbe tértünk át. χ az elektromos szuszceptibilitás. Ekkor $\varepsilon_r(\omega) = 1 + \chi(\omega) \Rightarrow n(\omega) = \sqrt{\varepsilon_r(\omega)}$ (még egyszer: $\mu_r \approx 1$). Ekkor a hullámszámvektor:

$$\mathbf{k} = \hat{\mathbf{k}} \frac{\omega}{c} n(\omega). \tag{294}$$

Ekkor, ha $\varepsilon_r(\omega)$ -nak van imaginárius része, akkor a törésmutatónak is lesz; n_{im} , ekkor a hullám a térben lecseng. Az n_{im} -et szokás abszorpciós együtthatónak nevezni, látszik, hogy ezzel csökken a hullám energiája. Az elektromos tér ~ $e^{-i\omega t}$ időfüggése esetén a polarizációs vektorra is ez igaz, ekkor a polarizációs áram:

$$\mathbf{j} = \partial_t \mathbf{P} = -i\omega\varepsilon_0 \chi(\omega) \mathbf{E} \ \Rightarrow \ \sigma = -i\omega\varepsilon_0 \chi(\omega), \tag{295}$$

tehát a differenciális Ohm-törvényben szereplő vezetőképesség is bevezethető.

Közeghatárokon alkalmazni kell az illesztési feltételeket, vagyis hogy E_t és B_n folytonosan megy át. Ha hullámterjedést tekintünk úgy, hogy az ideális vezető és ideális diamágnes anyagon belül a terektől eltekintünk, akkor a határfeltételektől függően beszélünk hullámvezetőkről és üregrezonátorokról. Ekkor tekinthetőek külön a határfeltételeknek megfelelő $E_t = 0, B_n = 0$ módusok (rendre TE és TM módus), melyek szuperpozíciója adja a teljes megoldást.

8.7. Polarizáció

Tekintsük az elektromos teret: $\mathbf{E} = \mathbf{E}_{\mathbf{0}} e^{i(\mathbf{kr}-\omega t)}$, és $\mathbf{k} \perp \mathbf{E}$, tehát $\mathbf{E}_{\mathbf{0}}$ a hullámszámvektorra merőleges 2D-s altérben van. Legyen ekkor a bázis $\{\hat{\mathbf{k}}, \mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2\}$, ahol teljesüljenek $\hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{e}_1 = \mathbf{e}_2$, $\hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{e}_2 = -\mathbf{e}_1$ relációk. Tehát két polarizációs vektor adja meg a hullám polarizációját. A valós fizikai tér:

$$\mathbf{E} = E_1 \mathbf{e_1} \cos(\mathbf{kr} - \omega t + \phi_1) + E_2 \mathbf{e_2} \cos(\mathbf{kr} - \omega t + \phi_2), \tag{296}$$

ebből a mágneses tér is fölírható. Adott **r** pontban a **k**-ra merőleges síkban kirajzolt görbe szemléletesen mutatja a polarizációt. Legyen $E_1 = E_2$. Ekkor $\phi_1 = \phi_2$ esetben lineáris polarizáció, $\phi_1 = \phi_2 \pm \frac{\pi}{2}$ esetén cirkuláris polarizációról beszélünk (egy egyenest, illetve kört látnánk), tetszőleges E1, E_2 értékekre teljesen általánosan pedig elliptikusan polarizált hullámról beszélhetünk (ellipszist látunk).

Különböző optikai eszközök fénytöréssel, valamint bizonyos anyagok képesek a hullám polarizációjának megváltoztatására (Faraday-effektus, kettőstörés).

8.8. Retardált potenciálok

A 279. egyenleteket akarjuk megoldani. Ezek inhomogén d'Alembert-egyenletek $\Box \psi = -f$ alakban, melyeket Green-függvény segítségével meg tudunk oldani. Ekkor meg kell oldani a (a d'Alembert-operátor az **r** és t szerint derivál)

$$\Box G(t - t', \mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\delta(t - t')\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \qquad (297)$$

melyből a megoldás:

$$\psi(t,\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t' \int \mathrm{d}^{3}\mathbf{r}' G(t-t',\mathbf{r}-\mathbf{r}')f(t',\mathbf{r}').$$
(298)

Aki szeretné (http://jakovac.web.elte.hu/Documents/Eldin.pdf) Jakovác jegyzetében megnézheti a Green-függvény meghatározását, amely

$$G_{R/A}(t-t',\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\delta\left(t-t'\mp\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}{c}\right).$$
(299)

Ezzel a megoldás

$$\psi_{R/A}(t,\mathbf{r}) = \int \mathrm{d}^3\mathbf{r} \frac{1}{4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} f\left(t \mp \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{c}, \mathbf{r}'\right).$$
(300)

 $\psi_R t > 0$ -ra nem zérus, ez a retardált megoldás, ψ_A pedig fordítva, t < 0-ra nem zérus, így ez az avanzsált potenciál. Az előbbi a forrásból kifutó gömbhéjakat ír le, az utóbbi befutókat, így a fizikai értelmezésük az, hogy ha ismerjük $t = t_0$ -ban a tér értékét és azt, hogy a forrás $t_0 < t$, avagy a $t < t_0$ időben üzemel, akkor ennek megfelelően kell a retardált, illetve az avanzsált megoldást hozzáadni a tér t_0 -beli értékéhez.

Innen az elektromágneses potenciálok retardált megoldásai vákuumban, Lorenz-mértékben (ekkor $\Box \Phi = -\frac{\rho}{\varepsilon_0}$, és $\Box \mathbf{A} = -\mu_0 \mathbf{j}$), ha azok kezdetben zérusok:

$$\Phi(t,\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \int d^3\mathbf{r}' \frac{\rho\left(t - \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{c}, \mathbf{r}'\right)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}; \qquad \mathbf{A}(t,\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int d^3\mathbf{r}' \frac{\mathbf{j}\left(t - \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{c}, \mathbf{r}'\right)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \tag{301}$$

8.9. Dipólsugárzás

Mivel a retardált potenciálokat Lorenz-mértékben írtuk fel, így a $\nabla \mathbf{A} + \frac{1}{c^2} \partial_t \Phi = 0$ feltételből ~ $e^{-i\omega t}$ időfüggés esetén a skalárpotenciál a vektorpotenciálból meghatározható, a továbbiakban ilyen időfüggéssel dolgozunk. Tehát mostantól csak az utóbbit tekintjük. Ekkor $\omega = ck$ összefüggés miatt

$$\mathbf{A}(t,\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \mathrm{e}^{-i\omega t} \int \mathrm{d}^3 \mathbf{r'} \mathbf{j}(\mathbf{r'}) \frac{\mathrm{e}^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r'}|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r'}|}.$$
(302)

Ha a forrás mérete sokkal kisebb, mint $\lambda = \frac{2\pi}{k}$, azaz $d \ll \lambda$, valamint távol vagyunk tőle, $|\mathbf{r}| = r \gg \lambda$, akkor az integrandust sorfejtjük:

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \approx \frac{1}{r}, \qquad |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = \sqrt{r^2 + r'^2 - 2\mathbf{r}\mathbf{r}'} \approx r\sqrt{1 - 2\frac{\mathbf{\hat{r}r'}}{r}} \approx r - \mathbf{\hat{r}r'}.$$
 (303)

Ekkor a vektorpotenciál

$$\mathbf{A}(t,\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\mathrm{e}^{i(kr-\omega t)}}{r} \int \mathrm{d}^3 \mathbf{r'} \mathbf{j}(\mathbf{r'}) \mathrm{e}^{-ik\hat{\mathbf{r}}\mathbf{r'}}$$
(304)

Az együttható r-ben oszcilláló függvény, az r = 0, t = 0 ponttal azonos fázisú pontokra

$$\frac{\omega}{c}r - \omega t = 2\pi n \implies r = ct - \frac{2\pi cn}{\omega},\tag{305}$$

azaz periodikus, ekvidisztáns gömbhéjak. Tehát gömhullámokról van szó, melyeknek az integrál miatt irányfüggése lesz. Mivel $k|\mathbf{r}'| < kd$, így az exponenciálist tovább sorfejtjük:

$$\mathbf{A}(t,\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\mathrm{e}^{i(kr-\omega t)}}{r} \int \mathrm{d}^3 \mathbf{r}' \mathbf{j}(\mathbf{r}') (1 - ik\hat{\mathbf{r}}\mathbf{r}').$$
(306)

Ha ennek is csak az első tagjára szorítkozunk, akkor az integrál:

$$\int d^3 \mathbf{r}' j_i = \int d^3 \mathbf{r}' j_j \partial_j x'_i = -\int d^3 \mathbf{r}' x'_i \partial_j j_j = \int d^3 \mathbf{r}' x'_i \partial_t \rho = \partial_t p_i = -i\omega p_i, \quad (307)$$

ahol paricálisan integráltunk, felhasználtuk a kontinuitási egyenletet, majd a dipólmomentum definícióját. Ekkor a vektorpotenciál:

$$\mathbf{A}(t,\mathbf{r}) = \frac{-i\omega\mu_0}{4\pi} \frac{\mathrm{e}^{i(kr-\omega t)}}{r} \mathbf{p},\tag{308}$$

tehát $A \sim \omega p$. Ezt nevezzük dipólsugárzásnak.

Ha ezek után akarjuk kiszámítani a tereket, akkor a vektorpotenciált deriválnunk kell a térkoordináta szerint. Mivel a sorfejtés során az $\frac{1}{r^2}$ -es tagokat már elhanyagoltuk, azokat most sem tartjuk meg, így csak az exponenciális függvényt deriváljuk. Ekkor $\nabla \rightarrow ik\hat{\mathbf{r}}$. Vagyis

$$\mathbf{H} = \frac{1}{\mu} \nabla \times \mathbf{A} = \frac{k\omega}{4\pi} \frac{\mathrm{e}^{i(kr-\omega t)}}{r} (\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{p}) = \frac{\omega^2}{4\pi c} \frac{\mathrm{e}^{i(kr-\omega t)}}{r} (\hat{\mathbf{r}} \times \mathbf{p}), \tag{309}$$

az elektromos térre pedig $(\nabla \times \mathbf{B} = \frac{1}{c^2} \partial_t \mathbf{E})$

$$\mathbf{E} = \frac{ic^2}{\omega} \nabla \times \mathbf{B} = c\mathbf{B} \times \hat{\mathbf{r}} = c\mu_0 \mathbf{H} \times \hat{\mathbf{r}}, \qquad (310)$$

ahol bevezethetjük a $Z_0 = c\mu_0 = \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}}$ vákuumimpedanciát. A sugárzás teljesítményének meghatározásához tanulmányozzuk a Poynting-vektort:

$$\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H} = Z_0(\mathbf{H} \times \hat{\mathbf{r}}) \times \mathbf{H} = Z_0 \hat{\mathbf{r}} H^2 \implies S = Z_0 H^2.$$
(311)

A sugárzásoknál szokás intenzitásnak az egy időbeli periódusra vett teljesítmény-áramsűrűséget nevezni, ekkor az időfüggéshez már a valós részt tekintjük, azaz $S \sim \cos^2 \omega t$, aminek az idő-átlaga egy $\frac{1}{2}$ -es szorzót hoz be. Ha $\hat{\mathbf{r}}$ és \mathbf{p} által bezárt szög θ , akkor

$$S = \frac{Z_0}{32\pi^2 c^2} \omega^4 \frac{p^2}{r^2} \sin^2 \theta.$$
 (312)



19. ábra. A dipólsugárzás karakterisztikája

Mivel az eredmény $\sim \frac{1}{r^2},$ ezért az egy térszögbe kisugárzott teljesítmény távolságfüggetlen, vagyis

$$\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{Z_0}{32\pi^2 c^2} \omega^4 p^2 \sin^2\theta,\tag{313}$$

ez a dipólsugárzás karakterisztikája θ függvényében, melyet a 19. ábra is mutat. Kiszámathatjuk még a teljes kisugárzott teljesítményt:

$$P = \int \mathrm{d}\Omega \frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{Z_0}{12\pi c^2} \omega^4 p^2.$$
(314)

Mivel ez arányos a frekvencia negyedik hatványával, tehát nagy frekvenciákon lesz jelentős a dipólsugárzás teljes kisugárzott teljesítménye.

Ezt az eredményt megkaphatjuk szemléletesebb úton is, ha vizsgáljuk két vezetékkel összekötött vezető gömb rendszerét (mely tulajdonképpen jól modellez egy polarizálható molekulát), melyre kívülről $E_0 \sin(\omega t)$ teret engedünk. Ekkor a bejövő térre a Poyntingvektor átlaga $|\langle \mathbf{S} \rangle_{be}| = c\varepsilon_0 \frac{E_0}{2}$, a vezető rendszerben pedig az elektronokra a mozgásegyenlet (legyen ez a z tengely mentén) $m\ddot{z} = -eE_0 \sin(\omega t)$. Ezt megoldva z(t) amplitúdója $z_0 = \frac{eE_0}{(m_e\omega)^2}$, amivel a dipólmomentum $p = ez_0$. Hogyha fölírjuk az egyik vezető gömb időbeli töltését $q(t) = q_0 \sin(\omega t)$ alakban, valamint a dipólus hossza l, akkor ha kiszámítjuk a kimenő energia Poynting-vektorának a ϑ irányú, r komponensű várható értékét, valamint abból a fent látott módon kiszámítjuk a teljesítményt, akkor megkapjuk a korábbival megegyező eredményünket.

9. Geometriai optika és alkalmazásai(Dudás Bence)

Fermat-elv. Paraxiális közelítés. Optikai, leképezési törvények, felbontóképesség. Optikai eszközök. Optikai jelenségek a természetben, kausztikák.

9.1. Bevezetés

Geometriai optika, amikor rendszer minden releváns mérete sokkal nagyobb, mint a fény hullámhossza. Geometriai optikában gyakran használunk leképezést.

Leképezés: Van egy eredeti fénypontunk, amiből fénysugarak indulnak ki és ezeket egy tükör visszaveri. Ezen visszavert fénysugarak meghosszabításai metszik egymást egy pontban, melyet virtuális képnek nevezünk.

9.2. Fermat-elv

A legrövidebb idő elve. A fény nem a legrövidebb, hanem a leggyorsabb úton megy mindig. Homogén közegben a fény mindig egyenes mentén terjed. Két egymással érintkező, különböző törésmutatójú homogén közeg határán a fény megtörik (és vissza is verődhet), melyet a Snellius–Descartes-törvény ír le (a SD-törvény levezethető a Fermat-elv segítségével):

$$\frac{\sin\alpha}{\sin\beta} = \frac{c_1}{c_2} = \frac{n_2}{n_1} = n_{2,1}$$

Tehát: A beesési szög (α) szinuszának és a törési szög (β) szinuszának aránya a közegekben mért terjedési sebességek (c_1, c_2) arányával egyenlő, ami megegyezik a két közeg relatív törésmutatójával ($n_{2,1}$). Kiegészítés a törvényhez: A beeső fénysugár, a beesési merőleges és a megtört (visszavert) fénysugár mindig egy síkban van. A merőlegesen beeső fénysugár nem törik meg, hanem változatlanul továbbhalad.

9.3. Paraxiális közelítés

Paraxiális jelentése: tengelyközeli. Tehát paraxiális közelítésben hengerszimmetrikus, tengelyközeli rendszereket vizsgálunk.

Tulajdonságai:

- Tegyük fel, hogy van egy optikai rendszerünk, ami hengerszimmetrikus.
- Kicsik a (fény)sugarak szögei a tengelyhez képest.
- Szépen megfogalmazva: a tengelytől való távolság kisebb, mint a bármilyen relenváns fókusztávolság vagy méret
- Ugyan ez magyarul: Ha van egy lencséd legyünk közelebb az optikai tengelyhez, mint a fókusztávolsághoz

Amit vizsgálunk:Bemegy a fénysugár y magasságban és ϑ szögben(ami annyira kicsi, hogy $sin(\vartheta) \approx \vartheta$), átmegy a rendszeren és kijön valamilyen y' magasságban és ϑ' szöggel.

A fénysugarakat az optikai tengelytől mért (előjeles!) y távolsággal, és szintén az optikai tengellyel bezárt (előjeles!) szöggel jellemezzük. Szögeknél a pozitív, mikor óra mutató járásával ellentétse. Negatív pedig, ha azonos.



A ϑ' -t és az y'-t leíró függvények lineárisak. Ami azért jó, mert a rendszer, amin áthalad a fény, reprezentálható mátrixokkal (tetszőleges paraxiális rendszerben igaz ez).

Bemenő fény: $\begin{pmatrix} y \\ n_{be}\vartheta \end{pmatrix}$ Kimenő fény: $\begin{pmatrix} y' \\ n_{ki}\vartheta \end{pmatrix}$

Az n-ek azon közegek törésmutatója, amelyekre reflektálnak, őket nem szabad lefelejteni. A leképezési mátrixaink:

• Szabad terjedés $\begin{pmatrix} 1 & \frac{d}{n} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

• Törés
$$\begin{pmatrix} 1 & 0\\ \frac{n_1-n_2}{R} & 1 \end{pmatrix}$$

• Visszaverődés $\begin{pmatrix} 1 & 0\\ -\frac{2n}{R} & -1 \end{pmatrix}$

d jelöli, hogy mekkora távolságot terjedt szabadon, R-ek a felületek görbületi sugarai (amin tört vagy visszaverődött) és n-ek a törésmutatók.

Összegezve: A bejövő fény átmegy egy rendszeren, ahol történik vele minden féle dolog(szabad terjedés, törés, visszaverődés), ezt leírhatjuk vektorok és mátrixok szorzataként, majd megkapjuk, hogy mi lesz vele, ha kijön a rendszerből.

Tetszőleges paraxiális optikai rendszerre igaz, hogy det
M $=\pm$ 1. M nyilván a rendszert reprezentáló mátrix.

9.4. Leképezési törvények, felbontóképesség

Alapfogalmak:

- Fókuszpont: az a pont, ahová az objektív a párhuzamosan beeső fénysugarakat összegyűjti (konkáv (homorú) tükör, gyűjtőlencse), vagy a fénysugarak onnan indulnak ki (konvex (domború) tükör, szórólencse).
- Pont leképezése: egy pontból kiinduló fénysugarakat ϑ -tól függetlenül egy másik pontban összegyűjtjük. Ez a másik pont lesz az eredeti pont leképezése.

Gömbtükör fókusza:

$$f = -\frac{R}{2} \tag{315}$$

A gömbtükör leképezési törvénye:

$$\frac{1}{t} + \frac{1}{k} = \frac{1}{f} \tag{316}$$

Vékony lencse fókusza:

$$\frac{1}{f} = -M_{21} = (n-1)\left(\frac{1}{R_1} - \frac{1}{R_2}\right) \tag{317}$$

Ahol az R-ek a lencse oldalának görbületi sugarai Vékony lencse leképezése :

$$\frac{1}{t} + \frac{1}{k} = \frac{1}{f} \tag{318}$$

Dioptria: $\frac{1}{f}$, lencséket és görbült felszínű tükröket jellemző mennyiség. Vékony lencséknél a dioptriák összeadódnak.

Osszetett rendszereknél a leképezést úgy kapjuk meg, hogy összeszorozzuk a rendszert alkotó mátrixokat (amik a rendszert alkotó elemeket reprezentálják), majd ebből kapjuk az általános leképezési törvényeket:

$$t_0 = \frac{1}{M_{21}} (det M - M_{22}) \tag{319}$$

valamint:

$$k_0 = \frac{1}{M_{21}} (1 - M_{11}) \tag{320}$$

A t_0 -t és a k_0 -t fősíkoknak nevezzük. A tárgy- és a képtávolságot ezektől a fősíkoktól mérjük. A fókusztávolság pedig:

$$\frac{1}{f} = -M_{21} \tag{321}$$

9.4.1. Felbontóképesség

Az optikai eszközök felbontóképessége a hullámhossz nagyságrendjébe esik. Szögfelbontás:

$$\frac{\delta}{L} < \frac{\lambda}{D} \tag{322}$$

Mikroszkóp esetén a maximális felbontás: $f\frac{\lambda}{D}$

9.5. Optikai eszközök

- Vetítőgép
- Fényképezőgép
- Lupe, szemüveg
- Mikroszkóp
- Távcső

9.5.1. Vetítőgép

Kis tárgyról nagyított, távoli kép

9.5.2. Fényképezőgép

Fényerő: begyűjtött energia hányada : $I \sim (\frac{D}{f})^2$, ahol D a lencse mérete(blendenyílás). Mélységélesség: ha csökkentjük a blendét, akkor élesebben látjuk a képet, de kisebb lesz a fényerő.

9.5.3. Nagyítólencse(Lupe)

(Laterális) Nagyítás = képméret/tárgyméret. Van egy fogalom, a tisztán látás távolsága: L_0 kb 25 cm. Nagyítónál szögnagyítás érdekel minket. Az érdekel mekkora szög alatt látom a képet.

$$N_{szg} = \frac{L_0}{t} \approx \frac{L_0}{f} \tag{323}$$

9.5.4. Szemüveg

Korrekciós lensce a szemlencse elé(a szemlencse kb 60-64 dioptriás) *rövidlátás:* túl erős fénytörés, a kép a retina előtt van, ilyenkor szórólencse kell, Dioptria<0 *távollátás:* túl gyenge fénytörés, a kép a retina mögött van, gyűjtőlencse kell, Dioptria>0

9.5.5. Mikroszkóp

Ha nagy nagyítást akarunk a nagyító nem jó, mert nem tudunk elég kis fókusztávolságot egy lencsével elérni úgy, hogy lássuk a képet. Mikroszkópnál 2 lencse van, egy aminek nagyon kicsi a fókusztávolsága. A kis lencse (objektív) létrehoz egy valódi képet és ezt nézzük egy nagyobb lencsével (okulár). Egy mikroszkópban az objektív és az okulár fókuszsíkjai egymástól a mikroszkóp felépítése által meghatározott, állandó távolságra vannak. Mikroszkóp szögnagyítása:

$$N_{szog} = \frac{\Delta}{f_{obj}} \frac{L_0}{f_{ok}} \tag{324}$$

Ahol Δ a tubu
shossz.

9.5.6. Távcső

Konfokális rendszer: olyan rendszer ahol a tárgy a végtelenben van és a kép a végtelenben keletkezik. Nincs értelme laterális nagyításról beszélni, csak szögnagyításról. Mátrixoptikával úgy lehet leírni, hogy egy fókuszálás-szabad terjedés-fókuszálás történik azaz 3 mátrix szorzataként előállítható.

Kepler (csillagászati) távcső: két gyűjtőlencse. d = $f_{obj} + f_{ok}$ Galilei (színházi) távcső : az objektív gyűjtőlencse, az okkulár szórólencse. d = $f_{obj} - f_{ok}$. A Newton-távcső hasonló elvi elrendezésű, mint a másik kettő, csak tükrökkel van megvalósítva.

A szögnagyítás: $|M_{22}| = \frac{f_2}{f_1}$.

9.6. Optikai jelenségek a természetben

9.6.1. Szivárvány

Van egy vízcsepp, arra beérkezik a fénysugár, azon megtörik és kijön. Akármekkora a beérkező fénysugarak száma, kimenő fénysugarakra lehet egy burkoló görbét rakni (ezt kausztikának hívjuk). Descartes ezt kísérlettel is lemérte és a Snellius-Descartes törvény segítségével lekövette a sugármeneteket. Szivárványnál a húrok számát a p jelöli, a szimetriatengelytől mért távolságot impakt paraméternek nevezzük, jele b.


A szivárványt állandó szögben látjuk. Főszivárvány mellett kialakulhat mellékszivárvány is, melynél a színek fordított sorrendben vannak. A szivárvány szórási szöge:

$$\theta = (\alpha - \beta) + (p - 1)(\pi - 2\beta) + (\alpha - \beta)$$
(325)

 $b = sin(\alpha)$, az egyszerűbb megértés kedvéért:



Vagy egy másik képlet rá:

$$\theta = (p-1)\pi + 2\arcsin(b) - 2p\arcsin(\frac{b}{n})$$
(326)

Ennek a szélső értéke: $b_c = \sqrt{\frac{p^2 - n^2}{p^2 - 1}}$ Ebből kiszámolhatjuk θ -ba behelyettesítve a visszaverődési szög szélső értékét.

9.6.2. Korona

Más néven koszorúnak nevezzük. Azt látjuk, hogy a nap körül kialakul egy szivárvány szerű jelenség. valójában a felhőkön jön létre. Van egy vízcsepp, ami akadályként a fény útjában van, erről a szórt fény egy difrakcióként jelenik meg előttünk.

9.6.3. Glória

Ha árnyék vetül a felhőkre, akkor a tárgy körül egy "glória" alakul ki. Ez akkor van, hogy ha bejövő fény szóródási szöge körülbelül 180°. Ezen szög környékén intenzitási maximumok jelennek meg.



20. ábra. Kausztika a pohárnál

9.7. Kausztikák

Lencsehibák esetén, ha fénnyel képezünk le egy tárgyat, akkor az általa alkotott kép foltos lesz. De ha esetlág mással (mondjuk elektronnal), akkor sajátos struktúrák alakulnak ki. A kausztika a görbesereg burkólóját jelenti.

Hullámoptikában is fontosak, ahol klasszikusan kausztikák vannak, ott hullámoptikában erősítések vannak (bonyolult struktúrával).

10. A kvantumelmélet alapvető kísérletei (Dudás Bence)

Fotoeffektus, Compton-effektus. A hőmérsékleti sugárzás spektruma (beleértve: Stefan-Boltzmann-törvény, Wien-törvény), Rutherford-kísérlet, Millikan-kísérlet, Davisson-Germerkísérlet, Stern-Gerlach-kísérlet, Einstein-de Haas-kísérlet, Zeeman-effektus.

10.1. Fotoeffektus

A fotoelektromos jelenséget Hertz fedezte fel. A fémekből elektron lép ki a fény hatására. Alkáli fémekkel könnyű vizsgálni, mert a látható fénytől is elektronok lépnek ki belőle. Azt fedezték fel, hogy a fény intezitásával arányos a kilépő elektronok száma, míg a frekvrenciától az elektron sebessége (kinetikus energiája) függ. Ezen felül létezik egy karakterisztikus minimális frekvenciaérték, ami alatt nem lépnek ki elektronok. A kísérlet során a kilépő elektronok áramát mérhetjük a fény intenzitás 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, 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 elektron 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, tehát:

$$E_f = W + E_e + \Delta k \tag{327}$$

Ahol 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 méréséből azt mondhatjuk meg, hogy $E_f = h \cdot f$, ahol h a Planck-állandó. A küszöbfrekvenciára pedig innen adódik: $W = hf_0$. Ekkor éppen kiszabadulnak az elektronok, de a legkisebb feszültség gátat sem tudják legyőzni.

Az intenzitás minden értéktől független. A megfigyelések csak úgy értelmezhetőek, ha a fény kvantumok, azaz fotonok formájában terjed és ezen belül hf energiát hordoznak és ők tudnak kilökni elektronokat. Hiába a nagy fény intenzitása, ha a frekvenciája kicsi, akkor az egyes kvantumok energiája is kicsi.

10.2. Compton-effektus

Nevét Comptonról kapta, aki Röntgen sugarak szóródását vizsgálta paraffinon. A szórt sugárzásban nagyobb hullámhosszú komponensek jelentek meg, valamint a szögeloszlás is etlért a várakozásától. Klasszikus fizikában a bemenő és a kimenő hullám frekvenciája azonos vagy esetleg nagy intenzitásnál van jelentős hatás. Így a Compton-effektus bizonyítékként szolgált a fény részecsketermészetére, ezzel megalapozva a kvantumelméletet is.

A magyarázata az volt részecskeképben, hogy bemegy valamilyen $p = \frac{hf}{c}$ impulzussal a részecske és kijön valami $p' = \frac{hf'}{c}$ impulzussal, miközben kettő közti különbséget átadta

az elektronnak, illetve az energiájából is adott át. Az elektron energiája eredetileg $E^2 = m_e^2 c^4$ volt és ebből lett $E^2 = m_e^2 c^4 + p_e^2 c^2$. Ha felírjuk az energiamegmaradást, valamint az impulzusmegmaradást, kiszámolhatjuk a hullámhosszmódosulást.

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos(\theta)) = 2\lambda_c (\sin\frac{\theta}{2})^2$$
(328)

ahol $\lambda_c = 2.4pm$ a Compton-hullámhossz. Alacsony energiájú fotonok esetén tehát nincs hullámhossz változás. A bejövő fényt hf energiájú fotonokra bontva a szórt részecskék száma arányos a fotonszámmal, azaz a Compton-szórás elemi folyamat, ami a részecske képet támasztja alá.

10.3. 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 elekromágneses sugárzási tér között termelődik meg a test által időegység alatt elnyelt és kisugárzott energia egyenlőségének elérésével. Kirchoff vizsgálta elsőként az egyensúly kérdését hullámhosszanként. Bevezette a frekvenciatartományban kisugárzott spektrális teljesítménysűrűség fogalmát.

$$u(T) = \int_0^\infty \rho(\nu, T) d\nu \tag{329}$$

Ahol u(T) a teljes energiasűrűség. A test egységnyi felületre eső, illetve onnét kisugárzott spektrális teljesítménye termikus egyensúlyban egyenlő. A beeső teljesítmény az energiasűrűség és a vákuumbeli fénysebesség szorzata. A beeső teljesítménynek a test A hányadát nyeli el, így az egyensúly:

$$E(\nu, T) = A(\nu, T)c\rho(\nu, T)$$
(330)

Ha egy test hőmérséklettől és frekvenciától függetlenül tökéletesen elnyeli a rácső sugárzást, akkor abszolút fekete testnek nevezzük.

A Stefan-Boltzman-törvény azt mondja ki, hgyo az összemisszió-képesség arányos a hőmérsékletének negyedik hatványával, azaz:

$$P = \sigma \cdot T^4 \tag{331}$$

Ahol P, a fekete test által egységnyi idő alatt, egységnyi felületen, valamennyi hullámhosszon kisugárzott összenergia, T a hőmérséklet, σ a Stefan-Boltzman-állandó:

$$\sigma = 5.672 \cdot 10^{-8} \frac{W}{m^2 K^4} \tag{332}$$

Wien 1896-ban a kis hullámhosszak esetén vett spektrális sűrűségre a $\frac{2hc^2}{\lambda^5}e^{-\frac{hc}{\lambda kT}}$ összefüggést vezette le. Wien eredménye a mérések szerint nagy energián téves. Wien ezen kívül az abszolút fekete test T hőmérsékletéhez tartozó spektrális emisszióképesség görbéjének maximumhelyére vonatkozóan állapított meg törvényt, mely szerint az abszolút fekete test emisszióképességének hullámhossz szerinti maximumhelye fordítottan arányos a hőmérséklettel (Wien-féle eltolódási törvény).

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 függelten rezgési módusok vagy normálkoordináták számának kétszerese adja a termodinamikai szabadsági fokok számát. A Rayleigh-Jeans sugárzási törvény:

$$\rho(\nu,T) = \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 k_B T \tag{333}$$

Ez alacson frekvenciák esetén jól adja vissza a méréseket, de a teljes térbeli energiasűrűségre végtelen értéket ad. A nagy frekvenciás korlátlan növekedést hívjuk ultraibolyakatasztrófának. Ezt követően Planck megadott egy interpoláló képletet, ami kis frekvencián a Rayleigh-Jeans, nagy frekvencián a Wien-törvényt adja vissza:

$$\rho(\nu, T) = \alpha \nu^3 \frac{1}{e^{\nu\beta/T} - 1}$$
(334)

ahol α és
 β két állandó, melyeket az adatokhoz lehet illeszteni.

10.4. Rutherford-kísérlet

Rutherford 1911-ben mérte az alfa-bomlásból származó részecskék aranyfólián való szóródásában a differenciális hatáskeresztmetszetet. A Thomson-modell alapján főleg kis szögű szórást vártak, de a részecskék nagyja visszaszóródott. Ezt valamilyen pontszerű maggal és annak centrális erőtérben való eltérülésével lehet magyarázni. Egy *E* energájú α részecske egy Z rendszámú, rögzített magot a kezdeti mozgási energia és a Coulomb-potenciál egyenlősége alapjná $d = \frac{2kZe^2}{E}$ távolságra tudná megközelíteni, ha b=0 impakt paraméterrel rendelkezik. Ezek alapján a differenciális hatáskeresztmetszet:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = k^2 \frac{Z^2 e^4}{4E^2} \cdot \frac{1}{\sin(\theta/2)^4} = \frac{d^2}{16\sin(\theta/2)^4}$$
(335)

Rutherford ezzel megegyező differenciális hatáskeresztmetszetet mért, ugyanis a besugárzott alfa részecskék nem tudták volna annyira megközelíteni egymást az aranymaggal, hogy a magerőnek szerepe legyen. Rutherford azt tudta megmondani, hogy az atommag sugara kisebb, mint $3 \cdot 10^{-14}$ méter. Nagy energián azonban nagy szögekre eltérést találtak a fenti formulától, ugyanis ekkor az impakt paraméter nem tekinthető pontszerűnek. Impakt paraméter a mag sugarának és magerő hatótávolságának összege. A Rutherford-féle atommodell lényege tehát, hogy a mag egy, az atom angström nagyságrendű méreténél tíz- vagy százezerszer kisebb objektum, az atom méretét pedig elhanyagolható tömegű elektronfelhő adja.

10.5. Milikan-kísérlet

Az elektron töltésének pontos meghatározását Robert Millikan 1910-ben elvégzett kísérlete adta, Homogén, de változtatható nagyságú elektromos térbe töltött olajcseppet juttatott. A cseppek mozgását megfigyelve azaz a sebessügket mérve, meghatározható az olajcsepp töltése. Feltételezve, hogy a kis, *m* tömegú cseppünk felöleti 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 mulekulák szabad úthossza, a súrlódási erő a Stokes-féle fékezőerőből meghatározható.

$$F = 6\pi\eta r v \tag{336}$$

A sebességgel arányós fékezőerő miatt a csepp egy idő után függőlegesen mozog egyenletes sebességgel. A nehézségi erővel egyensúlyt tart a levegő felhajtó
ereje és a súrlódási erő. Az olaj és a levegő sűrűségének ismeretéből meghatároz
ható a csepp sugara. A lemezek között d távolság van és akkora feszültséget kapc
solunk, hogy a cseppek lebegjenek, azaz egy cseppreqU/derőt fejtünk ki, ami egyensúlyt tart a felhajtó
erővel. Az értékének felhasználásával meghatározható az elektron töltése nagyság
rendileg: 10^{-19} C .

10.6. Davisson-Germer-kísérlet

A kísérletben visszavert elektronok intenzitásának a visszaverődési szögtől való függőségét mérték. Elektronnyalábot irányítottak egy nikkel céltárgyra, hogy az atomok elektromos terét, illetve a felület szerkezetét vizsgálják, a rugalmasan szórt elektronokat figyelve.

Ismert volt, hogy a röntgensugaraknál az interferenciamintázatban maximumok jelentkeznek. Ha ennek megfelelő mintázatokat találnak az elektron-szórásban, az azt jelenti, hogy elektron-interferencia jön létre, tehát az anyag hullámként viselkedett. Az erősítés feltétele:

$$2dsin(\theta) = n\lambda \tag{337}$$

Ahol θ a bejövő sugárzás kristálysíkkal bezárt szöge. Ezt valamint a hullámhosszra vonatkozó képleteket felhasználva, meghatározható, hogy:

$$\sqrt{U} = \frac{hn}{2dsin(\theta)\sqrt{2me}} = K \cdot n \tag{338}$$

Ahol K konstans. Ha fix θ szögnél vizsgáljuk a kilépő nyaláb intenzitását, akkor a gyorsítófeszültség gyökének függvényében maximumokat tapasztalunk, méghozzá éppen a fenti K egész számú többszöröseinél.

A Davisson-Germer-kísérlet a Compton-effektussal együtt igazolta de Broglie hipotézisét, miszerint minden anyag a foton hullám-részecske kettős természetét mutatja. A Davisson-Germer-kísérlet a hullámtermészetet igazolta.

10.7. Stern-Gerlach-kísérlet

Az impulzusmomentumhoz klasszikusan mágneses momentum is tartozik. A mágnseses momentum definíciója kör alakú áramhurokra:

$$\vec{\mu} = \frac{e\vec{L}}{2m} \tag{339}$$

Eszerint ha adott energiaszintű atom esetén a perdület iránya vagy nagysága más más értékeket vesz fel, akkor a mágneses momentum is megfelelő értékű lesz és ez mérhető.Ha a perdület nagysága vagy iránya kvantált, akkor egy atomnyaláb egyes atomjaira diszkrét, különböző mértékű erő hat, így a nyaláb diszkrét komponensekre eshet szét.

Ez alapján végezte el Stern és Gerlach 1922-ben a híres kísérletét. Inhomogén nagyságú, de mindenhol Z irányú B mágneses térben vezettek monoenergiás atomnyalábot, amelynek mágneses momentumára így erő hatott. Ekkor a v sebességgel l távolságot megtévő atomok θ eltérülési szöge így kapható meg:

$$\theta = \frac{\mu_z \nabla Bl}{mv^2} \tag{340}$$

Adott μ_z -hez adott eltérülés tartozik tehát.

A kérdés az volt, hogy abszolútértékben μ momentummal rendelkező ezüst atomnyaláb felhasad-e különböző diszkrét μ_z értékű nyalábokra, vagy a $\pm \mu$ között tetszőleges értékeket vesz-e fel. Elsőre túl nagy volt a felhasadás eredményeképpen létrejövő két folt és átfedtek, de utána a nyalábot leszűkítő rést kör alakúról vékony téglalapra cserélték és már megjelent a két különálló folt. Két nyaláb \Rightarrow a mágneses momentum kvantált.

10.8. Einstein – de Haas-kísérlet

Feltették, hogy a ferromágneses anyag mágnességét az atomok mágneses momentuma okozza, amelyet viszont a perdületük, és így ha átfordítjuk az elektromágneses polarizációját, akkor a perdület is megváltozik, amely megfigyelhető.

Ferromágnest függesztettek fel vékony torziós szálra, amelyre tükröket erősítettek, hogy a forgást 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:

$$\frac{\delta\mu_{teljes}}{\delta L_{teljes}} = \frac{2N\mu}{2NL} = \frac{\mu}{L} \tag{341}$$

ha N darab L perdületű μ mágneses momentumú atom található a rúdban. Igy a rúd megneses momentumának és a perdületének megváltozásán keresztül tulajdonképpen az atomok mágneses momentumának és perdületének arányát vizsgálták. Ha bevezetjük a μ_B Bohrmagnetont és a g giromágneses faktort, akkor:

$$\mu = g\mu_B l \tag{342}$$

ahol l-re igaz, hogy $L = \hbar l$. Ha feltesszük, hogy igaz az előbbi összefüggés, akkor a kísérletben a giromágneses faktort mérhetjük, mely értéke eltér egytől. A páros számra hasadás a Stern-Gerlach kísérletben, illetve az Einstein-de Haas kísrélet 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. Ugyan úgy a teljes értéke és egy vetülete egyszerre mérhető. $S = \hbar/2$ értéket vesz fel, az annak megfelelő kvantumszám s = 1/2. A spinhez tartozó mágneses momentumról kiderült, hogy $\mu = q\hbar/m$ nagyságú és a g giromágneses faktort bevezetve $\mu_b = e\hbar/2m$ miatt g = 2 adódik.

10.9. 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 tér \vec{B} kölcsönhatásaként fellépő energia okozza:

$$\Delta E = -\vec{\mu}\vec{B} \tag{343}$$

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 a merőleges a pálya a mágneses térre, akkor a ΔE energia pozitív vagy negatív lesz, attól függően, hogy az elektron mozgása a pálya mentén óramutató járásával megegyező vagy ellenkező. Ha a mágneses tér a pálya síkjába esik, akkor pedig a Lorentz-erő átlaga egy kürbejárás során zérus lesz és emiatt $\Delta E = 0$ lesz. Ez az érvelés minden esetben a spektrumvonalak hármas felhasadására vezet.

11. A kvantummechanika alapjai (Csillag Barnabás)

A kvantummechanika matematikai háttere, kvantummechanikai reprezentációk. Határozatlansági reláció, szabad részecske hullámfüggvénye, szuperpozíció. Anyaghullámok, valószínűségi értelmezés, a fizikai állapot leírása. Fizikai mennyiségek operátorai, sajátfüggvények, sajátértékek. Schrödinger-egyenlet és szeparálása. Impulzusmomentum-operátor, sajátértékei, sajátfüggvényei. Spin. Korrespondanciaelv. Ehrenfest-tétel.

11.1. A kvantummechanika matematikai háttere, kvantummechanikai reprezentációk

A **kvantummechanika első posztulátuma** a következő. A fizikai állapotok egy komplex test feletti Hilbert-tér elemei. Reprezentálhatók $\psi \in \mathcal{H}$ -val, de ψ nem feltétlenül fizikai. A Hilbert tér egy vektortér, így a következő tulajdonságokkal rendelkezik:

- ha $\psi_1, \psi_2 \in \mathcal{H}$, akkor $\alpha \cdot \psi_1 + \beta \cdot \psi_2 \in \mathcal{H} \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{C}$,
- $\exists \ \emptyset$, amelyre igaz, hogy $\ \emptyset + \psi = \psi + \emptyset = \psi \quad \forall \psi \in \mathcal{H}$,
- van skalárszorzat: ha $\psi_1, \psi_2 \in \mathcal{H}$, akkor $(\psi_1, \psi_2) \in \mathbb{C}$.

A skalárszorzat tulajdonságai:

- lineáris a második komponensében: $\psi_1, \psi_2, \psi_3 \in \mathcal{H}, \alpha, \beta \in \mathbb{C}$ esetén $(\psi_1, \alpha \cdot \psi_2 + \beta \cdot \psi_3) = \alpha \cdot (\psi_1, \psi_2) + \beta \cdot (\psi_1, \psi_3),$
- konjugált lineáris az első komponensében: $\psi_1, \psi_2, \psi_3 \in \mathcal{H}, \alpha, \beta \in \mathbb{C}$ esetén $(\alpha \cdot \psi_1 + \beta \cdot \psi_2, \psi_3) = \alpha^* \cdot (\psi_1, \psi_3) + \beta^* \cdot (\psi_2, \psi_3),$
- pozitív: $\psi \in \mathcal{H}$ esetén $(\psi, \psi) \ge 0$,
- $\psi_1, \psi_2, \in \mathcal{H}$ függetlenek, ha $\forall \alpha, \beta \in \mathbb{C}, \alpha, \beta \neq 0$ -ra $\alpha \cdot \psi_1 + \beta \cdot \psi_2 \neq 0$,
- $\psi_1, \psi_2... \in \mathcal{H}$ állapotok ortogonálisak, ha $(\psi_i, \psi_j) = 0 \ \forall i \neq j$ -re.

Definíció szerint egy teljes ortogonális $\Phi_i \in \mathcal{H}$ halmazt bázisnak nevezünk a Hilbert téren. Ezen bázison minden állapot kifejthető. Ennek interpretációja: Φ_i bázisvektorok egy fizikai mennyiséghez tartozó lehetséges állapotokat írják le. A mennyiség mérése után a bázisvektorok valamelyike írja le a rendszer állapotát. Kvantummechanikában rendszerint ortonormált bázist alkalmazunk, továbbá normált $\Psi \in \mathcal{H}$ állapotokat:

- $(\Phi_i, \Phi_j) = \delta_{i,j},$
- $(\psi, \psi) = 1$,
- $P(\psi \to \Phi_i) = |(\Phi_i, \psi)|^2$ (ez Φ_i mérésének valószínűsége).

A kvantummechanika második posztulátuma: minden fizikai mennyiség megfeleltethető egy hermitikus operátornak a Hilbert-téren. Legyen $\hat{A} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ hermitikus operátor. Egy $\psi \in \mathcal{H}$ akkor hordozza az \hat{A} -hoz tartozó fizikai mennyiség egy határozott állapotát "a" értékkel, ha eleget tesz $\hat{A}\psi = a \cdot \psi$ sajátértékegyenletnek.

A hermitikus operátorok lineáris leképezések, amelyek várható értéke a valós számok halmazában van, sajátállapotaik pedig ortogonálisak. A hermitikus operátorok önadjungáltak: $\hat{A}^+ = \hat{A}$. Egy, a teljes Hilbert-téren értelmezett hermitikus operátor sajátállapotai bázist alkotnak a Hilbert-téren. Ebből következik, hogy ha $\hat{A} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ hermitikus operátor *i*-edik sajátértéke a_i , és az ehhez tartozó sajátállapota pedig Φ_i , akkor tetszőleges $\psi \in \mathcal{H}$ kifejthető a Φ_i -k bázisán:

$$\psi = \sum_{i} \psi_i \Phi_i \quad \to \quad \psi_i = (\Phi_i, \psi). \tag{344}$$

Az eddigieket interpretálhatjuk úgy, hogy a Φ_i állapot mérésének valószínűsége egyben a_i fizikai mennyiség mérésének valószínűsége, tehát $P(a_i, \psi \to \Phi_i) = |(\Phi_i, \psi)|^2$. Ebből következik, hogy az Â-hoz tartozó fizikai mennyiség várható értéke egy ψ állapotban:

$$\langle A \rangle_{\psi} = \sum_{i} a_{i} P(\psi \to \Phi_{i}) = \sum_{i} a_{i} |(\Phi_{i}, \psi)|^{2}.$$
(345)

A kvantummechanikában elterjedt formalizmus a Dirac-féle jelölésrendszer:

$$\psi \rightarrow |\psi\rangle, \langle\psi|,$$
 (346)

$$(\psi,\psi) \rightarrow \langle \psi | \psi \rangle,$$
 (347)

$$\langle A \rangle_{\psi} \rightarrow \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle.$$
 (348)

Folytonos bázis esetén a szorzás a következőképpen reprezentálható a Hilbert-téren (egy dimenziós példa):

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t) \cdot \psi(x,t) dx$$
(349)

11.2. Határozatlansági reláció

Két tetszőleges $\mathcal{H} \to \mathcal{H}$ operátor kommutátora a következő: $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$.

Legyenek $\hat{A}, \hat{B} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ folytonos bázissal rendelkező, különböző fizikai mennyiségekhez tartozó hermitikus operátorok. Ezek várható értéke tetszőleges $\psi \in \mathcal{H}$ állapot esetén kiszámítható, ahogy a várható értékük szórása is:

$$\sigma_A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}, \quad \sigma_B = \sqrt{\langle B^2 \rangle - \langle B \rangle^2}.$$
 (350)

Az \hat{A} , \hat{B} operátorokra vonatkozó határozatlansági reláció levezethető a Schwarz-egyenlőtlenség felhasználásával: $\forall \psi, \psi' \in \mathcal{H}$ -ra

$$|(\psi, \psi')|^2 \le (\psi, \psi) \cdot (\psi', \psi').$$
 (351)

A határozatlansági reláció:

$$\sigma_A \cdot \sigma_B \ge \frac{1}{2} (\psi, [\hat{A}, \hat{B}] \psi). \tag{352}$$

Ennek következménye, hogy ha $[\hat{A}, \hat{B}] = \emptyset$, akkor a nulla az alsó korlátja az egyenlet jobb oldalának, hiszen kommutáló operátorokra létezik olyan Φ_i bázis, hogy $\hat{A}\Phi_i = a_i\Phi_i, \hat{B}\Phi_i = b_i\Phi_i$. Vagyis ha a rendszer egy ilyen Φ_i -vel írható le, akkor mindkét fizikai mennyiségnek határozott (a_i, b_i) értéke van.

A határozatlansági relációból következik az is, hogy nem kommutáló operátorok által leírt fizikai mennyiségeket nem lehet egyszerre teljesen pontosan mérni. Mivel a helyoperátor (\hat{x}) és az impulzusoperátor (\hat{p}) kommutátora $[\hat{x}, \hat{p}] = i \cdot \hbar \cdot \hat{I}$, ahol \hat{I} az identitásoperátor, ezért

$$\sigma_x \cdot \sigma_p \ge \frac{\hbar}{2}.\tag{353}$$

Ezt hívják Heisenberg-féle határozatlansági relációnak. Szemléletes jelentése, hogy nem lehet teljesen pontosan egyszerre meghatározni egy részecske helyét és impulzusát, a két érték hiba szorzatának alsó korláta $\frac{\hbar}{2}$.

A Hamilton-operátor sajátértéke az energia, és a helyhez, impulzushoz hasonlóan bevezethető egy olyan operátor, amelynek sajátértéke az idő. Jelölje σ_E egy részecske energiájának mérési hibáját, és ugyanígy σ_t az időmérés hibáját. Ezekre az előző esethez teljesen hasonló módon levezethető, hogy

$$\sigma_E \cdot \sigma_t \ge \frac{\hbar}{2},\tag{354}$$

amely a határozatlansági reláció egy másik aspektusa.

11.3. Szabad részecske hullámfüggvénye

A legegyszerűbb kvantummechanikai rendszer a szabad részecske modellje. Ebben az esetben egy olyan részecskét akarunk leírni, amely állandó sebességgel halad egy rögzített irányba. Erre megfelelő lehet a síkhullám megoldás:

$$\psi(\mathbf{r},t) \sim e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{r}\cdot\mathbf{p}-Et)},\tag{355}$$

ahol $E = \frac{p^2}{2m}$ a szabad részecske kinetikus energiája, a \hbar -al való osztás pedig azért szükséges, hogy az exponensben dimenziótlan szám legyen. Ezen megoldással az a probléma, hogy $\psi(\mathbf{r}, t)$ nem normálható. Az állapot (amelyet itt hullámfüggvénynek is szokás nevezni) úgy vállhat normálhatóvá, ha nem egy állandó amplitudójú síkhullámot veszünk, hanem egy hullámcsomagot:

$$\psi(\mathbf{r},t) \sim \int_{-\infty}^{\infty} \phi(\mathbf{k}) \cdot e^{i(\mathbf{r}\cdot\mathbf{k}-\omega t)} d^3k, \qquad (356)$$

ahol $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$, és $E = \hbar \cdot \omega$. Ezen megoldás megfelelő $\phi(\mathbf{k})$ esetén már normálható.

Kvantummechanikában az állapotokat az adott rendszerre felírható Schrödinger-egyenlet határozza meg. A szabad részecske hullámfüggvényére levezethető a Schrödinger-egyenlet speciálisan ezen rendszerre vonatkozó formája:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \,\Delta\,\psi(\mathbf{r}, t),\tag{357}$$

ahol jobb oldalon
a $\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle$ a Hamilton-operátor szabad részecskére vonatkozó formája.

11.4. Anyaghullámok

A fény kettős természetére több elméleti leírás és kísérlet is utal. Ilyen a Maxwellegyenletek hullám megoldása, amely alapján a fény elektromágneses hullám, de ilyen a fotoeffektus jelensége, amely alapján a fény egy részecske (foton) jól definiált energiával.

de Broglie-féle anyaghullám hullám elméletnek hívjuk azt a feltevést, miszerint minden részecskének vannak egyszerre hullám tulajdonságai is. Ha veszünk egy (11.3) fejezetben leírt szabad részecskét, akkor amennyiben részecskeként kívánjuk leírni, akkor vehetjük úgy, hogy E energiával és **p** impulzussal rendelkezik. Amennyiben viszont hullámként akarjuk leírni, akkor tekinthetjük egy **k** hullámszámú, ω frekvenciájú síkhullámnak.

11.5. Valószínűségi értelmezés, szuperpozíció, fizikai állapot leírása

Sokáig azt volt az elterjedt értelmezés, hogy $\psi(\mathbf{r}, t)$ egy kiterjedt részecskét ír le olyan módon, hogy $|\psi|^2$ a részecske sűrűségeloszlását adja. Born mutatot rá, hogy ezen interpetáció nem lehet helyes, hiszen részecskék szórása esetén ψ a szórócentrumtól távol szétterjed ($|\psi|^2 \sim \frac{1}{r^2}$), de a kísérletek mindig egész elektronokat mutattak.

Born interpretációja szerint $|\psi|^2$ nem a részecske sűrűségeloszlása, hanem a megtalálási valószínűségének eloszlása. Így egy kísérlet nem determinált, hanem különböző eredmények különböző valószínűséggel mehetnek végbe, ám ha sokszor végezzük el az adott kísérletet, akkor az eredmény visszaadja a valószínűségi eloszlásfüggvényt, így igazolja Born értelmezését. Ezen értelmezés alapján annak valószínűsége, hogy a mérés során egy vizsgált ΔV térfogatban találjuk a részecskét:

$$\Delta P = |\psi|^2 \Delta V \quad \to \quad dP = |\psi|^2 d^3 r, \tag{358}$$

ahol az utóbbi esetben már $\Delta V \to 0$.

Vizsgáljuk meg, hogy értelmes-e ez az interpretáció! Az biztos, hogy $|\psi|^2 \ge 0$, tehát negatív megtalálási valószínűségről nem lehet szó. Az állapotok normáltságát vizsgáljuk most először egy adott időpontban, mondjuk t = 0-ban. A részecskék hullámfüggvényét meghatározó Schrödinger-egyenlet lineáris, így ha találtunk egy ψ megoldást, akkor $\lambda \cdot \psi$, $\lambda \in \mathbb{C}$ is megoldás. Tegyük fel, hogy van egy $\psi \in \mathcal{H}$ hullámfügyvényünk, amelyre

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\mathbf{r}, t=0)|^2 d^3 r = N,$$
(359)

ahol N véges. Ekkor a linearitás miatt áttérhetünk egy másik hullámfüggvényre, amely már normált: $\psi'(\mathbf{r}, t = 0) = \frac{\psi(\mathbf{r}, t=0)}{\sqrt{N}}$, így

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi'(\mathbf{r}, t=0)|^2 d^3 r = 1.$$
(360)

A linearitásból következik, hogy N normálási faktor nem függhet az időtől. Vagyis ha létezik normálható megoldás, akkor teljesíthető az a feltétel, hogy $\int |\psi|^2 d^3r = 1$, és csak ezen megoldásnak van értelme fizikailag.

Fontos hangsúlyozni, hogy a Born-féle interpretáció szerint nem tudhatjuk, hogy hol van egy részecske, amíg meg nem mérjük a helyét - ugyanígy nem tudhatjuk az egyéb jellemzőit (impulzusát, spinjét - lásd később), amíg le nem mérjük azokat. Csak azt tudjuk megmondani, hogy adott időpontban adott állapotban mekkora valószínűséggel van - erre lehet azt mondani, hogy a részecske a lehetséges állapotok szuperpozíciójában van a mérésig. Azonban amint lemértük az adott jellemzőt, a hullámfüggvény ott összeomlik, és a részecskét onnantól a mért érték jellemzi.

11.6. Fizikai mennyiségek operátorai

A kvantummechanika második posztulátuma kimondja, hogy minden fizikai mennyiség megfeleltethető egy hermitikus operátornak a Hibert-téren. Ha ezen operátorok, illetve sajátállapotaik folytonosak, akkor sajátértékeik is azok. Legyen $\hat{A} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ egy fizikai mennyiséghez tartozó operátor folytonos bázison! Ekkor a várható értéke a következő módon számolható, ha a rendszer $\psi \in \mathcal{H}$ hullámfüggvénnyel jellemezhető:

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (\hat{A} \psi) d^3 r.$$
(361)

A helyoperátor várható értéke:

$$\langle r_i \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \cdot r_i \cdot \psi \ d^3r.$$
(362)

Síkhullámra könnyű levezetni az impulzusoperátor sajátértékét:

$$\hat{p}\psi = -i\cdot\hbar\cdot\partial_i\psi. \tag{363}$$

Belátható, hogy ez általános ψ hullámfüggvényre is igaz, így az impulzus várható értéke

$$\langle p_i \rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \cdot \partial_i(\psi) \ d^3r.$$
 (364)

11.7. A Schrödinger-egyenlet és szeparálása

A Schrödinger-egyenlet alakja általános időfüggetlen potenciál esetén:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \,\Delta\,\Psi(\mathbf{r},t) + V(x)\cdot\Psi(\mathbf{r},t) = \hat{H}\Psi(\mathbf{r},t),\tag{365}$$

ahol $\psi(\mathbf{r}, t) \in \mathcal{H}$. Amikor a Hamilton-operátor nem függ az időtől, akkor a hullámfüggvény felírható szorzat alakban:

$$\Psi(\mathbf{r},t) = u(t) \cdot \psi(\mathbf{r}), \tag{366}$$

ebből kifolyólag a Schrödinger-egyenlet szeparálhatóvá válik. Ilyen módon az egyenlet megoldásának első lépése lehet, hogy megkeressük a Hamilton-operátor sajátértékeit és $\psi(\mathbf{r})$ sajátvektorait. A Hamilton-operátor sajátértékegyenletét hívjuk időfüggetlen Schrödingeregyenletnek:

$$\hat{H}\psi_n(\mathbf{r}) = E_n\psi_n(\mathbf{r}),\tag{367}$$

ahol a $\psi_n(\mathbf{r})$ -ek a Hamilton-operátor sajátállapotai, E_n -ek pedig az ezen sajátállapotokhoz tartozó sajátértékek, vagyis az energia lehetséges értékei.

Az előző három egyenletet megvizsgálva leolvasható, hogy a hullámfüggvény időfüggő része felírható a következő alakban:

$$\hat{u}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}t\cdot\hat{H}},\tag{368}$$

ezért felfogható egy időfejlesztő operátornak is. Mivel a Scrödinger-egyenlet lineáris, ezért a teljes megoldása az összes megoldás lineáris kombinációja::

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \sum_{n} c_n e^{-\frac{i}{\hbar}t \cdot E_n} \cdot \psi_n(\mathbf{r}), \qquad (369)$$

ahol a c_n együtthatókat az állapotok normálásából lehet meghatározni.

11.8. Impulzusmomentum-operátor, sajátértékei, sajátfüggvényei

Tömegpont impulzusmomentumának definíciója klasszikus mechanikában (az Einsteinkonvenció használatával):

$$L_i = \varepsilon_{i,j,k} x_j p_k. \tag{370}$$

Kvantummechanikában a pályaimpulzus
momentum ugyanígy adható meg, csak itt \hat{x} a hely é
s \hat{p} az impulzus operátorok.

Levezethető, hogy bármilyen \hat{p} -ből
, \hat{x} -ből álló \hat{v} operátorra igaz, hogy az impulzus
momentummal való kommutátora

$$[\hat{L}_i, \hat{v}_j] = i\hbar\varepsilon_{i,j,k}\hat{v}_k,\tag{371}$$

és bármilyen x^2 -ből, p^2 -ből előállított \hat{U} operátorra igaz, hogy kommutál az impulzusmomentummal: $[\hat{L}, \hat{U}] = 0$. Ebből következik, hogy ha $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \triangle + V(r)$, és ha V(r) potenciál centrális, akkor

$$[\hat{L}, \hat{H}] = 0.$$
 (372)

Ha az impulzusmomentum kommutál a Hamilton-operátorral, akkor létezik közös sajátállapotrendszerük.

Szintén levezethető, hogy $[\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0$, így \hat{L}^2 -nek, \hat{L}_i -nek és \hat{H} -nak létezik közös sajátállapotrendszere. A perdület z komponense:

$$L_z = xp_y - yp_x = \frac{\hbar}{i} \cdot \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right).$$
(373)

Térjünk át gömbi koordinátarendszerbe:

$$x = r\sin(\theta)\cos(\phi), \quad y = r\sin(\theta)\sin(\phi), \quad z = r\cos(\theta).$$
(374)

Ezen rendszerben $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}$, hiszen

$$\frac{\partial}{\partial \phi} = \frac{\partial x}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial z} = x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}.$$
(375)

Innen azt felhasználva, hogy \hat{L}_z hermitikus operátor levezethető, hogy a perdület z komponensének sajátértékei $m_z \cdot \hbar$ -k, ahol az m_z -k egész számok. Ez általánosítható úgy, hogy a perdület minden komponensének sajátértékei egész számok \hbar -szorosai. Ennek következménye, hogy kvantummechanikában az impulzusmomentum minden komponense csak jól meghatározott diszkrét értékeket vehet fel. Az impulzusmomentum operátor sajátfüggvényei a gömbfüggvények.

11.9. Spin

Kvantummechanikai rendszerek forgatási szimmetriáiból (vagyis abból, hogy egy jelenség leírása nem függhet attól, hogy egy adott koordinátarendszerben, vagy egy ahhoz képest elforgratott koordinátarendszerben van reprezentálva) levezethető egy \hat{J} teljes impulzusmomentum, amely sok esetben nem egyenlő az eddig tárgyalt \hat{L} pálya-impulzusmomentummal. \hat{J} -re minden igaz, ami \hat{L} -ről a (11.8) fejezetben leírásra került, hiszen \hat{J} is impulzusmomentum.

Definíció szerint egy részecske spinének a rá felírható teljes impulzusmomentum és pálya impulzusmomentum különbségét hívjuk:

$$\hat{S} = \hat{J} - \hat{L}$$

ahol \hat{S} sajátértékei $s \cdot \hbar$, ahol az s értékek lehetnek egészek vagy félegészek részecskétől függően. A spin a pálya impulzusmomentummal ellentétben a részecske saját, belső tulajdonsága.

Belátható, hogy $[\hat{J}^2, \hat{J}_3] = 0$, vagyis \hat{J}^2 -nek és \hat{J}_3 -nak létezik közös sajátállapot rendszere. Ezen sajátállapotokat jelöljük $|j, m\rangle$ -el! Ekkor a sajátértékeket írhatjuk a következő alakban:

$$\hat{J}^2 |j,m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j,m\rangle, \qquad (376)$$

$$\hat{J}_3 |j,m\rangle = \hbar m |j,m\rangle.$$
(377)

A $\hat{J}^{\pm} = \hat{J}_1 \pm i \hat{J}_2$ operátorok bevezetésével, és ezek, illetve a \hat{J}_3 , \hat{J}^2 kommutátorainak vizsgálatával belátható, hogy rendszertől függő nagyságig j egész és félegész értékeket, továbbá m = -j, -j + 1, ..., j - 1, j értékeket vehet fel.

11.10. Korrespodencia elv

A klasszikus fizika és a kvantummechanika közötti kapcsolatot Niels Bohr fogalmazta meg az úgynevezett korrespondencia-elvben, mely szerint mindkét elmélet bizonyos körülmények között azonos eredményre vezet. Nagy részecskeszámok esetén a kvantummechanika következtetéseinek és eredményeinek át kell menniük a klasszikusfizika 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.

11.11. Ehrenfest-tétel

Ha egy rendszer nem stacionárius, akkor mennyiségeinek várható értéke időben változhat. Legyen \hat{F} egy fizikai mennyiséghez tartozó operátor a Hilbert-téren, és legyen ennek sajátértéke f:

$$\frac{\partial \langle f \rangle}{\partial t} = \langle \frac{\partial \psi}{\partial t} | \hat{F} | \psi \rangle + \langle \psi | \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{F} | \frac{\partial \psi}{\partial t} \rangle$$
(378)

Az időfüggő Schrödinger-egyenletet (365) felhasználva:

$$\frac{\partial \langle f \rangle}{\partial t} = \langle \psi | \left(\frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}] \right) | \psi \rangle \,. \tag{379}$$

Tegyük fel, hogy az operátor nem függ az időtől, vagyis $\frac{\partial \hat{F}}{\partial t} = 0$:

$$\frac{\partial \langle f \rangle}{\partial t} = \langle \psi | \left(\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{F}] \right) | \psi \rangle \,. \tag{380}$$

Amennyiben az \hat{x} helyoperátort vizsgáljuk, úgy lánc szabállyal levezethető, hogy

$$\frac{\partial \langle x \rangle}{\partial t} = \frac{1}{m} \langle p_x \rangle. \tag{381}$$

Az eredmény a klasszikus $\frac{\partial x}{\partial t} = v = \frac{p}{m}$ eredményhez hasonló. Ha az impulzus várható értékének időbeli változását vizsgáljuk, akkor a Hamilton-operátorból elhagyhatjuk a kinetikus tagot, mivel az kommutál az impulzus operátorral. Ha az erőtér konzervatív, akkor a potenciális energia operátora egyszerű függvényszorzást csinál, így

$$\frac{\partial \langle p_x \rangle}{\partial t} = \langle \psi | \left(\frac{i}{\hbar} [\hat{V}, \hat{p_x}] \right) | \psi \rangle = - \cdot \langle \psi | \frac{\partial V(x)}{\partial x} | \psi \rangle.$$
(382)

Vagyis a potenciál negatív gradiense az erő, pont úgy, mint a klasszikus mechanikában. Azt kaptuk tehát, hogy ha a változások lassúak, vagyis megtehetjük a $\frac{\partial \hat{x}}{\partial t} = 0, \frac{\partial \hat{p}_x}{\partial t} = 0$ elhanyagolásokat, akkor visszakapunk két egyenletet (381, 382) a klasszikus mechanikából.

12. Atom- és molekulaszerkezet

Atomi energiaszintek, emissziós, abszorpciós spektrumok. Bohr-modell. A hidrogénatom spektruma. Felhasadások: finomfelhasadás, hiperfinom felhasadás, Lamb-eltolódás. Spektrumvonalak felhasadása külső térben: Stark- és Zeeman-effektusok. Kvantummechanikai közelítő módszerek. Fermi-féle aranyszabály, alagútjelenség. He-atom, Kétatomos molekulák, Paulielv

12.1. Atomi energiaszintek, emisszós és abszorpciós spektrumok

Az atomi színképet (spektrumot) viszonylag korán felfedezték, és anyaganalízisre már azelőtt használták, hogy az atomok mélyebb ismerete megmagyarázta volna létezésüket. A spkterumvonalak elméleti leírása Bohr és Ritz nevéhez köthető, magyarázatuk szerint vonalakat a diszkrét (kvantumos) atomi energiaszintek létezése okozza. Az emissziós (fotont bocsát ki az atom, legerjesztődik) és abszorpciós (az atom elnyel egy fotont, gerjesztődik) vonalak megjelenését az energiaszintek közti átmenetek okozzák. Éppen emiatt az elnyelt vagy kibocsátott foton energiája ezen energiaszintek kölünbésége lesz ($n \leftrightarrow n'$ átmenet, $E_{n'} > E_n$):

$$E_{\gamma} = h\nu = E_{n'} - E_n . \tag{383}$$

Az energiaszintek jellemzésére kvantumszámokat haszálunk, melyek az alábbiak (továbbiakat is definiálhatunk):

főkvantumszám	$\mid n$	$1, 2, 3, \ldots$
mellékkvantumszám / pálya impulzusmomentum	l	$0, 1, \ldots, n-1$
mágneses kvantumszám	m_l	$-l, -l+1, \ldots, l-1, l$
spin kvantumszám / saját impulzusmomentum	s	$0, \frac{1}{2}, 1, \dots$
	m_s	$-s, -s+1, \ldots, s-1, s$
teljes impulzusmomentum	j	$ l-s ,\ldots,l+s$
	m_i	$-j,-j+1,\ldots,j-1,j$

12.2. Bohr-modell, a hidrogénatom spektruma

Bohr arra következtetett, hogy mivel h Planck-állandó dimenziója impulzusmomentum, így legyen az kvantált. Ez alapján pl. a hidrogénatom elektronjának impulzusmomentuma:

$$L = mvr = n\hbar \qquad \Longrightarrow \qquad v = \frac{n\hbar}{mr} ,$$
 (384)

ahol $\hbar = h/(2\pi)$ a redukált Planck-állandó (ennek értéke nem triviális, pl. a spketrumvonalakra felírt összefüggés klasszikus $n \to \infty$ határesetéből kapható meg). Legegyszerűbb eset, ha az elektron körpályán kering a proton körül (ez maga a Bohr-modell). A centripetális erő szerepét a Coulomb-erő fogja betölteni (legyen $1/(4\pi\varepsilon_0) = k = 1$):

$$F_{\rm cp} = F_{\rm C} \tag{385}$$

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{m\frac{n^2\hbar^2}{m^2r^2}}{r} = \frac{Ze^2}{r^2} \implies r = \frac{n^2\hbar^2}{Ze^2m} \implies v = \frac{Ze^2}{n\hbar} ,$$

ahol megjelenik $r = r_0$ Bohr-sugár (Z = 1, n = 1 és $k \neq 1$). Az elektron energiája ez alapján kvantált lesz, és felírható a kinetikus és elektromos energia összegeként:

$$E_n = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{Ze^2}{r} = \frac{1}{2}m\frac{Z^2e^4}{n^2\hbar^2} - m\frac{Z^2e^4}{n^2\hbar^2} = -\frac{mZ^2e^4}{2n^2\hbar^2} \propto \frac{1}{n^2} \,. \tag{386}$$

A kibocsátott foton energiája pl.

$$E_{\gamma} = h\nu = E_{n'} - E_n = \frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2}\right).$$
(387)

Ha $k \neq 1$, akkor a zárójel előtt megjelenő konstans $mZ^2e^4/(8\varepsilon_0^2h^2)$ lesz. Definiálható az ún. term kifejezés, mely alapján a foton λ hullámhossza:

$$T_n = -\frac{E_n}{hc} \implies \frac{1}{\lambda} = \frac{mZ^2 e^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c} \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2}\right) = R_\infty \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2}\right).$$
(388)

 R_{∞} az ún. Rydberg-állandó.

12.3. Felhasadások: finomfelhasadás, hiperfinom felhasadás, Lambeltolódás

Eddig az ún. durva szerkezetről volt szó, de az energiaszintek pontosabb vizsgálata során arra lehetünk figyelmesek, hogy a szintek tovább is hasadnak.

12.3.1. Finomfelhasadás

A finomfelhasadásnak alapvetően három oka van.

• Figyelembe kell venni relativisztikus korrekciókat:

$$E_{\rm kin} = \frac{p^2}{2m} \longrightarrow \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} - mc^2 .$$
(389)

Ezen kifejezésnek kell vennünk a sorfejtését:

$$E_{\rm kin} \approx \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2} + \dots ,$$
 (390)

ahol a megjelenő második tag várható értékét kell meghatározni (pontosabb számításokhoz a Dirac-egyenletre van szükség). • A spin-pálya kölcsönhatást is figyelembe kell venni. Ha a koordinátarendszerünket áttranszformáljuk az elektron mozgó rendszerébe, akkor az atommagnak megjelenik a mágneses tere, amivel kölcsönhat az elektron spinje. A megjelenő energiatag μ B lesz. A mag mágneses tere (ld. Lienard–Wiechert-potenciál, de nem akarod látni, és $\mathbf{E} = -\nabla V = -ke\mathbf{r}/r^3$):

$$\mathbf{B} = \frac{1}{c^2} \mathbf{v} \times \mathbf{E} = -\frac{ke}{c^2 r^3} \mathbf{v} \times \mathbf{r} = -\frac{ke}{mc^2 r^3} \mathbf{p} \times \mathbf{r} = \frac{ke}{mc^2 r^3} \mathbf{L} .$$
(391)

Az elektron spinből származó mágneses momentuma:

$$\boldsymbol{\mu} = -g_s \mu_B \frac{\mathbf{S}}{\hbar} \ . \tag{392}$$

Megjelenik a g_s giromágneses faktor is, mely elektronra ≈ 2 . Ezen felül látható, hogy megkaptuk a kölcsnható tagot:

$$\mu \mathbf{B} \propto \mathbf{SL}$$
 . (393)

A kapott kifejezés várható értékét kell kiszámítani ebben az esetben is (természetesen a pontosabb számításokhoz ismét a Dirac-egyenlet kellene). A várható érték $(\mathbf{L}+\mathbf{S})^2 = \mathbf{J}^2$ kifejezés segítségével kapható meg.

• A Dirac-egyenlet nemrelativisztikus közelítéséből kapható meg az ún. Darwin-tag. Ennek az elektronok relativisztikus rezgéséhez (Zitterbewegung) van köze. A rezgés miatt elmozdul ($\delta \mathbf{r}$) az elektron, és máshogy hat a potenciál:

$$\delta V = V(\mathbf{r} + \delta \mathbf{r}) - V(\mathbf{r}) \approx \delta \mathbf{r} \nabla V + \frac{1}{2} (\delta \mathbf{r} \nabla)^2 V + \dots \propto \Delta V .$$
(394)

A végeredmény az energiaszintek j teljes impulzusmomentum szerinti felhasadása lesz.

12.3.2. Hiperfinom felhasadás

Az elektron a magspinből adódó mágneses teret is érzi. A spin-pálya kölcsönhatáshoz hasonló jelenség érhető tetten, az energiajárulék $\boldsymbol{\mu}_e \mathbf{B}_p$ lesz. A mag mágneses momentuma (a saját g_p giromágneses faktorával)

$$\boldsymbol{\mu}_p = \mu_N g_p \frac{\mathbf{S}_p}{\hbar} \ . \tag{395}$$

A Wigner–Eckart-tétel miatt az elektron mágneses momentuma is átírható (megjelenik a g_{jl} Landé-faktor):

$$\boldsymbol{\mu}_{e} = \frac{e}{m} (\mathbf{L} + g_{s} \mathbf{S}) = \frac{e}{m} g_{jl} \mathbf{J} .$$
(396)

Látható, hogy

$$\boldsymbol{\mu}_e \mathbf{B}_p \propto \mathbf{J} \mathbf{S}_p \,. \tag{397}$$

Ebben az esetben a várható érték majd $(\mathbf{J} + \mathbf{S}_p)^2 = \mathbf{F}^2$ kifejezésből kapható meg, ahol **F** egy "még teljesebb" impulzusmomentum. A pontos számítások a kvantum elektrodinamikán keresztül lehetségesek.

12.3.3. Lamb-eltolódás

A Lamb-eltolódás egy kvantumtérelméleti eredmény. Alapvetően ez is három jelenségre vezethető vissza.

- A vákuumpolarizáció során a fotonok bármikor átalakulhatnak egy elektron-pozitron párrá, melyek majd egyből újra egyesülhetnek.
- Az elektron tömege és töltése bármikor csökkenhet, ha kibocsát magából egy fotont, melyet majd később újra elnyel. Ez a határozatlanság eredménye. A kibocsátott virtuális fotonok "körbelengik" az elektronokat.
- Anomális mágneses momentum. Az elektron kibocsát egy fotont, majd kölcsnhat egy másikkal, és újra elnyeli az első kibocsátottat.

A hatótávolság kicsi, így főleg az s-pályát érinti a hatás. A potenciál – hasonlóan a Darwintaghoz – fluktuál, és ebből ered a felhasadás.

12.4. Sptekrumvonalak felhasadása külső térben: Stark- és Zeemaneffektus

12.4.1. Zeeman-effektus

Zeeman-effektus esetén az energiaszintek külső mágneses tér hatására hasadnak fel. A jelenség a perturbációszámítás segítségével vizsgálható. A Zeeman-effektus tárgyalása során megkülönböztethetünk "erős" és "gyenge" tér közelítést, ami azt jelenti, hogy a *j*-függő finomfelhasadás elhanyagolható-e. Az alábbi táblázat azt mutatja, hogy különböző szerkezetű atomoknál milyen módon függ az energia az egyes kvantumszámoktól.

	H-atom	alkáli fémek
gyenge tér	E_{nj}	E_{njl}
erős tér	E_n	E_{nl}

Alkáli fémek esetén megjelenik *l*-függés is, ez centrális potenciál sérülésének tudható be. Gyenge tér esetén a perturbáló Hamilton-operátor: $\Delta \hat{H}_B = -\hat{\mu} \mathbf{B}$. Alkáli fémekre látható, hogy az energia: E_{njl} , míg a sajátfüggvény legyen $|\psi_{njl}^m\rangle$. A sajátfüggvények konkrét alakjára nincs szükség, elég tudni, hogy ortonormált rendszert alkotnak. A mágneses momentum az alábbi alakban írható:

$$\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_l + \boldsymbol{\mu}_s = -\frac{e}{2m} (\hat{\mathbf{L}} + g_s \hat{\mathbf{S}}) .$$
(398)

A perturbáció mátrixa:

$$W_{mm'} = \left\langle \psi_{njl}^{m'} \middle| \frac{e}{2m} (\hat{\mathbf{L}} + g_s \hat{\mathbf{S}}) \mathbf{B} \middle| \psi_{njl}^m \right\rangle.$$
(399)

Indexesen kiírva és a Wigner–Eckart-tétel szerint leegyszerűsítve a kifejezés:

$$W_{mm'} = \frac{e}{2m} \sum_{i} B_i \langle njlm' | (\hat{L}_i + g_s \hat{S}_i) | njlm \rangle = \frac{e}{2m} \sum_{i} B_i \langle njlm' | g_{jl} \hat{J}_i | njlm \rangle .$$
(400)

Ha **B** \parallel **e**_z, akkor tovább egyszerűsödik a kifejezés, hiszen **B** $\hat{\mathbf{J}} = B\hat{J}_3$, és \hat{J}_3 majd sajátállapotban lesz, így

$$W_{mm'} = \frac{e}{2m} g_{jl} B\hbar m_j \delta_{mm'} .$$
(401)

A kapott mátrix automatikusan diagonális, így az energiakorrekció:

$$\Delta E_B = \frac{e}{2m} g_{jl} B\hbar m_j .$$
(402)

Erős tér közelítésben a helyzet lényegesen egyszerűbb. Nincs $j\mbox{-}{\rm függ}$ és, így a bázis megválasztható, mint

$$|lm_l\rangle|sm_s\rangle = |nlm_lsm_s\rangle . \tag{403}$$

A perturbáció mátrixa ekkor (és megint legyen $\mathbf{B} \parallel \mathbf{e}_z$)

$$W_{m_l m'_l, m_s m'_s} = \frac{e}{2m} \sum_i B_i \langle n l m'_l s m'_s | \hat{L}_i + g_s \hat{S}_i | n l m_l s m_s \rangle = \frac{e}{2m} B\hbar (m_l + g_s m_s) \delta_{m_l m'_l} \delta_{m_s m'_s} .$$
(404)

A mátrix megint automatikusan diagonális, az energiakorrekció:

$$\Delta E_B = \frac{e}{2m} B\hbar(m_l + g_s m_s) . \qquad (405)$$

12.4.2. Stark-effektus

Stark-effektus esetén az energiaszintek felhasadása külső elektromos tér hatására történik. Ebben az esetben is perturbációszámítással közelíthető meg a probléma. A perturbáló Hmilton-operátor: $\Delta \hat{H}_E = -e\Phi(\hat{\mathbf{x}}) = e\mathbf{E}\hat{\mathbf{x}}$. Legyen ebben az esetben is $\mathbf{E} \parallel \mathbf{e}_z$, így $\Delta \hat{H}_e = eE\hat{x}_3$. Mivel teljesül az a kommutációs reláció, hogy $[\hat{J}_3, \hat{x}_3] = 0$, így az $|njlm\rangle$ az \hat{x}_3 operátornak is sajátfüggvénye lesz.

Az \hat{x}_3 operátornak egyik fontos tulajdonsága, hogy megfordítja a paritást, és ha ellentétes paritású sajátfüggvényekkel skalárszorozozzuk az adott operátort, akkor a mátrixelem eltűnik. Az $|njlm\rangle$ a gömbfüggvényeket jelöli, melyek paritása $(-1)^l$, így $\hat{x}_3|njlm\rangle$ parítása $(-1)^{l+1}$ lesz. Ahhoz, hogy az effektus kialakuljon arra van szükség, hogy a mátrixelem két oldalán különböző legyen az l kvantumszám, de a paritás megegyezzen: l - l' = 2k + 1 (k egész). Ehhez első rendű korrekcióhoz arra van szükség, hogy l szerint degenerált legyen az energia: a hidrogénatom megfelelő erre.

Gyenge tér esetén is az $|njlm\rangle$, erős térnél pedig az $|nlm_l sm_s\rangle$ bázis használható. A legegyszerűbb eset, mikor Stark-effektus lép fel:

- $n = 1 \rightarrow l = l' = 0$: nincs effectus,
- $n = 2 \rightarrow j = 1/2 \rightarrow l, l' = 0, 1$: van effektus; vagy $j = 2/3 \rightarrow l = l' = 1$: nincs effektus

Gyenge tér esetén 4-szeres degeneráció lesz: $l = 0; m_j = \pm 1/2$ vagy $l = 1; m_j = \pm 1/2$. Erős tér esetén nem lesz *j*-függő finomfelhasadás, így a degeneráció már 8-szoros: $l = 0; m_l = 0; m_s = \pm 1/2$ és $l = 1; m_l = -1, 0, 1; m_s = \pm 1/2$.

12.5. Kvantummechanikai közelítő módszerek

Kvantummechanikai rendszerek közül csak nagyon kevés kezelhető egzaktul, így elengedhetetlen különféle közelítő módszerek alkalmazása.

12.5.1. Időfüggetlen perturbációszámítása

Legyen a $\hat{H}^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle$ sajátérték-probléma ismert, és a perturbált Hamiltonoperátor $\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \lambda \hat{H}'$, ahol $\lambda \ll 1$ és \hat{H}' mátrixelemei hasonló nagyságrendbe esnek, mint $\hat{H}^{(0)}$ mátrixelemei. A megoldandó feladat a $\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$ sajátérték-probléma.

Legyen az energia és a sajátfüggvény sora

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots , \qquad (406)$$

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots$$
(407)

Ezeket a soralakokat kell visszaírni a sajátérték-problémába. Az első rendű korrekció ($\mathcal{O}(\lambda)$) egyszerűen megkapható (ha λ^2 megjelenik, elhagyjuk):

$$(\hat{H}^{(0)} + \lambda \hat{H}')(|\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle) = (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)})(|\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle)$$

$$(408)$$

$$\hat{H}^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda \hat{H}^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda \hat{H}'|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda E_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda E_n^{(1)}|\psi_n^{(0)}\rangle / \langle\psi_n^{(0)}|\cdot \langle\psi_n^{(0)}|\hat{H}'|\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(0)}\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)}\underbrace{\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle}_{=1}$$

A bal oldal első tagja (mivel a Hamilton-operátor önadjungált) meg fog egyezni a jobb oldal első tagjával:

$$\langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle = (\psi_n^{(0)}, \hat{H}' \psi_n^{(1)}) = (\hat{H}^{(0)} \psi_n^{(0)}, \psi_n^{(0)}) = E_n^{(0)} \langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle .$$
(409)

Az első energiakorrekció:

$$\langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle = E_n^{(1)} .$$
 (410)

A hullámfüggvény első korrekciója kifejthető a perturbálatlan sajátfüggvényekkel (ha teljes rendszert alkotnak):

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_m c_{nm} |\psi_m^{(0)}\rangle .$$
 (411)

A sajátérték-egyenletet írjuk át az alábbi alakra (az egyik oldalon csak (0), a másikon csak (1) függvény legyen):

$$(\hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)}\hat{\mathbf{I}})|\psi_n^{(1)}\rangle = -(\hat{H}' - E_n^{(1)}\hat{\mathbf{I}})|\psi_n^{(0)}\rangle$$

$$(\hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)}\hat{\mathbf{I}})\sum_m c_{nm}|\psi_m^{(0)}\rangle = -(\hat{H}' - E_n^{(1)}\hat{\mathbf{I}})|\psi_n^{(0)}\rangle$$

$$\sum_m c_{nm}(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})|\psi_m^{(0)}\rangle = -(\hat{H}' - E_n^{(1)}\hat{\mathbf{I}})|\psi_n^{(0)}\rangle / \langle\psi_l^{(0)}|\cdot$$

$$\sum_{m \neq n} c_{nm}(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})\delta_{lm} = -\langle\psi_l^{(0)}|\hat{H}'|\psi_n^{(0)}\rangle + E_n^{(1)}\delta_{ln}$$
(412)

Ha l = n, akkor $\delta_{lm} = \delta_{nm} = 1$, de ekkor n = m, így az egész bal oldal eltűnik, és visszakapjuk az energia első korrekcióját. Ha viszont $l \neq n$, akkor $\delta_{ln} = 0$, így a kifejtés c együttatói megkaphatók:

$$c_{nl} = \frac{\langle \psi_l^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}} .$$
(413)

Látható, hogy ez csak akkor értelmes, ha az energia nem degenerált, azaz $E_n^{(0)} \neq E_l^{(0)}$, ha $n \neq l$. A degenerált eset kezeléséhez írjuk fel megint az alábbi kifejezést:

$$c_{nl}(E_n^{(0)} - E_l^{(0)}) = \langle \psi_l^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle .$$
(414)

Ha $E_n^{(0)} = E_l^{(0)}$ $(n \neq l)$, akkor $|\psi_n^{(0)}\rangle$ és $|\psi_l^{(0)}\rangle$ nem egyértelmű. A probléma kezelésére legyen $\hat{H}'|\phi_i\rangle = E|\phi_i\rangle$ k-szorosan degenerált állapot $(|\phi_i\rangle$ ortonormált rendszert alkot). A perturbáció mátrixa $(k \times k \text{ méretű})$ pedig legyen:

$$W_{nm} = \langle \phi_n | \hat{H}' | \phi_m \rangle . \tag{415}$$

Mivel \hat{H}' hermitikus, így **W** is az lesz. A probléma kezeléséhez diagonizálnunk kell ezt a mátrixot, ezért legyen **W** sajátértéke λ^i , sajátvektora pedig \mathbf{e}^i (legyenek ezek is ortonormáltak):

$$\sum_{m} W_{nm} e^i_m = \lambda^i e^i_n .$$
(416)

Ezek után legyen

$$|\chi_i\rangle = \sum_n e_n^i |\phi_n\rangle . \tag{417}$$

Ez lesz a "jó" bázis (ezzel lesz diagonális \mathbf{W}):

$$\langle \chi_i | \hat{H}' | \chi_j \rangle = \left(\sum_n e_n^i | \phi_n \rangle, \hat{H}' \sum_m e_m^j | \phi_m \rangle \right) = \sum_n \sum_m e_n^{i*} e_m^j \langle \phi_n | \hat{H}' | \phi_m \rangle = \sum_n e_n^{i*} \sum_m W_{nm} e_m^j$$

$$= \lambda^j \sum_n e_n^{i*} e_m^j = \lambda^j \delta_{ij} .$$

$$(418)$$

Nem kell mindig megkeresni a "jó" bázist. Ha van olyan operátor, ami kommutál az eredeti és a perturbáló Hamilton-operátorral, akkor a velük közözs sajátrendszere lesz a "jó" bázis.

12.5.2. Variációs módszer

A variációs módszer legfőbb előnye, hogy becslést tehetünk az adott rendszer alapállapoti energiájára. Vegyük azt a sajátérték-problémát, hogy $\hat{H}|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle$. Egy tetszőleges $|\psi\rangle$ állapot kifejthető a sajátállapotokkal:

$$|\psi\rangle = \sum_{n} c_{n} |\phi_{n}\rangle .$$
(419)

Ekkor vegyük az alábbi skalárszorzatot:

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \left\langle \sum_{m} c_{m} \phi_{m} \left| \hat{H} \right| \sum_{n} c_{n} \phi_{n} \right\rangle = \sum_{m} \sum_{n} c_{m}^{*} c_{n} \langle \phi_{m} | \hat{H} | \phi_{n} \rangle = \sum_{n} |c_{n}|^{2} E_{n} \ge \sum_{n} |c_{n}|^{2} E_{1} = E_{1} .$$

$$(420)$$

A valós sajátrendszert nem ismerjük, de ha van egy sejtésünk erre a $|\psi\rangle$ próbafüggvényre, akkor valamilyen paraméterezéssel kiszámoljuk a skalárszorzatot, majd minimalizáljuk.

Alkalmazásra példa a He-atom alapállapoti energiájának becslése. A két protonból álló atom mozgását nem vesszük figyelembe (redukált tömeggel lehetne), valamint elhanyagoljuk a finomfelhasadást is. A rendszer Hamilton-operátora:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta_1 + \Delta_2) - \underbrace{e^2 \left(\frac{2}{\hat{r}_1} + \frac{2}{\hat{r}_2}\right)}_{e^- - \max} + \underbrace{e^2 \frac{1}{|\hat{\mathbf{x}}_1 - \hat{\mathbf{x}}_2|}}_{e^- - e^-} .$$
(421)

A próbafüggvény ekkor legyen a hidrogénatom alapállapoti hullámfüggvényeinek szorzata:

$$\psi_0(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \psi_{1,0}^0(r_1)\psi_{1,0}^0(r_2) = \frac{Z^3}{\pi a^3} e^{-\frac{Z}{a}(r_1+r_2)} .$$
(422)

Minimalizáláskor legyen a paraméter Z, és a felparaméterezett Hamilton-operátor:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_1 + \Delta_2) - e^2 \left(\frac{Z}{\hat{r}_1} + \frac{Z}{\hat{r}_2}\right) + e^2 \left(\frac{Z-2}{\hat{r}_1} + \frac{Z-2}{\hat{r}_2} + \frac{1}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|}\right).$$
(423)

Ezáltal figyelembe tudjuk majd venni azt a hatást, hogy az elektronok le tudják árnyékolni egymást elől a magot. A számolás végén az "effektív" rendszém $Z \approx 1.69$ lesz. A számítható energia a mérhető értéktől kb. 2%-kal tér el.

A kétatomos molekulákat is vizsgálhatjuk variációs módszerek segítségével. Erre példa a $\rm H_2$ ion, melynek Hamilton-operátora:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \underbrace{e^2\left(\frac{1}{\hat{r}_1} + \frac{1}{\hat{r}_2}\right)}_{e^- - p^+} + \underbrace{\frac{e^2}{\hat{R}}}_{p^+ - p^+} .$$
(424)

Ekkor a próbafüggvény legyen két alapállapoti hullámfüggvény szuperpozíciója:

$$\psi_0(\mathbf{x}) = A\left(\psi_{1,0}^0(r_1) + \psi_{1,0}^0(r_2)\right) \,. \tag{425}$$

Eredményül azt kapjuk, hogy a kötés energetikai szempontból előnyösebb, az molekula energiája kisebb lesz, mint az alkotóelemeinek külön-külön. A kétatomos molekulák további vizsgálata lehetséges a merev rotor modell segítségével, ami leírja a forgási jelenségeket (súlyzómodell, N db molekula):

$$\hat{H} = \sum_{i}^{N} \frac{\hat{L}_{i}}{2\Theta} \,. \tag{426}$$

Ezen felül statisztikus fizikai tárgyalás is lehetséges (pl. kétatomos ideális gáz kanonikus foramlizmussal).

12.5.3. Wentzel-Kramers-Brollouin-közelítés

Ez egy kvázi-klasszikus közelítés. Egydimenziós vagy centrális problémák leírására használják. Általában a kvantumos jelenségek becslésére alkalmazzák. Alapvető feltevése, hogy a potenciál nem konstans, de nagyon lassan változik. Tudjuk, hogy ha V állandó, akkor a rendszert leíró hullámfüggvény ($k = \sqrt{2m(E - V)}, \kappa = ik$)

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} , & \text{ha} \quad E > V \\ Ae^{\kappa x} , & \text{ha} \quad E < V \end{cases}$$
(427)

Ha V lassan változik, akkor A és k helyfüggők lesznek (E > V):

$$\psi(x) = A(x)e^{i\phi(x)} . \tag{428}$$

Ezt visszaírva a Schrödinger-egyenletbe, majd a lassan változó pontenciálra hivatkozva elhagyva a $\partial_x^2 A(x)$ tagot, akkor az eredmény

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{C}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x dx' p(x')}, & \text{ha} \quad E > V\\ \frac{C}{\sqrt{p(x)|}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x dx' |p(x')|}, & \text{ha} \quad E < V \end{cases}$$
(429)

12.5.4. Időfüggő perturbációszámítás

Ha az eredeti Hamilton-operátor perturbáló operátora időfüggő, akkor az az idő előre haladtával átmeneteket eredményezhet az eredeti rendszer sajátállapotai között. A perturbált operátor:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'(t) . (430)$$

A perturbáló operátor hatása:

$$\hat{H}'\psi_n = \sum_m d_m^{(n)}\psi_m \qquad \Longrightarrow \qquad d_m^{(n)} = \langle \psi_m | \hat{H}' | \psi_n \rangle = H'_{mn} .$$
(431)

Egy tetszőleges állapot pedig kifejthető a sajátállapotok bázisán az időfejlesztő operátor sajátállapotának segítségével:

$$\psi(t) = \sum_{n} c_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \psi_n .$$
(432)

Az időfüggő állapot időderiváltja:

$$\partial_t \psi(t) = \sum_n \left[(\partial_t c_n(t)) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n - c_n(t) \frac{i}{\hbar} E_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n \right].$$
(433)

Ezt visszaírva az időfüggő Schrödinger-egyenletbe ($\hat{H}\psi = i\hbar\partial_t\psi$) összefüggést kapunk a $c_n(t)$ együtthatókra. Ezt az összefüggést, kihasználva, hogy a mátrixelemek kicsik, perturbatív sorként kezelhetjük. Ez alapján először elhagyjuk az időfüggést, majd $c_n(0)$ -t beírva a kapott egyenletbe egy idő szerinti integrállal (az integrandus arányos a mátrixelemekkel) megkapjuk $c_n^{(1)}$ -et. Ezt megismételve egy újabb integrál (ami most már a mátrixelemek négyzetével lesz arányos) elvégézésével megkaphatjuk $c_n^{(2)}$ -t. És így tovább.

Az időfüggő perturbációszámítás egy híres eredménye az ún. Fermi-féle aranyszabály. Ekkor ún. monokróm (ω fix) perturbációt tételezünk fel, azaz a perturbáló Hamilton-operátor:

$$\hat{H}'(t) = \hat{U}e^{-i\omega t} + \hat{U}^{\dagger}e^{i\omega t} .$$
(434)

Látható, hogy ezzel valóban önadjungált operátort kapunk. Elvégezve a számításokat arra lehetünk figyelesek, hogy csak az egyik tag fog tudni dominálni (vagy egyik sem). Ha t kicsi, akkor a hatás az idővel lesz arányos, azonban nagy időkre valóban csak az egyik tag fog járulékot adni. Ha $E_n/\hbar = \omega_n = \omega$ teljesül, akkor abszorpcióról beszélünk, azaz az atom elnyel egy beérkező fotont (és így megtörténik az átmenet). Ha $\omega_n = -\omega$ akkor indukált emisszióról beszélünk.

Az átmeneti ráták $(E_n > E_m)$ az alábbiak. Abszorpció esetén

$$\Gamma(m \to n) = \frac{2\pi}{\hbar} |U_{nm}|^2 \delta(E_n - E_m - \hbar\omega) .$$
(435)

Indukált emisszó esetén:

$$\Gamma(m \to n) = \frac{2\pi}{\hbar} |U_{nm}|^2 \delta(E_m - E_n - \hbar\omega) .$$
(436)

Az eredmény alapján azt mondhatjuk, hogy nagyobb időintervallumokra csak akkor lesz átmenet, hogy nagyon pontosan el tudjuk találni a szükséges frekvenciát/energiát.

12.5.5. Hartree-közelítés

Különféle sokrészecske rendszerek vizsgálhatók ezen közelítésen keresztül. A Hamiltonoperátor részecskénként hat effektív Hamilton-operátorokon keresztül (melyek mind a külső potenciál, mind a többi részecske hatását tartalmazzák), azaz

$$\hat{H}\psi(x_1,\ldots,x_n) = \int dx_1' \,\hat{H}_{x_1,x_1'}^{\text{eff}}\psi(x_1',\ldots,x_n) + \dots + \int dx_n' \,\hat{H}_{x_n,x_n'}^{\text{eff}}\psi(x_1,\ldots,x_n') \,. \tag{437}$$

A sajátállapotok felírhatók az egyrészecske sajátállapotok szorzataként:

$$\psi_i(x_1, \dots, x_n) = \psi_{i1}(x_1) \dots \psi_{in}(x_n) .$$
 (438)

Az energia pedig az egyrészecske energiák összege lesz:

$$E_i = \sum_{k=1}^{n} E_{ik} . (439)$$

A szorzatalakú sajátfüggvénynek azonban rosszak a szimmetriatulajdonságai, ezt ki kell javítanunk az alábbi alakkal:

$$\psi_i(x_1, \dots, x_n) = C \sum_p \delta_p \psi_{i1}(x_{pi1}) \dots \psi_{in}(x_{pn}) .$$
 (440)

A Ca normálás miatt szerepel. A ppedig az egyes részecske
permutációk miatt fontos, mivel ezáltal már figyelembe tudjuk venni megkülönbözte
thetetlen bozonokat és fermionokat. A δ_p tag pedig

$$\delta_p = \begin{cases} 1 , & \text{ha bozon, vagy páros számú fermion} \\ -1 , & \text{ha páratlan számú fermion} \end{cases}$$
(441)

Észrevehető, hogy a felírt szimmetrizált sajátállapot fermionok esetén egy determináns alakját ölti, ez lesz az ún. Slater-determináns. Ennek segítségével figyelembe tudjuk venni a Pauli-féle kizárási elvet, miszerint két fermion nem lehet ugyanabban a kvantumállapoban. Ez teljesül, hiszen, hogy ha a képezhető mátrix bármely két sora megegyezik, akkor a determináns eltűnik. Bozonok esetén ezt nem kell figyelembe venni, ők bármennyien lehetnek bármely állapotban.

12.6. Alagúteffektus (röviden)

Ha megoldjuk a Schrödinger-egynletet potenciálgátra, akkor (ha E < V) $\psi(x) = Ae^{-\kappa x}$, azaz van valamekkora nem zérus valószínűsége annak, hogy a klasszikusan áthatolhatatlan gáton "átalagutazzon" a részecske.

13. A magfizika alapjai (Kovács Zoltán, Szakállas Nikolett és Pesznyák Dávid)

Izotóptérkép, atommagok tömege, mérete, kötési energiája. Energia és tömeg ekvivalencia, tömegdefektus. A cseppmodell és a félempirikus kötési formula. Maghasadás, magfúzió, radioaktivitás. Sugárzás és anyag kölcsönhatása: Bethe-Bloch-formula. Radioaktív bomlások, magátalakulások. Elemi részecskék és alapvető kölcsönhatások. Kísérleti eszközök.

13.1. Izotóptérkép, atommagok tömege, mérete, kötési energiája + Energia és tömeg ekvivalencia, tömegdefektus

Az atom
ok két részből állnak, az elektronfelhőből és az atommagból. Az atommag relatív tömege nagyon nagy, több mint 99%-a az atom teljes tömegének, tér
fogataránya viszont csak $\frac{1}{10^{14}}$ a teljes atomhoz képest. Az atommag
 Z darab protont és N darab neutront tartalmaz. Ezek alapján defini
áljuk a tömegszámot:

$$A = Z + N$$

Az azonos protonszámú atomokat izotópnak, az azonos neutronszámú atomokat izotónnak, az azonos tömegszámúakat pedig izobárnak nevezzük. Ezeket a mennyiségeket egy N-Z grafikonon szokás ábrázolni, amit izotóptérképnek nevezünk.



21. ábra. Egy izotóptérkép

Az izotóptérképen megfigyelhető, hogy egy bizonyos tömegszámnál a stabil részecskék eltérnek az N = Z egyenestől, és alatta, az ún. "stabilitás völgyében" helyezkednek el. Ez az atommagban lévő $p^+ - p^+$ taszítás miatt van, amit csak az atommagban lévő több neutron tud ellensúlyozni. A stabilitás völgye felett található instabil izotópok pozitív β bomlanak, a

stabilitás völgye alatt pedig a negatív β bomlás a jellemző. Magasabb tömegszámoknál megjelenik az α bomlás is, és az izotóptérkép egy bizonyos részén nem is nagyon található stabil atommag, csak az ún. "stabilitás szigetében". Az izotóptérképen érdemes még megjegyezni az ún. "mágikus számok" létezését. Ha a proton vagy neutronszám pont egy ilyen "mágikus szám", akkor az atommagban lezárt héjak alakulnak ki. Ilyenkor nagyobb a kötési energia az átlagosnál, azaz stabilabb az atommag. A mágikus számoknál ezért gyakran több stabil izotópot is találunk. Mágikus szám pl. a 2,8,20,28.

Az atommagok több tulajdonságát kísérletileg is meg tudjuk határozni. Ezek a mérete, tömege, elektromos töltése, a nukleonok eloszlása, a töltéseloszlás sugara, kötési energiája, spinje, paritása. Az atommag véges kiterjedését több kísérlet is bizonyította, amelyek közül a leghíresebb Rutherford szóráskísérlete volt. Későbbi kísérletek azt is bizonyították, hogy az atommag nem egy jól behatárolható mérettel rendelkezik, hanem egy bizonyos sűrűségeloszlás írja le. Ezt a sűrűségeloszlást jól leírja a két paraméteres Fermi-függvény:

$$\rho(r) = \rho_0 \frac{1}{1 + e^{\frac{r-R}{d}}}$$

Itt R sugáron értjük az atommag sugarát, ez jelöli azt a határt, ahol a sűrűség a felére csökken. A felület diffuzitását adja meg a d paraméter.

Az atommag töltéseloszlását Hofstädter vizsgálta részletesebben, az 50-es években; szóráskísérleteket végzett nagy energiájú elektronokkal. Megállapította, hogy a stabil atommagok belsejében a töltések eloszlását egy hasonló Fermi-eloszlással lehet meghatározni, amelynek az R sugarát a tömegszámmal lehet paraméterezni:

$$R = r_0 \sqrt[3]{A}$$

Itt $r_0 = 1,23 \cdot 10^{-15} m = 1,23 Fm$. A kötési energián az atommag belső kötéseinek felszakításához szükséges energiát értjük, aminek az értéke ez alapján mindig pozitív. Ezt a következő képletből határozhatjuk meg:

$$Z \cdot m_{proton} + N \cdot m_{neutron} - m_{atom} = \Delta m$$

Einstein híres tömeg-energia ekvivalencia képletét felhsználva a kötési energia:

$$\Delta mc^2 = E_{\rm k\"ot\acute{e}si}$$

A tömegeket tömegspektroszkópiából kapjuk. Itt egy ionforrás nyalábját egy egymásra merőleges elektromos és mágneses teret tartalmazó "sebességszelektorba" vezetjük. Itt azok a részecskék haladnak át irányváltozás nélkül, amikre

$$qE = qvB$$

teljesül. Ezután az ismert sebességű nyaláb egy mágneses térbe kerül, ahol atommag körpályán fog mozogni. Itt a centripetális erő pont a Lorentz-erővel egyezik meg:

$$\frac{mv^2}{r} = qvB$$

Ha ezt átrendezzük a tömegre, és a sebességet átírjuk $\frac{E}{B}$ -re, akkor a tömegre a következő képletet kapjuk:

$$m = \frac{rqB^2}{E}$$

13.2. A cseppmodell és a félempirikus kötési formula

A cseppmodell az atommagot úgy képzeli el, mint egy elektromosan töltött vízcsepp. Mindkettőben jelen van az alapvetően vonzó kölcsönhatás, ami rövidtávon taszítóvá válik (Van der Waals kölcsönhatás a vízcseppnél és magerők az atommagnál). Mindkettő alakja gömbszerű, viszont fontos eltérés, hogy itt az atommag sűrűsége konstans. Ennek a "maganyagnak" a sűrűsége:

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{Am_{nukleon}}{\frac{4}{3}R^3\pi} = \frac{m_{nukleon}}{\frac{4}{3}r_0^3\pi}$$

A cseppmodell alapján az atommag belsejében található nukleonok kötési energiája nagyobb lesz, mint a felszínen lévőke, mivel mindegyik nukleon több szomszéddal rendelkezik, így a folyadékokhoz hasonlóan itt is létrejön egy felületi feszültség. Ha minden nukleon belső lenne, akkor az energia egy $E_V = a_V A$ taggal nagyobb lenne, mint valójában. A felületen lévő atommagok viszont gyengébben kötik egymást, így bejön egy negatív, felülettel arányos energiatag: $E_F = -a_F A^{\frac{2}{3}}$ Az atommagban a proton-proton kölcsönhatás is gyengíti a kötést, amit a Coulomb-taggal vehetünk figyelembe: $E_C = -a_C \frac{Z(Z-1)}{A^{\frac{1}{3}}}$. Mivel a protonok és neutronok is fermionok, ezért érvényes rájuk a Pauli-elv. Z és N növekedésével egyre magasabb energiájú állapotok töltődnek fel. A protonoknál magasabb szintre szorult neutronok száma (N-Z), és (N-Z)-vel arányosan magas szintig töltődnek be a többlet energiaszintek. Ez alapján az asszimetria-tag: $E_A = -a_A \frac{(N-Z)^2}{A} = a_A \frac{(A-2Z)^2}{A}$ Kísérletek kimutatták, hogy azok az atommagok, amelyekben az egyik nukleonszám páros, erősebben kötöttek, mint azok, amelyekben páratlan. Ennek a "párkölcsönhatásnak" a figyelembevételére vezessünk be egy $\delta(A, Z)$ -t, úgy, hogy:

$$\delta(A, Z) = \begin{cases} +\delta_0 & \text{, ha Z \'es N p\'aros} \\ 0 & \text{, ha A p\'aratlan} \\ -\delta_0 & \text{, ha Z \'es N p\'aratlan} \end{cases}$$

Ezeket az energiatagokat ha összegezzük, akkor megkapjuk a Weizsäcker-féle félempirikus kötési formulát:

$$E(A,Z) = a_V A - a_F A^{\frac{2}{3}} - a_C \frac{Z(Z-1)}{A^{\frac{1}{3}}} - a_A \frac{(A-2Z)^2}{A} + \delta(A,Z)$$

13.3. Maghasadás, magfúzió, radioaktivitás

Maghasadásnak nevezzük azt a folyamatot, amely során egy atommag kettő (néha több) részre esik szét. A maghasadással kapott új atommagok energetikailag kedvezőbbek. Tegyük fel, hogy az atommag két egyenlő részre hasad. Ez akkor lesz előnyös, ha $E(A, Z) > 2E(\frac{A}{2}, \frac{Z}{2})$. Ha ezt behelyettesítjük a félempirikus kötési formulába, akkor azt kapjuk, hogy ez $Z \approx 36$ és nagyobb rendszámokra igaz.

A maghasadás képes láncreakciót kialakítani, mivel minden maghasadáskor keletkezhetnek "szétrepülő" neutronok, amelyek újabb maghasadásokat eredményeznek. Ez hirtelen nagyon nagy energia felszabadítására képes, és ezt használja ki az atombomba. Ha az új hasadások számát kontrollálni tudjuk, akkor féken tartható a láncreakció, és használhatjuk a maghasadást energiatermelésre. Ezen az elven működnek az atomerőművek.

Energia akkor is felszabadulhat, ha kis rendszámú atommagok egyesülnek, és egy nagyobb

kötési energiával rendelkező atommag keletkezik. Ezt nehezebb előidézni, mivel az atommag protonjai erősen taszítják egymást. Ezt a Coulomb-gátat kell áttörni, amihez magas hőmérséklet szükséges. Kisebb hőmérsékleten csak alagúteffektussal játszódhat le a folyamat, kis valószínűséggel. A fúzió leggyakrabban csillagok belsejében játszódik le, ahol a magas hőmérséklet és a nagy nyomás miatt tartósan fenntartható a fúzió.



22. ábra. A p-p ciklus, a napban előforduló leggyakoribb fúziós folyamat

Radioaktivitás alatt egy anyagnak azt a tulajdonságát értjük, hogy külső behatás nélkül, azaz spontán jellemző rá a maghasadás. Ezt úgy tudjuk kimutatni, hogy bizonyos anyagok akár a külvilágtól elzárva is sugároznak. Ezt Becquerel fedezte fel először, aki uránsót helyezett egy fekete papírba csomagolt fotólemezre. A fotólemez befeketedett, mintha fény érte volna. Megfigyelések alapján egy spontán bomló anyag részecskeszámának változása:

$$\dot{N} = -\lambda N$$

Itt λ -t nevezzük bomlásállandónak, \dot{N} -t pedig aktivitásnak. A differenciálegyenlet megoldása jól láthatóan:

$$N(t) = N e^{-\lambda t}$$

Ezt nevezzük exponenciális bomlástörvénynek. Szokás bevezetni a felezési időt, ami nevéből sejthetően azt az időtartamot jelenti, ami alatt a darabszám pont a felére csökken: $T_{\frac{1}{2}} = \frac{ln^2}{\lambda}$.

13.4. Sugárzás és anyag kölcsönhatása: Bethe–Bloch-formula

Az anyagok szerkezete elektromosan töltött részecskékből áll: pozitív elektromos töltésű, kis kiterjedésű atommagból, melyet negatív töltésű elektronok vesznek körül. Az anyagba belépő

radioaktív sugárzások energiája általában lényegesen nagyobb, mint az anyagban lévő molekuláké vagy részecskéké. Mikor a sugárzás behatol az anyagba, az abban megtett útja során ionokat hozhat létre - az ilyen tulajdonsággal rendelkező sugárzást nevezzük ionizálónak. Az ionizáció energiája általában 10 - 100 eV közé esik. Az elektromosan töltött részecskék az anyagban haladva közvetlenül, míg a semlegesek (pl. gamma- vagy röntgensugárzás) közvetett módon ionizálnak. A semleges részecskék először valamilyen kölcsönhatás (γ -sugárzás esetén ez lehet fotoeffektus, párkeltés, Coulomb - kh.) révén elektromosan töltött részecskéket keltenek, melyeknek átadják az energiájukat és ezek ionizálják tovább az anyagot. A semleges részecskék anyaggal való kölcsönhatásának valószínűsége igen csekély, melynek következtében hosszú utat képesek megtenni az anyagban anélkül, hogy ütköznének vagy energiát veszítenének.

Az energiamegmaradás miatt a bejövő részecske energiája csökken, miközben energiát ad át az anyagnak; a csökkenés addig tart, amíg a részecske meg nem áll. Az energiaátadás formái lehetnek:

- gerjesztés az anyagban lévő elektronok magasabb energiaszintre kerülnek, gerjesztődnek
- ionizáció az elektronok leszakadnak, ionok jönnek létre
- rugalmas ütközés (az atomokkal) az anyag atomjai mozgási energiát nyernek a bejövő részecskék révén
- fékezési sugárzás a gyorsuló töltések elektromágneses sugárzást bocsátanak ki ha a mag Coulomb-terében gyorsulnak
- Cserenkov-sugárzás a közegbeli fénysebességnél gyorsabban mozgó töltött részecskék esetén lép fel; a sugárzást a közeg bocsátja ki (dielektrikumban a mozgó töltés polarizálja az elektronokat; legerjesztődéskor koherens dipólsugárzás keletkezik)
- átmeneti sugárzás átmeneti sugárzást bocsájt ki egy részecske, amikor átmegy különböző dielektromos tulajdonságú anyagok határán, pl. vákumból egy dielektrikumba

A nehéz töltött részecskék az anyag elektronjainak adják át energiájukat. A Bethe - Bloch - fomulát használjuk akkor, ha arra vagyunk kiváncsiak, hogy az elektron mellett elhaladó részecske mennyi energiát veszít. Az ionizációs energiaveszteség kiszámításához a következő közelítésekkel szoktunk élni:

- a nehéz részecske pályáját egyenesként közelítjük
- sebességét állandónak vesszük
- az elektron elmozdulását közel nullának tekintjük
- az anyagban az elektronok eloszlása közel homogén vagyis az anyagon áthaladó nehéz részecskéktől különböző távolságra lévő atomok különböző mértékben ionizálódnak

A Bethe - Bloch- formula pedig:

$$\frac{\mathrm{dE}}{\mathrm{dx}} = -\frac{4\pi nk^2 e^4 Z_{\alpha}^2}{m_e v^2} \frac{1}{2} \ln\left(\frac{E_{min}}{E_{max}}\right) = -\frac{4\pi nk^2 e^4 Z_{\alpha}^2}{m_e v^2} \frac{1}{2} \ln\left(\frac{2m_e v^2}{I}\right)$$
(442)

ahol E_{min} a legkisebb impakt paraméterhez tartozó energialeadás, E_{max} pedig az ionizációs energia, mert ennél kisebb energiát nem lehet átadni.

(Itt nem hátrány átnézni a levezetést az előadás diákból vagy egy korábbi tételkidolgozásból, de vizsgán valószínűleg a formula alakjára és felhasználására lesznek kiváncsiak.)

13.5. Radioaktív bomlások, magátalakulások

Radioaktív bomláskor az atomok középpontjában lévő atommagok alakulnak át. Az őket alkotó protonok és neutronok átrendeződnek és erősebben kötött állapotba kerülnek. Ezekben az átalakulásokban bizonyos fizikai mennyiségekre megmaradási törvények állnak fenn, melyek a következők:

- elektromos töltés megmaradása
- barionszám megmaradása
- leptonszám megmaradása

A radioaktív bomlások a következőek:

 α - **bomlás**: ${}^{A}_{Z}X \rightarrow {}^{A-4}_{Z-2}X + {}^{4}_{2}\alpha$. Az α -bomláskor kibocsátott részecskét α -részecskének nevezük. Ez tulajdonképpen hélium-atommag, melyben 2 proton és 2 neutron van. α - bomlás során a tömegszám 4-el, a rendszám 2-vel csökken. Az A a tömegszám, Z a rendszám.

A β - **bomlás**nak három típusát különböztethetjük meg: negatív és pozitív β - bomlás és elektronbefogás. Negatív β -bomlás: ${}^{A}_{Z}X \rightarrow {}^{A}_{Z+1}X + e^{-} + \overline{\nu_{e}}$. A negatív β -bomlás során elektron keletkezik és a leptonszám megmaradása miatt egy semleges anti-neutrínó bocsátódik ki, melynek leptonszáma -1-el egyenlő. Pozitív β - bomlás: ${}^{A}_{Z}X \rightarrow {}^{A}_{Z-1}X + e^{+} + \nu_{e}$. Pozitív β -bomlás során pozitron keletkezik és elektromosan semleges könnyű részecske, neutrínó. Elektronbefogás: ${}^{A}_{Z}X + e^{-} \rightarrow {}^{A}_{Z-1}X + \nu_{e}$. Energetikailag kedvező esetben az atommag be tud fogni egy elektront az atomi elektronhéjból. 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.

 γ - **bomlás**: A γ -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 γ -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:

$$h\nu = \mathcal{E}_m - \mathcal{E}_n$$

ahol $\mathbf{E}_m > \mathbf{E}_n,$ az atommag kezdeti és végállapotának energiája.

Megemlítendő még a spontán maghasadás és a nukleon emisszió.

A spontán maghasadás vagy spontán hasadás a nagyon nehéz izotópok egyik radioaktív bomlási formája. A spontán maghasadás a kvantummechanikai alagúteffektus révén következik be, anélkül, hogy az atommag neutronnal vagy más részecskével ütközne, mint ahogy az az indukált bomlásnál történik. Mint minden maghasadásnál, a spontán maghasadásnál is neutronok keletkeznek, ezért ha kritikus tömegű anyag van jelen, akkor a spontán maghasadás láncreakciót indíthat el.

A *nukleon emisszió* protonok vagy neutronok spontán kilökődése a magból, proton vagy neutronfelesleg esetén, pl. hasadási termékeknél.

13.6. 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. Az íz mellett a kvarkok rendelkeznek más kvantumszámokkal is, például a szín kvantumszámmal. Ennek ízenként 3 komponense lehet: piros, kék és zöld. A leptonok pedig az elektron, müon és tau illetve ezek neutrínói.

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. 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. Erős kölcsönhatás esetén a kvarkok között ható erő a távolsággal növekszik. 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 leírások-



23. ábra. A Standard-modell elemi részecskéi

ban 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.

13.7. Kísérleti eszközök

A részecskefizikai kísérletek elvégzéséhez általában detektorokat használunk. A detektorok működésének alapelvei: a sugárzás eléri a detektort, kölcsönhat az anyaggal, elveszíti az energiáját vagy annak egy részét, sok kis energiájú elektron szabadul fel, ezeket összegyűjtve elektromos jellé alakítjuk. A detektorokat működési elvük szerint csoportosíthatjuk:

 gáztöltésű detektorok: 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. A gáztöltésű detektorok tovább csoportosíthatóak aszerint, hogy mekkora feszültség van jelen és hogy milyen jelenségek zajlanak bennük – ionizációs és proporcionális kamra + Geiger-Müller-cső.

Az ionizációs kamra esetén a detektorra kapcsolt feszültség kicsi, így a leszakadt elektronok nem tudnak tovább ionizálni. Ekkor a jel arányos az ionizációval. A proporcionális kamrák esetén a nagyobb feszültség következtében elektron-lavina alakul ki a szál közelében, melyet aztán érzékelni tudunk. Az elektronok két ütközés között elég energiát szereznek az elektromos térből az újbóli ionizációhoz. 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.

- szcintillációs detektorok : 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 legyen.
- félvezető detektorok : 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.
- vizuális detektorok: ködkamra, buborékkamra. 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.

(Itt át lehet nézni a mag- és részecskefizika kurzus detektorokról szóló diáit (kb. utolsó két előadás). A diákban ismertetve vannak még a Cserenkov- detektorok, kaloriméterek, stb.)

14. A termodinamika statisztikus alapozása (Szakállas Nikolett)

Mikrokanonikus, kanonikus, nagykanonikus sokaság. Mikroállapotok fogalma, Boltzmannentrópia, egyszerű alkalmazások. Ergodikus hipotézis. Maxwell–Boltzmann-statisztika. Maxwellféle sebességeloszlás.

Egy rendszer makroszkopikus állapotát termodinamikai egyensúlyban állapotjelzőkkel jellemezhetjük. Ezek az állapotjelzők lehetnek intenzívek (p, T, μ)- melyek egyensúlyban kiegyenlítődnek - és extenzívek (U,S,N,V,F,G) - összeadódnak. Egy makroszkopikus állapot belső, ún. mikroszkopikus állapotokkal valósul meg. Arra a kérdésre, hogy egy adott időpillanatban a rendszer melyik mikroállapotában van, nem tudunk választ adni, hiszen a rendelkezésünkre álló mérőműszerek nem tudnak mikroállapotokat detektálni. Érződik, hogy ez egy információhiányos állapot. Itt jelenik meg a statisztikus fizika, ahol az eseményekhez valószínűségeket rendelünk.

14.1. Mikrokanonikus, kanonikus, nagykanonikus sokaság.

Az (összes) olyan mikroszkopikus állapotok halmazát, melyek ugyanazt a makroszkopikus állapotot valósítják meg, sokaságnak nevezzük.

14.1.1. Mikrokanonikus sokaság

Az egyenlő valószínűségek elve kimondja, hogy zárt rendszer (rögzített E, V, N értékek) esetén az adott rendszer minden mikroállapotát egyforma valószínűséggel látogatja meg (elegendően hosszú idő elteltével). Az ilyen rendszerekben a mikroállapotok eloszlása állandó és azok előfordulásának valószínűsége (P_m) csak a mikroállapotok számától (Ω) függ. Ezt nevezzük mikrokanonikus sokaságnak.

$$P_m = \frac{1}{\Omega(E, V, N)} \tag{443}$$

14.1.2. Kanonikus sokaság

A kanonikus sokaság esetén a vizsgált rendszer egy hőtartállyal van kapcsolatban, a rendszer a hőtartálytól egy jó hővezető fallal van szeparálva - tehát a hőtartály hőcserére képes a rendszerrel- és az egész összeállítás a külvilágtól izolálva van. A mikrokanonikus sokasággal ellentétben, itt nem az energia (E), hanem a hőmérséklet (T) rögzített.

Tekintsünk tehát egy rendszert, mely az előzőekben említett módon egy hőtartállyal van kapcsolatban, ahol a hőtartály méretei lényegesen nagyobbak a rendszer méreteinél és a hőmérséklet állandóságát a hőtartály biztosítja. A térfogat (V) és a részecskeszám (N) mind a term. rendszer, mind a hőtartály esetén állandó.

A term. rendszer egy kiszemelt mikroállapotát jelöljük m-el, a hőtartály mikroállapotát
pedig *n*-el. Az izoláltság következtében a term. rendszer és a hőtartály energiáinak összege egy állandó értéket vesz $fel(E_0)$,

$$E_m + E_n = E_0 \tag{444}$$

és az együttes rendszer $(\underline{m}, \underline{n})$ mikrokanonikus sokaságnak tekinthető, tehát a mikroállapotok előfordulásának valószínűsége egyforma. Keressük $P_{\underline{m}}$ -t, vagyis a termodinamikai rendszerünk egy kiszemelt mikroállapotának megtalálási valószínűségét. Mivel \underline{m} rögzített, (444) értelmében a tartály energiája $(E_{\underline{n}})$ is rögzített, így a tartály állapotainak száma: $\Omega(E_0 - E_{\underline{m}})$. Ha egy másik állapotát rögzítenénk a term. rendszernek, akkor is erre az állapotszámra jutnánk. Levonható a következtetés, hogy $P_m \sim \Omega(E_0 - E_m)$.

Használjuk ki, hogy a hőtartály lényegesen nagyobb a rendszerünknél, tehát $E_0 >> E_m$. Ekkor $\Omega(E_0 - E_m)$ sorbafejthető E_0 körül, és mivel $\Omega(E_0 - E_m)$ egy gyorsan változó függvény, vegyük a logaritmusát. (Ahhoz, hogy a valószínűség és az állapotok száma között egyenlőséget tehessünk, szükséges egy konstanst bevezetni.)

$$\ln \mathcal{P}_m = \ln\Omega(E_0 - E_m) + \ln \text{ konst}$$
(445)

A sorfejtés elsőrendig:

$$\ln\Omega(E_0) - E_{\underline{m}} \frac{dln\Omega}{dE_n}|_{E_{\underline{n}} = E_0}$$
(446)

Itt látszik, hogy a rendszer összes energiája a tartályban van.

$$\ln \mathbf{P}_{\underline{m}} = \tilde{\operatorname{konst}} - E_{\underline{m}} \frac{dln\Omega}{dE_n} |_{E_{\underline{n}} = E_0}$$
(447)

Az egyenlet utolsó tagját kibővítve k-val, megjelenik az $S_{\underline{n}}(E_{\underline{n}}) = k ln \Omega_{\underline{n}}$, ekkor észrevehetjük, hogy az utolsó tag tulajdonképpen $\frac{dS_{\underline{n}}}{dE_{\underline{n}}} = \frac{1}{T_{\underline{n}}}$, ahol $T_{\underline{n}}$ a tartály hőmérséklete. Ebből is látszik, hogy az egész rendszer hőmérsékletét a tartály határozza meg. Az egész exponenciálisát véve:

$$P_{\underline{m}} \sim e^{-\frac{E_{\underline{m}}}{kT}} \tag{448}$$

ahol az arányossági tényező a rendszer állapotösszegének reciproka, $\frac{1}{Z}$, ahol $Z = \sum_{\underline{w}} e^{-\frac{-\overline{w}}{kT}}$ lesz.

Tehát kanonikus sokaság esetén a mikroállapotok megtalálási valószínűsége:

$$P_{\underline{m}} = \frac{1}{\sum_{m} e^{-\frac{E_{\underline{m}}}{kT}}} \cdot e^{-\frac{E_{\underline{m}}}{kT}}$$
(449)

ahol megjelenik a híres Boltzman-faktor.

Kanonikus tárgyalásmódban a különböző energiákhoz tartozó mikroállapotok valószínűsége nem ugyanaz - de ugyanazon energiaértékhez tartozó mikroállapotok valószínűsége megegyezik -, ezért szükségünk van egy olyan állapotjelzőre, mely a mikroállapotok számán kívül azok valószínűségét is tartalmazza. Ilyen az F(T,V,N) szabadenergia (mely az állapotösszegen keresztül tartalmazza a szükséges információkat).

$$F = U - TS \tag{450}$$

Az egyenlet differenciális alakját véve és behelyettesítve az ismert $dU = TdS - pdV + \mu dN$ belső energiára vonatkozó fundamentális egyenletet, megkapjuk a szabadenergiára vonatkozó fundamentális egyenletünket:

$$dF = -SdT - pdV + \mu dN \tag{451}$$

A szabadenergiának teljesítenie kell az ún. Helmholtz-egyenletet:

$$F = U + T \left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V,N} \tag{452}$$

melynek megoldása a szabadenergia másik ismert alakja:

$$F = -k_B T ln Z \tag{453}$$

Megjegyzés: ebben a tárgyalásmódban az energia nem rögzített, tehát fluktuál egy bizonyos érték körül. Éppen ezért, mint minden fluktuáló mennyiség esetén, annak átlagával dolgozunk. A rendszer U belső energiáját az E energia átlagának tekintjük. Egy fluktuáló mennyiség átlaga a következőképp írható fel:

$$\overline{A} = \sum_{\underline{m}} \frac{N_{\underline{m}} A_{\underline{m}}}{N_{\ddot{o}}} = \sum_{\underline{m}} P_{\underline{m}} A_{\underline{m}}$$
(454)

14.1.3. Nagykanonikus sokaság

Tekintsük továbbra is a kanonikus esetben tárgyalt elrendezést, de most hőcserén kívül részecskék átadása is folyik a term. rendszer és környezete (jelen esetben hőtartály) között. Ekkor egy adott mikroállapot előfordulásának valószínűsége:

$$P_{\underbrace{m}} = \frac{1}{\sum_{\underline{m}} e^{-\frac{1}{kT}(E_{\underbrace{m}} - \mu N_{\underline{m}})}} e^{-\frac{1}{kT}(E_{\underbrace{m}} - \mu N_{\underline{m}})}$$
(455)

A nagykanonikus sokaság esetén definiálható a nagykanonikus potenciál:

$$\Phi(T, V, \mu) = F - \mu N \tag{456}$$

Írjuk fel a Neumann-entrópiát:

$$S = -k_B \sum_{\underline{m}} P_{\underline{m}} ln P_{\underline{m}}$$
(457)

Behelyettesítve P_m -et:

$$S = -k_B \sum_{\underline{m}} P_{\underline{m}} ln \frac{e^{-\frac{1}{kT}(E_{\underline{m}} - \mu N_{\underline{m}})}}{Z} = k_B \ln Z + \frac{1}{T} \sum_{\underline{m}} P_{\underline{m}}(E_{\underline{m}} - \mu N_{\underline{m}}) = k_B \ln Z + \frac{1}{T} (\overline{E} - \mu \overline{N})$$

$$(458)$$

Egyszerű átalakításokkal és kihasználva, hogy $\overline{E} = U$ a nagykanonikus potenciál következő alakjára jutunk:

$$k_B T \ln \mathcal{Z} = TS - U + \mu N = -\Phi \qquad \Rightarrow \Phi = -k_B T \ln \mathcal{Z}$$
(459)

14.2. Mikroállapotok fogalma, Boltzmann-entrópia, egyszerű alkalmazások.

14.2.1. Mikroállapotok fogalma

A mikroállapot egy adott makroszkopikus rendszer teljes részletességgel leírt belső állapota. Egy makroszkopikus rendszernek nagyon sok mikroállapota van: mikroállapotok száma \gg Avogadro - szám.

Kvantummechanikai rendszerek esetén egy mikroállapot megadása az összes létező (a rendszerre jellemző) kvantumszám megadásával történik: $m \Leftrightarrow (n_1, n_2, ..., n_N)$. Ebben az esetben,

ha kiválasztok egy mikroállapotot, vele együtt választok egy (hozzá tartozó) hullámfüggvényt is. Definiálható Ω multiplicitás, mely megadja, hogy egy energiaszint hány mikroállapottal valósítható meg, vagyis mennyire elfajult az adott energiaszint.

Klasszikus rendszerek esetén egy mikroállapot a hely- és impulzuskoordináták által kifeszített fázistér egy pontja. Egy mikroállapotban ismert az összes részecske helye és impulzusa. A fázisteret általában fáziscellákra osszuk, ezzel diszkretizálva a mikroállapotok folytonos halmazát. Egy fáziscella mérete a határozatlansági relációval becsülhető, $\Delta x \Delta p \sim h$, vagyis ezek a cellák h (Planck-állandó) nagyságúak. Ez teremti meg a kapcsolatot a kvantummechanikai tárgyalásmóddal. Ugyanis ismert, hogy a klasszikus statisztikus fizika a kvantum statisztikus fizika magashőmérsékleti határesete. A fázistérfogat a következőképp írható fel olyan állapotokra, melyek energiája kisebb, mint E:

$$\Gamma(E) = \int \dots \int dq_1 \dots dq_f dp_1 \dots dp_f$$
(460)

Rögzített energia
értékek által kifeszített felületet energiahiperfelületnek nevezzük. Pl.
 $E = H(q_1, ..., q_f; p_1, ..., p_f)$ egy felületet definiál (E rögzített), ahonnan p-t kifejezve megkapjuk a hiperfelületet. Adott E-nél kisebb energiájú, illetve E és
 $E + \delta E$ közé eső (energiahéjban lévő) állapotok száma pedig (ami a multiplicitás klasszikus megfelelője):

$$\Omega(E) = \frac{1}{h^f} \Gamma(E) \tag{461}$$

$$\Omega(E, \delta E) = \frac{1}{h^f} (\Gamma(E + \delta E) - \Gamma(E))$$
(462)

ahol f a mikroszkopikus szabadsági fokok száma.

14.2.2. Boltzmann-entrópia

Hogy miért olyan fontos ismernünk a mikroállapotok számát, arra Boltzmann-entrópia adja meg a választ. Ez a következő alakban írható fel:

$$S = k_B \ln(\Omega(E)) \tag{463}$$

Látható, hogy a statisztikus entrópia a mikroállapotok számától függ. Energiafüggése pedig a mikroállapotokon keresztül van. Ez az első olyan általánosan érvényes képlet, amely a rendszer mikroszkopikus tulajdonságait ($\Omega(E)$) jellemző mennyiséget összeköti egy makroszkopikus mennyiséggel (S).

Ebben az esetben Ω olyan mikroszkopikus állapotok számát jelöli, melyek rögzített (U,V,N) értékek esetén megengedettek. A rögzítettség miatt a sokaság összes pontja ugyanolyan valószínűséggel látogatott, ezzel magyarázható az entrópia Ω - függése.

14.2.3. Egyszerű alkalmazások

Tekintsünk először egy környezetétől izolált edényt, melyet középen egy válaszfal oszt ketté. Szedjük ki a válaszfalat. A molekulák igyekeznek kitölteni a rendelkezésre álló helyet. Mi a helyzet, ha csak 1 molekula van az edényben? A rendelkezésre álló hely ekkor "nagyobb" lesz. N részecske esetén növekszik az állapotok száma, vagyis $\Omega \sim V^N$. Ekkor az entrópia: $S \sim ln(\Omega) \sim N \cdot ln(V)$.

A következő példánk legyen a termikus kölcsönhatás. A környezettől izolálva rakjunk egymás mellé két különböző hőmérsékletű testet, melyek között jó hővezető fal van. A magasabb hőmérsékletű (T_2) helyről energia áramlik az alacsonyabb hőmérsékletű (T_1) test felé. Mi történik a statisztikus entrópiával? (a termodinamikai ebben az esetben növekszik). Mivel együttesen izolálva van a két rendszer a környezettől, energiáik összege egy fix érték: $E_1 + E_2 = E_{\text{összes}}$. Ekkor az állapotok száma: $\Omega(E_{\ddot{o}}) = \Omega_1(E_1) \cdot \Omega_2(E_2) = \Omega_1(E_1) \cdot \Omega_2(E_{\text{összes}} - E_1)$. Az entrópia az állapotszám logaritmusával arányos, tehát a logaritmus tulajdonságai alapján a rendszer teljes entrópiája az alrendszerek entrópiáinak összege.

14.3. Ergodikus hipotézis. Maxwell–Boltzmann-statisztika.

14.3.1. Ergodikus hipotézis

Tekintsünk egy M makroszkopikus rendszert, mely kanonikus, makroszkopikus paraméterei pedig (T,V,N). Képezzük ennek másolatait. A másolatok halmaza pedig legyen egy statisztikus sokaság. A sokaság elemeinek száma $\gg 1$. Ha egy adott időpillanatban tekintjük a sokaság elemeit, felmerülhet a kérdés, hogy vajon a sokaság hány eleme van ugyanabban az m mikroállapotban. A mikroállapotnak a statisztikus sokaságon alapuló valószínűsége, definíció szerint, a sokaságon belüli relatív gyakorisága. Azt gondolhatjuk, hogy ez a valószínűség időfüggő (hiszen adott időpillanatban tekintjük a rendszert), azonban termodinamikai egyensúlyban lévő sokaság esetén az m mikroállapot előfordulása a sokaságon belül nem változik. Ezt úgy lehet elképzelni, mintha a sokaságon belül a mikroállapotok sorrendjét minden időpillanatban megváltoztatnánk (mintha lenne egy pakli kártyánk és azt pl. minden másodpercben megkevernénk), de ezzel az előfordulásuk nem változik - nem tűnnek el és nem jelennek meg újabb mikroállapotok. Tehát *erqodikus hipotézis* nek nevezzük azt a feltételezést, hogy egy makroszkopikus rendszerben a mikroállapotoknak a belső dinamikájukból (azaz az időfejlődésből) származtatott eloszlása megegyezik a statisztikus sokasággal definiált eloszlással. Másképp megfogalmazva: egy mennyiség időbeli átlaga megegyezik a statisztikus sokaság átlagával makroszkopikus egyensúly esetén.

14.3.2. Maxwell-Boltzmann-statisztika

Tegyük fel, hogy van egy kanonikus rendszerünk T hőmérsékleten, amelyik N független (azaz egymással kölcsön nem ható), egymástól megkülönböztethető mikroszkopikus objektumból áll. (Az hogy mikroszkopikus az objektum, azt jelenti, hogy a szabadsági fokainak a száma egységnyi nagyságrendű.) Jelöljük a mikroszkopikus objektumok lehetséges állapotait s-el (utalva arra, hogy ezek single state = egyrészecske állapotok), míg a makroszkopikus rendszerünk mikroállapotait továbbra is m-el. A mikroszkopikus objektumok lehetnek klasszikusak, kvantum rendszerek és vegyesek. A fent leírt rendszerre később Maxwell-Boltzman rendszerként hivatkozok majd.

Írjuk fel az ergodikus hipotézis feltételezését kanonikus rendszerre:

$$\hat{P}_{\underline{m}} = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E_{\underline{m}}}{kT}} \tag{464}$$

A fenti képlet értelmében, ha kiszemelünk egy \underbrace{m} mikroállapotát a makroszkopikus rendszernek, akkor

$$\hat{N}_{\underline{m}} = \hat{P}_{\underline{m}} \cdot \hat{N}_{\text{összes}} \tag{465}$$

 \hat{N}_m a sokaságon belül \underline{m} mikroállapotban lévő rendszerek száma és $\hat{N}_{\text{összes}}$ a sokaságot alkotó ekvivalens rendszerek száma.

Ahhoz, hogy a Maxwell-Boltzmann-statisztikát használni tudjuk, egyes feltételeknek teljesülnie kell: megkülönböztethetőség és függetlenség. Vegyük észre, hogy a fent említett M.-B.-rendszerben teljesülnek ezek a kritériumok, hiszen a mikr. objektumok megkülönböztethetőek és függetlenek egymástól. Így felírható az, hogy a rendszeren belül hány objektum található ugyanabban az s állapotban:

$$N_{\underline{s}} = N \frac{1}{\zeta} e^{-\frac{E_{\underline{s}}}{kT}} \qquad \text{ahol az egyrészecske állapotösszeg: } \zeta = \sum_{\underline{s}} e^{-\frac{E_{\underline{s}}}{kT}} \qquad (466)$$

ahol $N_s \Leftrightarrow N_m, N \Leftrightarrow N_{\ddot{o}sszes}, \zeta \Leftrightarrow Z \ (\Leftrightarrow = \text{megfeleltethet} \tilde{o}).$

Konkrét példaként tekinthető egy doboz, melyben 2 (A,B) darab független és megkülönböztethető részecske és 2 (1,2) különböző lehetséges részecskeállapot van. A MB-statisztika arra tud választ adni, hogy hányféleképpen foglalhatják el a részecskék ezt a két állapotot. 4 eset van: 1. állapotban van mindkettő (AB); 2. állapotban van mindkettő (AB); 1.-ben van A, másodikban B; 1.-ben van B, 2.-ban A.

14.4. Maxwell-féle sebességeloszlás.

A Maxwell-féle sebességeloszlás azt adja meg, hogy mi a valószínűsége annak, hogy egy gázmolekula sebességének nagysága a sebességtérben a v és v + dv közé esik (a hőmérséklet és a gázmolekulák tömegének függvényében), alakja:

$$F(v) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m}{2kt}\right)^{3/2} v^2 e^{\frac{-mv^2}{2kt}}$$
(467)



24. ábra. Maxwell-féle sebességeloszlás

15. Kvantumstatisztikák (Mocskonyi Mirkó)

15.1. Ideális kvantumgázok: Bose-Einstein és Fermi-Dirac statisztika

Ideális kvantumgázok: Bose–Einstein és Fermi–Dirac statisztika. Fermi-rendszer T=0 hőmérséklet közelében (degenerált Fermi-gáz), példa degenerált Fermi-gázra: delokalizált elektronok fémekben. Fermi–Dirac- és Bose–Einstein-statisztika magashőmérsékleti határesete (Maxwell–Boltzmann statisztika)

Ebben a tételben részecskék gázának vizsgálatát kvantummechanikai megközelítésből tárgyaljuk. Ehhez felvesszük a gáznak megfelelő teljes (koordinátát és spint tartalmazó) sokrészecskés hullámfüggvényt,

$$\psi(1, 2, 3, \dots, N),$$
 (468)

egy N részecskéből álló rendszer esetén. Ha a gáz ugyanolyan részecskékből áll, akkor a részecskék cseréjére a kvantummechanikai állapot nem változhat meg, azaz például az $1 \leftrightarrow 2$ cserére:

$$\psi(1, 2, \dots, N) = c\psi(2, 1, \dots, N) = c^2\psi(1, 2, \dots, N), \tag{469}$$

ahol c egy komplex szám (ettől még a kvantummechanikai állapot ugyanaz marad), valamint a második egyenlőségnél felhasználtuk azt, hogy a visszacsere is ugyanazt a szorzót hozza be. Tehát $c^2 = 1$, ahonnan c = +1 esetében bozonokról, c = -1 esetében pedig fermionokról beszélünk.

Bozonok esetében tehát a hullámfügvény a részecskecserére teljesen szimmetrikus, fermionok esetén pedig teljesen antiszimmetrikus. A hullámfüggvény szimmetrizálását, illetve antiszimmetrizálását a \hat{P} permutáció-operátor segítségével fölírhatjuk:

$$\hat{P}\psi_B(1,2,\ldots,N) = \psi_B(1,2,\ldots,N); \qquad \hat{P}\psi_F(1,2,\ldots,N) = (-1)^{\delta(P)}\psi_F(1,2,\ldots,N),$$
(470)

ahol ψ_B a bozonokra, ψ_F a fermionokra vonatkozó hullámfüggvény, $\delta(\hat{P})$ pedig a permutációk száma. A spin-statisztika-tétel szerint az egészes spinű részecskék bozonok, míg a félegész spinűek fermionok.

Független részecskék esetén

$$\psi(1,2,\ldots,N) = \psi_{n_1}^{(1)}(1)\ldots\psi_{n_N}^{(N)}(N), \tag{471}$$

ekkor ahhoz, hogy a teljes hullámfüggvényt megkapjuk, az összes lehetséges permutációra föl kell összegezni, valamint megfelelően normálni kell kifejezéseket. Az derül ki, hogy fermionok esetén a hullámfüggvény egy determinánssal, az ún. Slater-determinánssal feleltethető meg, azaz ha egynél több részecske tartózkodna ugyanabban a kvantummechanikai állapotban, akkor $\psi_F \equiv 0$. Ez a Pauli-elv. Bozonok esetében ilyen korlátozás nem lép fel, tetszőlegesen sok részecske tartózkodhat ugyanabban a kvantumállapotban.

Tekintsük tehát bizonyos részecskék gázát. Tegyük fel, hogy a teljes Hamilton-operátor felírható az egyes részecskék Hamilton-operátorainak összegeként (elegendően gyenge köl-

csönhatás esetén):

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \hat{H}^{(i)}, \text{ abol } \hat{H}^{(i)} = \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + U(\hat{x}_i).$$
 (472)

A teljes hullámfüggvény ekkor a 471. egyenlet szerint írható, ahol az n_i értékek az energiasajátállapotokat indexelik. Az egyrészecske állapotokat ekkor

$$\hat{H}^{(i)}\psi^{(i)} = \varepsilon_{n_i}\psi^{(i)}_{n_i} \tag{473}$$

Schrödinger-egyenlet adja meg, ahol ε_{n_i} az n_i -edik energiasajátérték. A teljes energia ekkor

$$E = \sum_{i=1}^{N} \varepsilon_{n_i} = \sum_{k=1}^{\infty} n_k \varepsilon_k, \qquad (474)$$

ahol második szummában n_k (nem egyezik meg n_i -vel!) az ε_k sajátértékkel rendelkező részecskék számát adja meg, valamint $\sum_{k=1}^{\infty} n_k = N$ (n_k csak bizonyos k értékekre nem nulla). A teljes Schrödinger-egyenlet:

$$\hat{H}\psi = E\psi. \tag{475}$$

Az energiák ismeretében már képesek vagyunk statisztikus fizikai állapotösszeget számítani. Mivel jelen esetben fix N mellett a kanonikus állapotösszeget nehéz kiszámítani, ezért a nagykanonikus állapotösszeggel fogunk dolgozni. Ehhez a 474. egyenletben szereplő második szummában bevezetett n_k értékekre, mint új kvantumszámokra térünk át (Fock-reprezentáció). Így a nagykanonikus állapotösszeg nekünk:

$$\mathcal{Z} = \sum_{i} e^{-\beta(E_i - \mu N_i)} = \sum_{\{n\}} e^{-\beta \sum_{k=1}^{\infty} n_k(\varepsilon_k - \mu)}, \qquad (476)$$

ahol $\{n\} = \{n_k | k = 1, 2, \dots\}$ és $\beta = \frac{1}{k_B T}$. Számítsuk ki!

$$\mathcal{Z} = \sum_{n_1} \sum_{n_2} \cdots \prod_{k=1}^{\infty} e^{-\beta n_k(\varepsilon_k - \mu)} = \prod_{k=1}^{\infty} \sum_{n_k} e^{-\beta n_k(\varepsilon_k - \mu)}$$
(477)

A produktum alatti szummát kiszámíthatjuk, ha kihasználjuk, hogy fermionok esetén $n_k = 0, 1$ míg bozonok esetén $n_k = 0, 1, 2, \ldots$:

$$S_F = \sum_{n_k=0}^{1} e^{-\beta n_k(\varepsilon_k - \mu)} = 1 + e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)}; \quad S_B = \sum_{n_k=0}^{\infty} e^{-\beta n_k(\varepsilon_k - \mu)} = \frac{1}{1 - e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)}}, \quad (478)$$

ahol használtuk a mértani sorösszeg képletét (bozonok esetén csak $\varepsilon_k > \mu$ esetben kovergens a sor, általában $\mu < 0$ kell). Ezeket fölhasználva fölírhatjuk a nagykanonikus potenciált a következőképp:

$$\Phi(T, V, \mu) = -k_B T \ln \mathcal{Z} = -k_B T \sum_{k=1}^{\infty} \ln S_{F/B} = \mp k_B T \sum_{k=1}^{\infty} \ln \left(1 \pm e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)}\right), \qquad (479)$$

ahol a produktum helyett már a logaritmusok összegét írjuk. A nagykanonikus potenciálból a részecskeszámot megkaphatjuk:

$$N = -\frac{\partial\Phi}{\partial\mu} = \pm k_B T \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{1 \pm e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)}} \left(\pm \beta e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)}\right) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} \pm 1} = \sum_{k=1}^{\infty} \langle n_k \rangle_{F/B},$$
(480)

ahol bevezettük a

$$\langle n_k \rangle_{F/B} = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} \pm 1} \tag{481}$$

jelölést, ami tulajdonképpen a nemkölcsönható kvantumgáz k-adik egyrészecske állapotának betöltöttségét adja meg. A + esetben beszélünk Fermi-Dirac-, – esetén pedig Bose-Einsteinstatisztikáról. A 480. egyenlet megadja a részecskeszámot, az energia pedig

$$E = \sum_{k=1}^{\infty} \langle n_k \rangle_{F/B} \varepsilon_k.$$
(482)

A betöltöttséget mutatja a két esetben a 25. ábra.



25. ábra. Kvantumstatisztikák betöltési számai

Át szeretnénk térni folytonos ε változóra. Ehhez azt használjuk fel, hogy a fázistéren az egyrészecske állapotok a betölthető térfogat növelésével besűrűsödnek (az állapotszám fázisintegráljában a térfogatra is integrálunk, ennek pedig az energia szerinti deriváltja az állapotsűrűség). Az állapotszám fázisintegrálja egy adott $E(|\mathbf{p}|) \leftrightarrow p(E)$ diszperziós reláció esetén $(p = |\mathbf{p}|)$:

$$\Omega_0(\varepsilon) = g \int_{E(p) \le \varepsilon} \frac{\mathrm{d}^3 x \mathrm{d}^3 p}{h^3} = \frac{gV}{h^3} \int_{E(p) \le \varepsilon} 4\pi p^2 \mathrm{d}p = \frac{gV}{h^3} \int_{\varepsilon_0}^{\varepsilon} 4\pi p(E)^2 \frac{\mathrm{d}p(E)}{\mathrm{d}E} \mathrm{d}E, \qquad (483)$$

aholg=2s+1a spindegeneráció. Az állapotsűrűség definíció szerint

$$D(\varepsilon) = \frac{\mathrm{d}\Omega_0}{\mathrm{d}\varepsilon} = \frac{gV}{h^3} 4\pi p(\varepsilon)^2 \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}E}\Big|_{E=\varepsilon} = CV\varepsilon^{\alpha}.$$
(484)

Ez alapján a részecskeszám, valamint az energia felírhatóak integrálformában:

$$N = \int_0^\infty D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon; \qquad E = \int_0^\infty \varepsilon D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon, \tag{485}$$

ahol $f(\varepsilon)=\frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon-\mu)}\pm1}$ attól függően, hogy fermion, vagy bozongázról van-e szó.

15.2. Fermi-rendszer T = 0 K közelében (degenerált Fermi-gáz)

15.2.1. Fermi-függvény viselkedése

Ebben a fejezetben megvizsgáljuk a Fermi-rendszerek viselkedését T = 0 K hőmérséklet közelében. A Fermi-Dirac-statisztikának menetét már láttuk a 25. ábrán. Fermionok esetén a kvantumstatisztika

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1}.$$
(486)

A függvény néhány fontos tulajdonsága: $\varepsilon = \mu$ esetén az értéke 0.5, $\varepsilon \to \infty$ esetén $f(\varepsilon) \to 0$, valamint $\varepsilon < \mu$ esetben a $T \to 0$ K határesetben $f(\varepsilon) \to 1$. Ez azt jelenti, hogy ha T = 0 K lenne, akkor a függvény egy lépcsőfüggvénybe menne át, amely $\varepsilon < \mu$ tartományon 1, fölötte pedig 0 értéket vesz fel. Ezek megfigyelhetőek a 26. ábrán. Látható tehát, hogy a Fermi-függvény csak μ közelében változik számottevően. A degeneráció jelentése, hogy a Fermi-energia alatti állapotok mind, vagy majdnem mind be vannak töltve a legkisebb energiától kezdődően föltöltődve (ez a Pauli-féle kizárási elv következménye). A Fermi-energia közelében hirtelen levág a függvény, látszik tehát az energia minimalizálódása Fermi-rendszerben. T = 0 K esetben a lépcsőfüggvénnyel egyszerű számolni, ekkor a reészecskeszám, illetve az energia:

$$N = \int_0^\infty D(\varepsilon)\Theta(\mu_0 - \varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon = \int_0^{\mu_0} D(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon; \qquad E = \int_0^{\mu_0} \varepsilon D(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon, \tag{487}$$

ahol $\Theta(x)$ a Heaviside-lépcsőfüggvény, μ_0 -t pedig az első összefüggés definiálja, Fermi-nívónak, vagy Fermi-energiának nevezik, jelölni szokás ε_F -fel is.

15.2.2. Példa degenerált Fermi-gázra: delokalizált eletkronok fémekben

Vizsgáljuk a fémekben levő delokalizált nemrelativisztikus elektronokat degenerált Fermigázként! Ekkor az elektronokat szabad részecskeként kezeljük, feltesszük, hogy a többi elektron és a pozitív rácsionok egymás Coulomb-kölcsönhatását leárnyékolják. Így alkalmazhatjuk



26. ábra. Fermi-függvény menete különböző hőmérsékleteken

a fenti független egyrészecskés leírásmódot. A diszperziós relációjuk $E = \frac{p^2}{2m}$, tehát az állapotsűrűség 484. egyenlet alapján

$$D(\varepsilon) = \frac{gV}{h^3} 4\pi \cdot 2\varepsilon m \frac{m}{\sqrt{2\varepsilon m}} = 4\pi V \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} \varepsilon^{\frac{1}{2}},\tag{488}$$

ahol kihasználtuk, hogy elektronokra $s=\frac{1}{2},$ így
 g=2.A részecskeszám integráljaT=0K-nél:

$$N = 4\pi V \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon^{\frac{1}{2}} \mathrm{d}\varepsilon = \frac{8\pi V}{3} \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} \varepsilon^{\frac{3}{2}},\tag{489}$$

amiből a Fermi-energia:

$$\varepsilon_F = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3N}{8\pi V}\right)^{\frac{2}{3}}.$$
(490)

Ezt az összefüggést átalakíthatjuk szemléletes módon:

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3N(2\pi)^3}{8\pi V}\right)^{\frac{2}{3}} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(3\pi^2 \frac{N}{V}\right)^{\frac{1}{3}} \right]^2 = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m},\tag{491}$$

ahol bevezettük
a k_{F} Fermi-hullámszámot. Tovább alkalmazva ezt a jelölést a következők
et írhatjuk:

$$p_F = \hbar k_F; \quad k_F = (3\pi^2 n)^{\frac{1}{3}} \Rightarrow \lambda_F = \frac{2\pi}{k_F} = \left(\frac{8\pi}{3n}\right)^{\frac{1}{3}},$$
 (492)

ahol $n=\frac{N}{V}$ a részecskesűrűség. Bevezetjük még továbbá a Fermi-hőmérsékletet: $T_F=\frac{\varepsilon_F}{k_B}.$

Az energiát a részecskeszámhoz hasonlóan számolhatjuk:

$$E = \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon D(\varepsilon) d\varepsilon = 4\pi V \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{2}{5} \varepsilon_F^{\frac{5}{2}} = \frac{3}{5} N \varepsilon_F.$$
(493)

Ennek ismeretében felírhatjuk a Fermi-gáz nyomását is:

$$P = -\frac{\partial E}{\partial V} = -\frac{3}{5}N\frac{\partial \varepsilon_F}{\partial V} = \frac{2}{5}n\varepsilon_F,\tag{494}$$

tehátT=0K hőmérsékleten is nagy nyomása (~ $n^{\frac{5}{3}}$, és fémekben az elektronsűrűség nagy: $n\approx 10^{23}\frac{1}{\mathrm{cm}^3})$ van a rendszernek.

A degeneráltság úgy is megközelíthető, hogy a termikus de Broglie hullámhossz ($\lambda_T \sim k_T^{-1} \sim \varepsilon_T^{-\frac{1}{2}} \sim T^{-\frac{1}{2}}$) sokkal nagyobb, mint a részecskék átlagos távolsága ($d \sim n^{-\frac{1}{3}} \sim \lambda_F \sim T_F^{-\frac{1}{2}}$), vagyis $\lambda_T \gg \lambda_F$, azaz $T \ll T_F$. Számítsuk ki ezt a fém elektronjai esetén:

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(3\pi^2 n \right)^{\frac{1}{3}} \right]^2 \sim 10^{-18} \mathrm{J} \implies T_F \approx 80000 \mathrm{K}.$$
(495)

Látható, hogy akár a szobahőmérsékleten (T = 300 K) vizsgált fémre is nagyon jó közelítés a degenerált Fermi-gáz leírásmódja. Ez abból is látszik, hogy fémekben jó közelítéssel teljesül a Dulong-Petit-szabály (a fajhő $c_V = 3R$), vagyis a fajhő számottevően csak a kristály szabadsági fokaiból jön. Ehhez képest a kristályban degenerált Fermi-gázként kezelt elektronok járulékát vizsgálhatjuk, ekkor a vezetési sávot az elektronok nagyságrendileg a Fermi-energiáig töltik be, amelyre $\varepsilon_F \gg k_B T$, ha T a hőmérséklet. Mivel ε_F körül a degenerált Fermi-függvény rohamosan lecsökken 1-ről 0-ra, ezért csak az ottani $k_B T$ sávban elhelyezkedő elektronok tudnak magasabb energiaszintre jutni (alacsonyabb energiákon levő elektronok nem, mivel a Pauli-elv nem engedi a magasabban is betöltött állapotok miatt). Ez azt jelenti, hogy a gerjesztődni képes elektronok száma ~ $N \frac{T}{T_F}$, vagyis a fajhőhöz várhatóan $\frac{3}{2}R \frac{T}{T_F}$ járulékot adnak (ekvipartíció szerint). Látható, hogy $T \ll T_F$ esetben, vagyis nem túl magas hőmérsékleten az elektronfajhő elhanyagolható a kristályé mellett. Tulajdonképpen felfoghatjuk úgy, hogy a szabadsági fokok alacsony hőmérsékleten kifagynak.

Megjegyzésképp, a Bose-gáz gyökeresen máshogy viselkedik alacsony hőmérsékleten; előfordulhat ugyanis az ún. Bose-Einstein-kondenzáció jelensége, avagy egy (általában nagyon alacsony) kritikus hőmérséklet alatt a részecskék nagy része a legkisebb energiájú kvantumállapotba kerül. Ekkor a mikroszkopikus kvantumos jelenségek makroszkopikusan is észrevehetővé válnak.

15.3. Fermi-Dirac és Bose-Einstein statisztika magas hőmérsékleti határesete

Térjünk vissza a 481. egyenletben használt diszkrét írásmódra! A magas hőmérsékletű határesetet vizsgáljuk, írjuk ekkor fel a részecskeszámot:

$$N = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} \pm 1}.$$
(496)

Ha $T \to \infty$, akkor $\beta \to 0$, azaz a fix részecskeszámot adó szummában az exponenciális csökken, amit akkor lehet ellensúlyozni, ha $-\mu \gg \varepsilon_k$ (μ egy nagy negatív szám), azaz ha $\langle n_k \rangle_{F/B} \ll 1$. Ekkor

$$e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} \gg 1 \Rightarrow \langle n_k \rangle_{F/B} \approx e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)} = \langle n_k \rangle,$$
 (497)

vagyis már nincs különbség a két statisztika között. Ekkor a
z ε_k energiához tartozó valószínűség:

$$P_k = \frac{\langle n_k \rangle}{N} = \frac{\mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)}}{\sum\limits_{k=1}^{\infty} \mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)}} = \frac{\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon_k}}{\sum\limits_{k=1}^{\infty} \mathrm{e}^{-\beta\varepsilon_k}} = \frac{\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon_k}}{Z},\tag{498}$$

ami a Maxwell-Boltzmann-statisztika.

Ez a határeset tekinthető alacsony részecskesűrűség mellett is, ekkor is $\langle n_k \rangle_{F/B} \ll 1$ a feltétel. Tulajdonképpen ez azt jelenti, hogy a részecskék hullámfüggvényei nem fednek át, vagyis a klasszikus esetet kapjuk vissza.

16. Mágneses rendszerek (Friss Gergely)

Atomi paramágnesség, atomi diamágnesség, Pauli-szuszceptibilitás, Landau-diamágnesség. Ferro-, antiferro- és ferrimágneses anyagok, ferromágneses domének, hiszterézis. Curie–Weisstörvény. Szupravezetés.

Vannak anyagok, melyek mágneses tulajdonsága csak külső mágneses tér hatására mutatkozik. A külső tér hatására indukálódott mágneses tér azzal lehet ellentétes (diamágnes) és azonos (paramágnes) irányú is. Ezek a külső mágneses tér megszűnése után elvesztik mágneses tulajdonságaikat. Azokat az anyagokat, amik megtartják ezen tulajdonságukat ferromágneseknek hívjuk. A mágnesség tárgyalásához szükségesek a következő fogalmak: mágneses indukció (**B**), mágneses térerősség (**H**), mágnesezettség (**M**) illetve mágneses szuszceptibilitás (χ). Utóbbi teremt kapcsolatot **M** és **H** között lineáris közelítésben: **M** = χ **H**.

$$\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{M} + \mathbf{H}) = \mu_0(1 + \chi)\mathbf{H} = \mu\mathbf{H}$$
(499)

A szuszceptibilitás diamágneses anyag esetében negatív és általában ~10⁻⁴, míg paramágneses anyag esetében ~10⁻³ nagyságrendű.

A mágneses tulajdonságokat az elektronok határozzák meg, így vizsgáljuk a külső térben mozgó elektron Lagrange-függvényét:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}mv^2 - e\mathbf{v}\mathbf{A}(\mathbf{r}(t)) + e\phi(\mathbf{r}(t))$$
(500)

Felírva az Euler-Lagrange egyenletet kapjuk a Lorentz erőt. A kanonikus impulzus: $p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial v_i} = mv_i - eA_i$. Ezt felhasználva a Hamilton-függvény: $H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 - e\phi$. Vizsgálódjunk külső elektromos tér nélkül és Coulomb-mértékben ($\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$). Mivel $\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B}$, ezért $\mathbf{A} = -\frac{1}{2}\mathbf{r} \times \mathbf{B}$ alakban írható a vektorpotenciál. Ezt, illetve az impulzusmomentumra igaz $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = \hbar \mathbf{l}$ egyenlőséget felhasználva a Hamilton függvény a következő alakot ölti:

$$H = \frac{1}{2m}p^2 + \mu_B \mathbf{lB} + \frac{e^2}{8m} (\mathbf{B} \times \mathbf{r})^2 \xrightarrow{+spin} H = \frac{1}{2m}p^2 + \mu_B (\mathbf{l} + g_e \mathbf{s})\mathbf{B} + \frac{e^2}{8m} \mathbf{B}^2 \mathbf{r}_{\perp}^2$$
(501)

ahol \mathbf{r}_{\perp} az elektron helyvektorának merőleges komponense a **B** mezőre, $\mu_B = \frac{\hbar e}{2m}$ a Bohrmagtnetron és $g_e \approx 2$ az elektron giromágneses faktora. Több elektronra első közelítésben vehetnénk minden elektron Hamilton-függvényének az összegét, azonban ez nem felel meg a valóságnak, hiszen nem vesszük figyelembe az elektronok egymással való kölcsönhatását. A Hamilton-függvényből származtatható a mágnesezettség is, ami az elektronok mágneses momentumának (**m**) várható értéke. Statisztikus fizikai ismeretink alapján (*F* a szabadenergia):

$$\mathbf{M} = \frac{1}{V} \frac{\sum_{i} \mathbf{m}_{i} e^{-\frac{H_{i}(\mathbf{B})}{k_{B}T}}}{\sum_{i} e^{-\frac{H_{i}(\mathbf{B})}{k_{B}T}}} \quad \text{, illetve} \quad F = -k_{B} T ln \left(\sum_{i} e^{-\frac{H_{i}(\mathbf{B})}{k_{B}T}}\right) \tag{502}$$

Egy dipólus energiája $E_i = -\mathbf{m}_i \mathbf{B}(=H_i)$, amit felhasználva a mágnesezettség

$$\mathbf{M} = -\frac{1}{V} \frac{\partial F}{\partial \mathbf{B}} \tag{503}$$

módon kapható. A szuszceptibilitás értéke pedig:

$$\chi = \frac{dM}{dH} \approx \mu_0 \frac{dM}{dB} = -\frac{\mu_0}{V} \frac{d^2 F}{dB^2}$$
(504)

Itt a vektrojelölést elhagytam, mert párhuzamosak a vektorok, illetve a közelítés csak kis szuszceptibilitás esetében érvényes.

16.1. Atomi diamágnesség

A diamágnesség egy kalsszikusan is értelmezhető jelenség, a Lenz-törvény következménye. Minden anyagban fellép. A (501) Hamilton-függvénynek a 3. tagja írja le, a szabadenergia számolásánál ezt használjuk. Több közelítéssel is élünk: kis külső térben vizsgálódunk, így az alapállapotot vesszük figyelembe (nincs összegzés); az elektronok kölcsönhatásától eltekintünk, így a szabadenergia megegyezik egy elektron szabadenergiájának N-szeresével (N db elektron); gömbszimmetrikus esetet vizsgálunk ($\langle r_{\perp} \rangle = \frac{2}{3} \langle r \rangle \approx \frac{2}{3} a_0$, a_0 a Bohr-sugár). (504) egyenletet felhasználva kaphatjuk a szuszceptibilitást, amely negatív értékű, tehát az anyagon belül kisebb lesz a **B** (n = N/V).

$$\chi_{dia} = -n \frac{e^2 \mu_0}{6m} a_0^2 \tag{505}$$

16.1.1. Atomi paramágnesség

A paramágnesség egy kavantumos jelenség a (501) Hamilton-függvény második tagjával írható le. Mivel a kvantummechanika kialakulása előtt is ismert volt e jelenség, ezért próbálkoztak klasszikus módon is leírni. Langevin ötlete volt, hogy legyen az elektronnak mágneses momentuma (μ), így az energiája $E = -\mu \mathbf{B} = -\mu B \cos \vartheta$. Ekkor az állapotösszeg kiszámítását integrálással végezzük (klasszikus számolás):

$$Z = \int e^{\frac{\mu B}{k_B T} \cos\vartheta} d\Omega = 4\pi \frac{k_B T}{\mu B} sh\left(\frac{\mu B}{k_B T}\right)$$
(506)

Ebből számolható a szabadenergia majd a szuszceptibilitás. A közelítések ugyan azok, mint a diamágnességnél. A szuszceptibilitás pozitív, azaz az anyagban nagyobb lesz **B** értéke, illetve fordítottan arányos a hőmérséklettel. Utóbbit nevezzük Curie-törénynek.

$$\chi_{para,Cl} = \mu_0 \frac{n\mu^2}{3k_B T} \tag{507}$$

Az elektron mágneses momentuma a Langevin-függvénnyel írható le: $\langle \mu \rangle = \mu L(\mu B/k_B T)$, ahol $L(x) = -\frac{d}{dx} ln(sh(x)/x)$.

A paramágnesség kvantumos levezetését Brillouin tette meg először. Ehhez szükséges a Wigner-Eckart tétel, melyből a Hamilton-függvényt számolhatjuk (g_j a giromágneses faktor):

$$\mu_B(\mathbf{l} + g_e \mathbf{s}) = \mu_b g_j \mathbf{j} \Longrightarrow H = \mu_B g_j j_z B, \quad j_z = -j, ..., j$$
(508)

Ez alapján felírhatjuk az állapotösszeget, amiről egy kis átalakítással (kiemeléssel) észrevehető, hogy egy mértani sorösszeg. Szokásos módon kiszámoljuk a szabadenergiát, majd

a mágnesezettséget. Utóbbiban megjelenik a Brillouin-függvény $(B_j(x))$, melyet sorba fejtünk (kis külső tér): $B_j(x) \approx \frac{j+1}{j} \frac{x}{3}$. Ebből a szuszceptibilitás a korábbiaknak megfelelően számolható. Értéke pozitív és fordítottan arányos a hőmérséklettel, akárcsak a klasszikus esetben.

$$Z = \sum_{j_z=-j}^{j} e^{-\beta E_0} e^{-\beta g_j \mu_B j_z B} = e^{-\beta E_0} \frac{sh(\beta g_j \mu_B (j + \frac{1}{2})B)}{sh(\beta g_j \mu_B \frac{B}{2})} \Rightarrow F \Rightarrow M$$
(509)

$$B_{j}(x) = \frac{2j+1}{2j} cth(\frac{2j+1}{2j}x) - \frac{1}{2j} cth(\frac{1}{2j}x) \Rightarrow M = ng_{j}\mu_{B}jB_{j}(\beta g_{j}\mu_{B}jB)$$
(510)

$$\Rightarrow \chi_{para,QM} \approx n\mu_0 \frac{g_j^2 \mu_B^2 j(j+1)}{3k_B T}$$
(511)

16.2. Pauli-szuszceptibilitás és Landau diamágnesség

n

A **Pauli-szuszceptibilitás** a paramágnességet írja le alacsony hőmérsékleten, elektrongázt (1/2 spinű Fremi gáz) vizsgálva. Mágneses térbe helyezett elektron energiájának megváltozása $\Delta E = \pm \frac{1}{2}g_e\mu_B B$. Itt a $\pm \frac{1}{2}$ tag a spinből jön. A kémiai potenciál az energiaváltoz hatására nem változik (27. ábra). Kis mágneses tér esetében a különböző spinű elektronok állapotsűrűségét (ρ_{\uparrow} , ρ_{\downarrow}) sorba fejthetjük. Az állapotsűrűségből számolható a számsűrűség is a kétféle spinnél külön-külön (n_{\uparrow} , n_{\downarrow} és f(E) a Fermi-Dirac eloszlásfüggvény). A mágnesezettség $M = \frac{1}{2}g_e\mu_B(n_{\downarrow} - n_{\uparrow})$ módon számolható. Itt használjuk



27. ábra. Nem változik a terület, így a kémiai potenciál sem.

ki, hogy alacsony hőmérsékleten számolunk. Az integrál kiszámításához a Bethe-Sommerfeld sorfejtést használjuk, aminek csak az első tagját hagyjuk meg (vezető rend). A mágnesezettségből számolhatjuk a szuszceptibilitást is, melyben az elektron állapotsűrűség jelenik meg a Fermi-energia (E_f) helyén kiértékelve. A szabad elektron állapotsűrűségét felhasználva a szuszceptibilitás a Fermi-energiától fordítottan arányosan függ, illetve hőmérsékletfüggetlen (ez a Bethe-Sommerfeld sorfejtés következménye). Magasabb hőmérsékleten a modell visszaadja a Curie-törvényből jövő hőmérsékletfüggést.

$$\rho_{\uparrow\downarrow} = \frac{1}{2}\rho(E \mp \frac{1}{2}g_e\mu_B B) \approx \frac{1}{2}\rho(E) \mp \frac{1}{4}g_e\mu_B B \frac{d\rho(E)}{dE}$$
(512)

$$\uparrow\downarrow = \int \rho_{\uparrow\downarrow}(E) f(E) dE \tag{513}$$

$$\Rightarrow M = \frac{1}{4}g_e^2\mu_B^2 B \int \frac{d\rho(E)}{dE} f(E)dE \xrightarrow{\text{parc. int}} M = \frac{1}{4}g_e^2\mu_B^2 B\rho(E_f)$$
(514)

$$\xrightarrow{\text{szabad } e^-} \chi_P = \frac{3}{8} \mu_0 \frac{n g_e^2 \mu_B^2}{E_f} \tag{515}$$

A Landau diamágnesség a diamágneses anyagok kavantummechanikai leírása. A kiindulási ötlet az, hogy a külső mágneses tér hatására a szabed elektronok körpályán mozognak, így mágneses teret keltenek, ami gyengíti a külső teret. A szuszceptibilitás értékére a Pauli-szuszceptibilitás-1/3-szorosa adódik.²

16.3. Ferromágnesség

A ferromágneses anyagokban az atomi mágneses momentumok rendezetten állnak. Alacsony hőmérsékleten (vagy kellően erős külső mágneses tér hatására) az anyag egészében a mágneses momentumok egy irányba állnak. Magasabb hőmérsékleten ez nem teljesül, mágneses domain-ek alakulnak ki. A ferromágneses anyagok megőrzik mágneses tulajdonságaikat a külső mágneses tér megszűnése után is. Egy kritikus hőmérséklet (Curie-hőmérséklet, T_C) azonban a rendezettség teljesen megszűnik, az anyag paramágnesként viselkedik. A **domainszerkezet** kialakulása könnyen érthető. Képzeljük el, hogy magas hőmérsékletről hűtjük le az anyagot. A hűlés következtében az atomi mágneses momentumok könnyeben tudnak rendeződni. Energetikailag az a legkedvezőbb, ha párhuzamosak és egy irányba néznek. Ahogy hűl az anyag, egyre több helyen megindul a momentumok egy irányba állása. Ez több különböző helyen is megindul az anyagban, azonban ezen domain-ek irányultsága nem feltétlen egyezik meg (küldő tér hiányában). A domain-ek addig nőnek, amíg másik domainba nem "ütköznek". Ahhoz nincs elég energiájuk, hogy a másik domaint átforgassák, így a domain-ek mágneses momentumai már képesek egy irányba rendeződni.



28. ábra. A ferromágneses anyagok domain-szerkezetének változás külső tér hatására

A ferromágneses anyagokra jellemző másik tulajdonság a **hiszterézis**, ami az átmágnesezéssel szemben mutatott ellenállás. Oka az átmegnesezéskor történő domainfal-mozgás. Adott mértékű és irányú mágnesezés után maradt remanens mágnesezettsége (külső tér megszűnése utáni mágnesezettsége) az anyagnak függ a mágnesezés előtti állapotától. Ez e legjobban akkor látszik, ha az anyagot teljesen átmegnesezzük egy irányba, majd a másikba és megint vissza. A két szélsőséges eset közti átmenet különbözik. Ez jól látható a B - H vagy M - Hgrafikonokon. H növelésével (irányultság most mindegy) szaturáció megy végbe, azaz a ferromágneses anyag mágnesezettsége telítődik (az összes momentum orientációja megegyezik), egy konstans (szaturációs mágnesezettség) értékhez tart. Ha B-t ábrázoljuk H függvényében, akkor a görbe nem konstanshoz, hanem egy egyeneshez tart. Két (valójában négy) másik kitüntetett pont van: a külső tér megszűnése után visszamardó mágnesezettség, a remanens mágnesezettség, illetve az anyag terét éppen kompenzáló külső térerősség, melyet koercitív erőnek nevezünk. A ferromágneses anyag átmágnesezéséhez energiát kell befektetni. Ezen

²Erről semmikor nem tanultunk és csak ennyit találtam róla.

energia nagysága arányos a hiszterézis görbe által bezárt területtel. A keskeny, kis területet bezáró hiszterézgörbével rendelkező anyagokat lágymágnesnek hívjuk. Ilyen anyag van pl. a transzformátorokban, hogy az energiaveszteség kicsi legyen. A széles, nagy területet bezáró hiszterézis görbével rendelkező anyagokat pedig keménymágneseknek hívjuk. Ilyen anyagból készülnek az állandó mágnesek, iránytűk.



29. ábra. Hiszterézis görbe.

A ferromágnesség matematikai leírásához a (510) egyenletben leírt paramágnesekre érvényes mágnesezettségből indulhatunk ki, hiszen magas hőmérsékleten paramágnesként viselkednek a ferromágneses anyagok. A jelenségből természetéből eredendően figyelembe kell vennünk az atomok közötti kölcsönhatást. Weiss ötlete nyomán ezt megtehetjük **átlagtér közelítésben**.

Ennek lényege, hogy a többi atom hatását egyként kezeljük, a mágnesezettséggel arányosan. A vizsgált atom így egy effektív teret érez: $B_{eff} = \mu_0 H + \lambda M$. Először az egyszerűség kedvéért nézzük a H = 0 esetet. Ekkor *M*-re egy transzcendes egyenletet kapunk, melyet ábrázolva az látszik, hogy $T \geq T_C$ esetében csak az M = 0 megoldás létezik, azonban $T < T_C$ esetében már van nem triviális megoldás is.

$$M = ng_j \mu_B j B_j (\lambda \frac{g_j \mu_B j}{k_B T} M)$$
(516)



A Brillouin-függvény közelítő értékét most is hasz-

nálhatjuk, majd az egyenletet M szerint deriválva 30. ábra. A mágnesezettségre vonatkomegállapítható a kritikus hőmérséklet. A kritikus zó egyenlet grafikus megoldása hőmérséklet felett számolható szuszceptibilitás (paramágneses). Nézzük a (516) egyenletet külső tér esetében ($\lambda M \rightarrow \lambda M + \mu_0 H$). A Brillouin-függvény közelítését és az előzőleg megkapott kritikus hőmérsékletet felhasználva a következő arányosságok teljesülnek, melyeket Curie–Weiss-törvénynek hívunk:

$$M \propto \frac{H}{T - T_C} \qquad \chi \propto \frac{1}{T - T_C} \qquad T > T_C$$
 (517)

A kritikus hőmérséklet alatt a mágnesezettséget vizsgáljuk. Ehhez a mágnesezettségre vonatkozó egyenletet sorba fejtjük, M-ben harmadrendig. T_C értékét megint felhasználjuk. A kritikus hőmérsékleten már $H \neq 0$ esetben vizsgáljuk.

$$M \propto (T_C - T)^{\frac{1}{2}} \qquad T < T_C$$
 (518)

$$M \propto H^{\frac{1}{3}} \qquad T = T_C \tag{519}$$

A ferromágnességet másból kiindulva próbálta meg leírni Landau. A termodinamika alapján igyekezett megoldani a ferromágnesség problémáját, így ez egy fenomenologikus elmélet. Egy kapcsolatot igyekezett felírni a szabadenergia és a mágnesezettség között, ami $M \leftrightarrow -M$ invariáns, hiszen függetlennek kell lennie a ferromágneses jelenségnek a mágnesezettség irányától. Ez a **Landau-elmélet** és ugyan azokra az eredményekre vezet, mint az átlagtér közelítés.

$$\frac{F}{V} = f_0 + A(T)M^2 + \frac{B(T)}{2}M^4, \qquad A(T) = a(T - T_C), \quad B(T) = const > 0$$
(520)

Később Landau és Ginzburg kidolgozta azt az elméletet, ami figyelmbe veszi a domainfalak energiáját is, ez a **Ginzburg-Landau elmélet**. A szabadenergiát mint M funkcionálját kezelik.

16.4. Antiferro- és ferrimágneses anyagok

Vannak anyagok, melyekben az atomi mágneses momentumok rendezetten vannak, azonban az eredő mágnesezettség 0. Az anyagban egymással ellentétes irányú, megegyező nagyságú momentumok vannak jelen, amik kioltják egymást. Az ilyen anyagokat hívjuk **antiferromágneses anyagoknak**. Ha különböző atomokból épül fel az anyag, amely atomoknak eltérő nagyságú és ellentétes irányú mágneses momentuma van, akkor nem teljesen oltják ki egymást azok. Az ilyen anyagokat ferrimágneses anyagoknak hívjuk.



16.5. Szupravezetés

A szupravezetés jelenségét először Onnes figyelte meg 1911-ben. Higany maradék ellenállását akarta kimérni. A maradék ellenállás a szennyezések és rácshibák következménye, ami miatt egy fém ellenállás 0 K-en sem 0. Azonban Onnes azt tapasztalta, hogy kb. 4 K környékén a higany ellenállása hirtelen 0-ra esett, szupravezető lett. Azóta több anyagnál is megfigyelték ezt a jelenséget, azonban nagy részük csak nagyon alacsony hőmérsékleten válik szupravezetővé. Vannak azonan olyan anyagok, ún. magashőmérsékletű szupravezetők, amik már a nitrogén forráspontja felett is szupravezetővé válnak. Pl. néhány kerámia is ilyen, amik normál körülmények között szigetelők. A hőmérsékletet, ami alatt az anyag szupravezetővé alakul kritikus hőmérsékletnek (T_c) nevezzük. A kritikus hőmérséklet alatt fellép még egy jelenség: Az anyag tökéletes diamágneses tulajdonságot mutat, azaz a szuszceptibilitása $\chi = -1$. Ez azzal jár, hogy a mágneses indukció kiszorul az anyag belsejéből. Ez a Meissner-effektus. Szupravezető anyag esetében a Meissner-effektus fellép akkor is, ha először lehűtjük a mintát T_c alá és aztán kapcsoljuk be a külső teret és vica versa. A szupravezető állapot nem csak a hőmérséklettől, hanem a külső mágneses térerősség (H) nagyságától is függ. Kellően nagy mágneses térerősség lerombolja a szupravezetést. Ezt figyelembe véve a szupravezetőknek kettő típusát különböztetjük meg. Az elsőfajú szupravezetők esetében a szupravezető állapotban lévő anyag mindaddig szupravezető marad és kiszorítja a **B** teret, ameddig a külső mágneses térerősség egy kritikus értéket el nem ér (állandó $T < T_c$ esetében). Ennél nagyobb H mellett az anyag normálisan viselkedik. Az elsőfajú jelző arra utal, hogy elsőrendű fázisátalakulás megy végbe. A másodfajú szupravezetőkben kettő kritikus H érték van. Az első kritikus értéknél nagyobb, de a másodiknál kisebb térerősség esetén a minta továbbra is szupravezető (0 az ellenállása), azonban a mágneses indukció már behatol a mintába, H növelésével folytonosan. Ez annak a következménye, hogy a minta nem teljes egésze szupravezető állapotú. A nem szupravezető, normális fázis a külső tér irányába álló csövekben helezkedik el. Ezekben a csövekben ${\bf B}$ nagysága pontosan akkora, hogy a csövön egy $\phi_0 = h/(2e)$ fluxuskvantumnyi mágneses fluxus halad át. A csövek felületén körbefolyó örvényszerű áramok miatt ezeket a csöveket vortexeknek nevezik. Az áram azért folyhat ellenállás nélkül, mert a vortexeket a kristályhibák nem engedik elmozdulni.



32. ábra. A szupravezető anyagok típusai.

A szupravezetés matematikai leírására a London fivérek javasoltak egy megoldást. A Maxwell-egyenletek érvényességét megtartották, csak az anyagi egyenleteken módosítottak, hiszen a differenciális Ohm-törvény értelmezhetetlen 0 ellenállás esetében. Coulomb-mértékben számoltak és a $\mathbf{j} = -en\mathbf{v}$, valamint a $m\dot{\mathbf{v}} = -e\mathbf{E}$ mozgásegyenletből indultak ki. A Maxwell-

egyenleteket 3 felhasználva a London-egyenletet kapták, melyből az indukcióra a következő összefüggés vezethető le:

$$\Delta \mathbf{B} = \frac{1}{\lambda} \mathbf{B} \tag{521}$$

Megfelelő koordinátarendszerben elég a z-komponens megoldását nézni, ami a szupravezetőn belül $B_z(x) = B_0 e^{-x/\lambda}$, ahol x a távolság a felszíntől és λ a London-féle behatolási mélység. Ez szabja meg, hogy az anyagba milyen mélyen hatolhat be az indukció, szupravezetésnél kiszorul a felszín közelébe. A fluxus kvantumának nagyságát a Sommerfeld kvantálásból kaphatjuk, felhasználva, hogy $\mathbf{p} = m\mathbf{v} - e\mathbf{A}$. Az integrálási utat jól megválasztva könnyen kapjuk, hogy a fluxus $\phi = h/e$. Azonban ennek h/(2e)-nek kellene lennie. Ez azzal magyarázható, hogy az előbbi számolás során egy elektronnal számoltunk, a valóságban az elektronok párokba rendeződnek a szupravezetőben. Innen a kettes szorzó eltérés. Az ilyen elektronpárt Cooper-párnak nevezzük, ami egy bozon. Létrejötte azzal magyarázható, hogy a mozgó elektron fononrezgést kelt az anyag rácsában, amit egy másik elektron elnyelhet. A rács közvetítésével tehát a két elektron egymás pályáját befolyásolja. Elég erős kölcsönhatás és ellentétes spinű elektronok esetében alakulhat ki a Cooper-pár.

³és egy kevés vektorszámítási ismeretet

17. Kristályos anyagok fizikája (Kovács Zoltán)

Szimmetriák, pontcsoportok, Bravais-rácsok. Diffrakció, kinematikus elmélet. Elektronés röntgendiffrakció sajátosságai. Elektronoptika, elektronmikroszkóp. Rácsrezgések termikus hatásai. Sávszerkezet.

17.1. Szimmetriák, pontcsoportok, Bravais rácsok

A kristályrácsok alapvető tulajdonsága, hogy rendelkeznek valamiféle szimmetriával, azaz bizonyos transzformációkra invariánsak. Ezt úgy tudjuk leírni, hogy minden kristályrácsnál található 3 nem egy síkban fekvő \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 , \mathbf{a}_3 rácsvektor, a mire teljesül, hogy egy

$$\mathbf{t}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

vektorral való eltolás önmagába viszi át a rácsot. Ez csak akkor teljesül, ha mindegyik együttható egész szám. Ez egy adott kristályrácsnál általában többféleképpen is eljesülhet, ha ki akarjuk választani a legegyszerűbb, ún. elemi rácsvektorokat, akkor be kell vezetnünk néhány megkötést. Ezek általában azok, hogy az elemi rácsvektorok által közrefogott térfogat a lehető legkisebb legyen, és a rácsvektorok is a lehető legrövidebbek legyenek.



33. ábra. Egy elemi és egy nem elemi rácsvektor

A rácsvektorokkal való eltolásra a mérhető fizikai mennyiségek is invariánsak lesznek, amit később majd ki is használunk amikor egy ismeretlen kristályrács szerkezetét akarjuk meghatározni. Ha egy adott pontból kiindulva felrajzoljuk az onnan kiinduló összes \mathbf{t}_n végpontját, akkor megkapjuk az összes rácspontot. Ezt nevezzük Bravais rácsnak, vagy pontrácsnak. A Bravais rács pontjait leíró képlet:

$$\mathbf{R}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

Egy másik fontos fogalom az elemi cella, ami az egy rácspontot tartalmazó tartományt jelenti. Ezt is megválaszthatjuk többféleképpen, az alapfeltétel, hogy eltolással átfedés nélkül lefedje az egész Bravais rácsot. A legegyszerűbben úgy kapjuk, hogyha vesszük az elemi rácsvektorok által kifeszített paralelopipedont. Egy elegánsabb változatát akkor kapjuk, hogyha egy adott rácspontot összekötünk az hozzá legközelebb lévőkkel, és ezeknek a felezőpontjait összekötjük egymással. Ezt hívják Dirichlet-szerkesztésnek. Így megkapjuk azt a területet, ami közelebb van az adott rácsponthoz mint bármelyik másikhoz. Ezt Wigner-Seitz cellának nevezzük. A Bravais rács három tetszőleges, nem egy egyenesbe eső pontján sík fektethető. Ezeket a síkokat eltolva lefedhetjük az összes rácspontot. A kristálysíkok jelölésére számhármasokat használunk. Ezek meghatározásához először kiválasztjuk az origóhoz legközelebbi olyan síkot, ami mindhárom kristálysíkot egy rácspontban metszi. A metszéspontok legyenek az elemi cella \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 , \mathbf{a}_3 élhosszait egységnek tekintve a (p, 0, 0), (0, q, 0), és (0, 0, r) pontokban. A (p, q, r) számhármast nevezzük Weiss-indexeknek. Ezekkel felírva a síkok egyenlete:

$$\frac{x_1}{pa_1} + \frac{x_2}{qa_2} + \frac{x_3}{ra_3} = n$$

A Weiss indexekből érdemes származtatni a h, k, l ún. Miller indexeket, amelyek értékei egyesével $\frac{1}{p}, \frac{1}{q}$ és $\frac{1}{r}$. Általában a kristálysíkok megadására is a Miller indexeket használjuk.



34. ábra. Példa a kristálysíkok Miller indexekkel való jelölésére

A Miller indexek mellett érdemes definiálni az ún. reciprokrácsot. A reciprokrácspontokat a következő egyenlet adja meg:

$$\mathbf{G}_h = h_1 \mathbf{b}_1 + h_2 \mathbf{b}_2 + h_3 \mathbf{b}_3$$

Itt mindegyik **b**-re teljesül $\mathbf{b}_i \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$. Ennek a reciprokrácsnak is definiálhatjuk a Wigner-Seitz celláját, amit itt Brillouin-zónának nevezünk. Érdemes megemlíteni, hogy a Miller indexekkel definiált

$$\mathbf{G}_{hkl} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$$

vektor merőleges a (h, k, l) kristálysíkra. Ezt felhasználva felírható a kristálysíkok távolsága:

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\mathbf{G}_{hkl}|}$$

17.2. Diffrakció, kinematikus elmélet

A kristályban fellépő irányfüggő mennyiségek vizsgálatával információt kaphatunk a szimmetriájáról, ami segít meghatározni a szerkezetét. A teljes Bravais rács, azaz az atomok pontos helyének meghatározásához viszont csak akkor lehetséges, ha át tudjuk világítani az egész rácsot. Ehhez általában röntgensugárzást használunk.

17.2.1. Diffrakció

A diffrakció leírásához a kristálymintát úgy tekintjük, mintha sok egymás mögé pakolt rács lenne. Ha itt meg tudjuk határozni a gömbhullámok interferenciáját, akkor abból információt kapunk a rács tulajdonságairól. A Maxwell-egyenletekből indulunk ki, és több feltételezést is teszünk, hogy a számolás leegyszerűsödjön és megkapjuk az eredményt. Először vegyük azt, hogy nincs töltéssűrűség, áramsűrűség, és elhagyjuk a mágnesezettséget is. A végeredményünk az, hogy az amplitúdód az elektronsűrűség Fourier-transzformáltja adja meg. A kristály elektronsűrűségére a periodicitás feltételezéséből kapunk képletet. Ha azt vesszük, hogy egyféle atom van, akkor ennek a koordinátáját:

$$\mathbf{r} = \mathbf{R}_n + \mathbf{r}_p$$

Itt \mathbf{R}_n a az elemi cella sarkába mutat, \mathbf{r}_p pedig az elemi cella sarkából az atomra. Ezek alapján felírva az A-t, aminek a négyzetével arányos lesz az intenzitás:

$$A = \sum_{n}^{N} \sum_{p}^{\alpha} \int \rho_0 (\mathbf{r} - \mathbf{R}_n - \mathbf{r}_p) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d^3\mathbf{r}$$

Vezessünk ve egy új változót: $\mathbf{r}'=\mathbf{r}-\mathbf{R_n}-\mathbf{r_p}.$ Ennek a segítségével a képletünk új alakja:

$$A = \sum_{n}^{N} \sum_{p}^{\alpha} \int \rho_0(\mathbf{r} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n + \mathbf{r}_p)} d^3\mathbf{r} = \left(\int \rho_0(\mathbf{r}' e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}'} d^3\mathbf{r}') \left(\sum_{n}^{N} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_n}\right) \left(\sum_{p}^{\alpha} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_p}\right)$$

Itt azt kaptuk, hogy három különböző tagból áll össze az A. Az első az atomszórási tényező, és ez egyetlen atom tulajdonságai határozzák meg. A második tag a rácsösszeg, ami az elemi cellákra való összegzés. A harmadik tag a struktúra faktor, ami egy adott elemi cellára vonatkoztatott összegzés.

17.2.2. Kinematikus elmélet

Vizsgáljuk tovább a rácsösszeget, azaz \mathbf{R}_n -t. Tudjuk róla, hogy

$$\mathbf{R}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$
 $\mathbf{k} = q_1 \mathbf{b}_1 + q_2 \mathbf{b}_2 + q_3 \mathbf{b}_3$

A reciprokrács tulajdonságaiból tudjuk, hogy $\mathbf{b}_i \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$. Ezt behelyettesítve az exponenciálisba:

$$\sum_{n}^{N} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{n}} = \sum_{n_{1}}^{N_{1}} e^{in_{1}q_{1}} + \sum_{n_{2}}^{N_{2}} e^{in_{2}q_{2}} + \sum_{n_{2}}^{N_{2}} e^{in_{2}q_{2}}$$

Itt az egyes összegzések külön-külön geometriai sorok. Vizsgáljunk meg egyet külön.

$$\sum_{n_1}^{N_1} e^{in_1q_1} = \frac{e^{2\pi i q_1 N_1}}{e^{2\pi i q_1}} = \frac{e^{i\pi q_1 N_1} \left(e^{i\pi q_1 N_1} - e^{-i\pi q_1 N_1}\right)}{e^{i\pi q_1} \left(e^{i\pi q_1} - e^{-i\pi q_1}\right)} = \frac{\sin(\pi q_1 N_1)}{\sin(\pi q_1)}$$

Ha azt vesszük, hogy $q_1 = \frac{m_1}{N_1}$, akkor a számláló minden esetben 0, és ha m_1 egész számú többszöröse N_1 -nek, akkor $\frac{0}{0}$ -t kapunk, viszont ezt tudjuk L'Hospital szabállyal kezelni. Ez azt jelenti, hogy csak bizonyos csúcsok adnak jelet, amiket Bragg-csúcsoknak nevezünk. 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 2 egész számú többszöröse. Tehát a beesési szög jól meghatározott értékénél kapunk szórt nyalábot. A kristálysíkok irányát azonban többféleképpen is megválaszthatjuk, így egy kristálynál több irányba is kapunk szórt nyalábot.



35. ábra. A Bragg diffrakció ábrázolása

A fenti ábráról meg lehet határozni, hogy a konstruktív interferencia Bragg-feltétele:

$$2d\sin\theta = m\lambda$$

Laue értelmezésében nem a síkok, hanem az egyes atomokról szórt nyalábok interferenciájával magyarázta az éles diffrakciós kép megjelenését. A bejövő sugárzás az összes atomon szóródik, az atom fajtájától függő erősséggel. A szóródó hullámok az atom helyétől és a bejövő szóródó nyalábok irányától függő fáziskülönbséggel találkoznak.



36. ábra. A Laue diffrakció

Itt az ábráról meg lehet határozni a konstruktív interferencia Laue feltételét:

 $\mathbf{R}_n(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = 2\pi m$

Ezt át tudjuk írni, ha vissza
emlékszünk a ${\bf G}$ reciprokrács és ${\bf R}_n$ direkt rács vektor
ainak szorzatára:

$$\mathbf{k} - \mathbf{k}' = \mathbf{G}$$

Ez azt jelenti, hogy adott irányú és hullámhosszú beeső nyalábok esetén csak olyan irányokba kapunk szórt nyalábot, amire az egyenlet teljesül. Azt, hogy ez mikor következik be, az Ewald-szerkesztéssel tudjuk megmutatni. Itt vesszük a reciprokrácsot, majd berajzoljuk a bejövő nyalábhoz tartozó, $\frac{2\pi}{\lambda}$ hosszúságú k vektort úgy, hogy az egyik reciprok rácspontba mutasson. Ezután berajzolunk k kiindulási pontjából egy $k = |\mathbf{k}|$ sugarú kört. Ez biztosan átmegy legalább egy reciprok rácsponton. Ha átmegy másik ponton is, akkor az oda mutató k'-re teljesül a Laue feltétel, mivel $\mathbf{k} - \mathbf{k}'$ pont a reciprokrács egyik \mathbf{G}_{hkl} vektorát adja. Az ilyen irányokban lehet megfigyelni a (h,k,l) Miller-irányú Bragg csúcsot.

17.3. Elektron és röntgendiffrakció sajátosságai

A röntgensugárzáson kívül másféle sugárzással is kaphatunk diffrakciót, például elektron és neutron sugárzással. Azt, hogy melyik sugárzás a legalkalmasabb az adott problémára, a feladat dönti el. A különböző sugárzások más részével hatnak kölcsön az anyagnak. 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 helvét külön-külön meghatározzuk. Ha az elektronokat 10 300eV -ra gyorsítjuk, akkor az 0,74 hullámhosszú 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. Athatolóképesség 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 kmin és kmax 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.

Ezen kívül még érdemes megemlíteni a pordiffrakciót. Ilyenkor a forgatás nem szükséges, mivel a porban szinte minden lehetséges megvilágítási irány előfordul, és szinte biztosan kapunk diffrakciót.

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 A 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.

17.5. Rácsrezgések termikus hatásai

A rácsrezgéseket felfoghatjuk úgy, mint független harmonikus oszcillátorok. Itt meg tudjuk határozni az állapotsűrűséget, ami a hullámszámok által kifeszített fázistér egy $\omega + \Delta \omega$ tartományában hány módus van.

$$g_E(\omega) = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \delta(\omega - \omega_E) = \frac{N}{V} \delta(\omega - \omega_E)$$

Ezt viszont még pontosítanunk kell. Tegyük fel, hogy a diszperziós reláció $\omega = c|q|$, amit viszont csak a Brillouin zónában értelmezünk. Vegyük úgy, hogy $q = q_D = 0$ egy bizonyos

értéknél. Így átírva a a diszperziós relációt: $\omega_D = c|q_D|$. Az azonos frekvenciájú sávok egy gömbfelületen helyezkednek el, két ilyen gömb közötti sáv térfogata:

$$V = \frac{4}{3}\pi(q + \Delta q)^3 - \frac{4}{3}\pi q^3 \approx \frac{4}{\pi}q^2\Delta q = 4\pi \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \frac{\Delta\omega}{c} = g(\omega)\Delta\omega$$

Ez alapján az állapotsűrűség:

$$g(\omega) = 4\pi \frac{\omega^3}{c^3}$$

Viszont ez túl egyszerű, mert már egy háromatomos kristálynál is minimum 3 ág lesz. Ezt próbáljuk meg úgy orvosolni, hogy veszünk transzverzális és longitudinális sebességet:

$$g(\omega) = 4\pi \left(\frac{2}{c_T^3} + \frac{1}{c_L^3}\right)\omega^2 = 4\pi \frac{3}{c_D^3}\omega^2$$

Itt azt vettük, hogy két transzverzális és egy longitudinális módus van. A gömbfelületes feltevés akkor lesz helytálló, ha a diszperziós reláció lineáris, viszont a valóságban a Brillouin zóna szélén lehajlik. Ezért vegyük a gömb térfogatát akkorának, mint amekkora a Brillouin-zónának kellene legyen.

$$\frac{4\pi}{3}q_D^3 = \frac{(2\pi)^3}{V}$$

Az energiát a következő képletből kapjuk meg:

$$E = \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \frac{3}{c_D^3} \omega^2 d\omega$$

Néhány átalakítást bevezetve, és a Brillouin-zóna térfogatára vett kikötést alkalmazva:

$$E = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{3}{4\pi} \frac{(2\pi)^3}{V} \right) k_B T = \frac{3}{V_c} k_B T$$

Ha beszorzunk a térfogattal:

$$VE = \frac{V}{V_c} 3k_B T = \frac{NV_c}{V_c} 3k_B T = 3Nk_B T$$

Itt visszakaptuk az ekvipartíció tételt, és pont erre számítottunk. Innen származtatták a Dulong-Petit szabályt a szilárd testek hőkapacitására. Viszont fontos megjegyezni, hogy ez alacsony hőmérsékleteken sérül, ugyanis akkor a hőkapacitás 0-ba tart.

17.6. Sávszerkezetek

A kristályrács atomjainál az elektronok ugyanúgy csak diszkrét elektronszinteket tölthetnek be. Ha az atomok térben közel helyezkednek el egymáshoz, akkor az atomi elektronpályák elkezdenek átfedni. Így már molekulapályák jönnek létre, viszont az elektronok fermion volta miatt itt is vonatkozik rájuk a kizárási elv. Ez azt eredményezi, hogy az elektronpályák felhasadnak, két elektron esetén az egyik kicsit magasabb, a másik kicsit alacsonyabb pályán fog elhelyezkedni az eredetitől. Egy szilárdtestnél már igen sok molekulapálya jön létre, amelyek száma az atomok számával jelentősen nő. Ilyenkor már olyan sok a megengedett elektronállapot, nagyon kicsi elektronkülönbségekkel, hogy az állapotok között a termikus gerjesztéssel is képes elektronokat mozgatni, és egybefüggő elektronsávok jönnek létre. Viszont kialakulhatnak tiltott sávok, vagy gap-ek is, ahol nincsenek elektronpályák. Itt a sávelektronok állapotfüggvénye lecsengő jellegű, azaz ezeken az energiákon az elektron néha átjuthat gerjesztéskor, viszont ott tartósan nem tartózkodik.

A sávszerkezet határozza meg egy adott anyag vezetési jellegét. Annak a valószínűségét, hogy egy adott szint be van töltve egy eletkron által, a Fermi-Dirac eloszlás adja meg:

$$f(\epsilon) = \frac{1}{e^{(\epsilon-\mu)/k_BT} + 1}$$

Itt a μ az ún. Fermi szint. Ha Van állapot a Fermi szinten, akkor annak a betöltöttségi valószínűsége pont 50%. A Fermi szint sávszerkezetben való elhelyezkedése alapján meg tudjuk határozni az anyag vezetési tulajdonságát:

- (i) Ha a Fermi szint egy megengedett sávban helyezkedik el, akkor sok aktív állapot van, amik között képesek az elektronok elmozdulni. Az ilyen anyagokat hívjuk vezetőknek. Az ő vezetőképességük alacsony hőmérsékleten nő, és még alacsony hőmérsékleten sem tart 0-hoz.
- (ii) Ha a Fermi szint egy tiltott sávban van, de az nem túlságosan széles, akkor csak néhány olyan pálya van, ami között termikus gerjesztéssel át tudnak járni az elektronok. Ezek a félvezetők, amelyek vezetőképessége nagyban függ a "szennyezettségtől", de általában jóval rosszabb a sima vezetőkénél. A szennyezők energiaszintjei alacsony szinten lokalizáltak lesznek, ezért ilyenkor a félvezetők vezetőképessége befagy, és 0-hoz tart.
- (iii) A szigetelőknél hasonló a sávszerkezet a félvezetőknél, a Fermi szint itt is egy tiltott sávban található, viszont itt ez sokkal szélesebb, és az elektronok nem tudnak szobahőmérsékleten egyáltalán átjutni rajta.



37. ábra. A sávszerkezet szerkezete az egyes anyagtípusoknál

18. Az asztrofizika alapjai (Friss Gergely)

Az ősrobbanás elmélet alapvető feltevései, a Hubble-törvény, Friedmann-egyenletek szemléletes értelme. Galaxisok kialakulása, morfológiája. A HR diagram és a csillagfejlődés szemléletes képe, csillagok energiatermelése. Kompakt objektumok: fehér törpék, neutroncsillagok, fekete lyukak. Megfigyelés alapjai: luminozitás, magnitúdó, vöröseltolódás.

Megjegyzés: a jegyzetem zavaros volt, részben azért, mert anno kicsit elsunnyogva lett elmondva, ezért összeollóztam más, általam ebben a témában hallgatott tárgyakból. Lehet kicsit több, mint szükséges, de úgy gondoltam, hogy a megértéshez ennyi szükséges.

18.1. Ösrobbanás

Az Univerzum egészével, annak keletkezésével és evolúciójával a kozmológia tudománya foglalkozik. A kozmológia megfigyelésekre, mérésekre épül, melyeket igyekszik valamilyen matematikai modell segítségével leírni, illetve ezek alapján jóslatokat tenni. Fő elve a **koz-mológia elv**, amely azt mondja ki, hogy létezik olyan méretskála, melyen vizsgálva a világegyetemet az homogén és izotrop. Ezen a méretsklálán csak a gravitációs kölcsönhatás a mérvadó, a többi három (gyenge, erős és elektromágneses) hatása nem számít.

Az emberiség története során az Univerzum történetéről, méretéről, felépítéséről sok elmélet született. A vallási világképek után az ókori görögök (pl. Ptolemaiosz) hatására kialakult a geocentrikus világkép, véges méretű Univerzummal. Ezt követte pl. Kopernikusz vagy Bruno hatására a heliocentrikus világkép. Kopernikusz elméletében még véges méretű $(\sim 50 \text{ AU})$ Universumot képzelt el, míg Bruno szerint az végtelen térben és időben is. Newton gravitáció-elmélete azonban végtelen világegyetem esetében paradoxont eredményez. Newton szerint megfelelő méretskálán statikus a világegyetem, minden irányból azonos erő hat egy anyagi pontra. Ez instabil megoldás, hiszen a végtelen tér miatt végtelen erők lépnek fel. Tekintsünk egy megfigyelőtől r távolságra lévő objektumot (pl. csillag, galaxis, stb.). Az adott objektumra a Gauss-törvény alapján csak az r sugarú gömbön belül lévő tömeg fejt ki gravitációs erőt. Ebből az következik, hogy a megfigyelő felé gyorsul. Ugyankkor a tapasztalat szerint ez nem így van. Ennek a paradoxonnak a newtoni feloldása az, hogy mindkettő tömegpont gyorsul, nem inerciarendszerből figyeljük az eseményeket. Egy másik feloldást, reformokat és szemléletváltást hozott Einstein általános relativitáselmélete. Az elmélet szerint a távolság kétféleképpen változhat: az objektumok elmozdulnak vagy a tér változik közöttük. Ezen túl a gravitáció nem mező, hanem a térnek egy tulajdonsága (hiszen kitranszformálható). Az anyag passzívan érzi a tér-idő görbületét, illetve aktívan formálja is azt. Kapcsolatot a görbület és az anyag között az Einstein-egyenletek termetenek:

$$G_{\mu,\nu} = \frac{8\pi G}{c^4} T_{\mu,\nu}$$
(522)

ahol $G_{\mu,\nu}$ az Einstein-tenzor (kvázi mennyire görbült a tér) és $T_{\mu,\nu}$ az energia-impulzus tenzor, G a gravitációs állandó és c a fénysebesség. Ez összesen 16 egyenlet, melyeket Einstein szerint nem lehet megoldani. Azonban nem sokkal az elmélet megszületése után 1922-ben Alexander Friedmann, majd 1927-ben tőle függetlenül Georges Lemaître megoldották az egyenleteket egyenletes anyageloszlást feltételezve. Friedmann és Lemaître megoldásai arra az eredményre vezettek, hogy statikus világegyetem nem létezhet, az univerzumunk tágul. Friedmann megoldásáról csak kevesen tudtak, köztük Einstein is, azonban ő nem akarta elhinni. Lemaître arra is rájött, hogy a tágulási sebesség – azaz az egymáshoz képest álló objektumok távolodási sebessége a tér tágulásának következtében – egyenesen arányos a távolsággal. Ezt egyszerűen át lehet látni nem relativisztikus mozgások esetében: **a**-ban lévő megfigyelő szerint **r**-ben lévő pont $\mathbf{w}' = \mathbf{v}(\mathbf{r}) - \mathbf{v}(\mathbf{a})$ sebességel mozog. Másképpen írva pedig $\mathbf{w}' = \mathbf{v}(\mathbf{r} - \mathbf{a})$. Tehát a sebesség- és helyvektor között lineáris kapcsolat áll fenn: $\mathbf{v} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{r}$.

A kozmológiai elv miatt **A** diagonális és minden eleme egyenlő (*H*), azaz $\mathbf{v} = H \cdot \mathbf{r}$. 1929-ben Edwin Hubble ezt kísérletileg is kimérte, így ezt **Hubble-Lemaître törvénynek**, *H*-t pedig **Hubble-állandónak** nevezzük. Ezután Einstein kénytelen volt elfogadni a nem statikus világegyetemet. Friedmann ezt már nem élhette meg, 1925-ben meghalt betegségben. A Hubble-állandó a neve ellenére nem egy állandó mennyiség. Az idő során lassan változik. Mai értékét H_0 -al jelöljük. A kozmológia elv miatt sugárirányú a tágulás, így a vektorok helyett azok abszolútértékével is számolhatunk. A v(t) = H(t)r(t)differenciálegyenletet megoldva kapjuk az $r(t) = r_0 a(t)$





összefüggést a távolságra. Itt $a(t) = e^{\int_0^T H(t)dt}$ az úgynevezett **skála-paraméter**, melynek mai értéke $a_0 = 1$. Korábban értéke a < 1 volt. A kapcsolat a skála-paraméter és a Hubble állandó között: $H = \dot{a}/a$. Mivel az eredmények alapján táguló univerzumban élünk, valamikor a múltban kellett lennie egy szingularitásnak, ahonnan kiindult a világegyetem. Ez felel meg az a = 0 esetnek, és ezt hívjuk **Ősrobbanásnak**, ami nagyjából 13,7 milliárd évvel ezelőtt történt.

A táguló univerzum leírására szolgálnak a Friedmann-egyenletek, melyeket Friedmann az Einstein-egyenletek megoldásával kapott. Ezek Newtoni képben is megkaphatóak. Ehhez Newton II. törvényét kell alkalmazni súrlódásmentes folyadékra. Ennek eredményéül kapjuk Friedmann II. egyenletét:

$$\frac{\ddot{a}}{a} = -\frac{4\pi G}{3}(\rho + 3\frac{p}{c^2}) = -\frac{4\pi G}{3}(1+3w)\rho$$
(523)

ahol ρ az anyag sűrűsége és p a nyomása, illetve felhasználtuk a tökéletes folyadék állapotegyenletét: $p = w\rho c^2$. Itt w egy anyagra jellemző konstans. Három anyagtípust különböztetünk meg: normál, nem relativisztikus anyag ($w_m = 0$), relativisztikus anyag (sugárzás, $w_r = 1/3$) és sötét energia ($w_{DE} < -1/3$). Utóbbi felelős a gyorsulva tágulásért, mint negatív nyomás vagy taszító gravitáció lehet elképzelni, ami legyőzi a normál anyag gravitációjából származó vonzást (nagy skálán). Speciálisan, a mérési eredmények alapján $w_{DE} = -1 = w_{\Lambda}$ a kozmológiai állandóhoz tartozó konstans. A termodinamika I. főtételét felhasználva megkapható a különböző anyagok sűrűségének és a skála paraméter kapcsolata (nincs hőcsere): $\rho_m \sim a^{-3}$, $\rho_r \sim a^{-4}$, $\rho_{\Lambda} \sim a^0$. Az idő előrehaladtával a értéke nő, így az univerzum története különböző korszakokra bontható, ahol az egyik anyagfajta dominál. Az Ősrobbanást követően a sugárzás dominált, ekkor a normál anyag és a kozmológiai állandó sűrűsége elhanyagolható volt. Ezt követte az anyagdominált korszak, ami kb. 380 000 évvel az Ősrobbanás rad, az lesz a domináns. Jelenleg épp a normál anyag és kozmológia állandó által dominált korszak közti átmenetben vagyunk. A korszakváltás időszaka, amikor összemérhetőek a sűrűségek bonyolult, numerikusan kezelhetőek csak. A korszakok egyre hosszabbak. Alakítsuk át a (523) egyenletet, az egyszerűség kedvéért nulla nyomás esetében. Ekkor megkapjuk **Friedmann I. egyenletét:**

$$\left(\frac{\dot{a}}{a}\right)^2 = \frac{8\pi G}{3}\rho - \frac{kc^2}{a^2} \tag{524}$$

ahol k egy integrációs konstans, amit görbületi paraméternek is hívnak. Valójában ez az egyenlet az energiamegmaradást írja le, akár abból is származtathattuk volna. A Friedmann I. egyenlete tulajdonképpen megegyezik a feldobott kő egyenletével ("Repül a nehéz kő, ki tudja hol áll meg?.."), k konstans értéke határozza meg az univerzum sorsát, illetve alakját. Ha k < 0, akkor a (524) egyenletben szereplő konstans pozitív az univerzum a végtelenségig tágul (a kő nem esik le), míg a k > 0 esetben a konstans tag negatív, azaz véges ideig tágul, majd összezuhan az univerzum (Nagy Reccs, visszaesik a kő). A szeparátrix a k = 0 eset, ekkor a skálaparaméter értéke konstanshoz tart a végtelenben. A geometriára a következők teljesülnek rendre: hiperbolikus, gömbi és sík (euklideszi). A mai álláspont szerint a k = 0helyzet áll fenn, az univerzumunk sík geometriájú. Ha megoldjuk Friedmann I. egyenletét, akkor megkaphatjuk az a-t összefüggést. Ez azonban bonyolult, ha mindegyik anyagformát számításba vesszük, azonban a különböző korszakokban nézve, amikor csak egy anyagfajta dominált, megoldható az egyenlet. A sugárzási, normál-anyag és kozmológiai állandó által dominált korszakokban a skála paraméter rendre a következő módokon függ az időtől: $t^{1/2}$, $t^{2/3}$, e^t . Az átmeneti korszakok nehezen kezelhetőek matematikailag. Felmerülhet bennünk még a kérdés, hogy hogyan lehetne a skála paraméter értékét megmérni. Ez a vöröseltolódás mérésével tehető meg. A vöröseltolódás abból származik, a vizsgált objektum által kibocsájtott fény hullámhosszát másképp látjuk, mert a tér kitágul az objektum és közöttünk a fény útja során. Így nő a hullámhossz ha tágul az unverzum. A hullámhossz 1/a-val skálázódik, tehát

$$z = \frac{\lambda - \lambda_0}{\lambda_0} = \frac{\frac{1}{a}\lambda_0 - \lambda_0}{\lambda_0} = \frac{1}{a} - 1 \Rightarrow a = \frac{1}{1+z}$$



39. ábra. A skála paraméter az idő függvényében az egyes korszakokban.

Az Ősrobbanást leíró matek megvan, viszont ezt kísérletileg is alá kell támasztani. Az elméletnek 3 alappillére van:

- 1. táguló univerzum, Hubble-Lemaître-törvény
- 2. az elmélet kb. 3 K-es feketetest sugárzást jósol, melyet ki is lehet mérni (kozmikus háttérsugárzás)
- 3. elemek aránya: a hűlő univerzumban már képesek atomok kialakulni, azonban az anyag eddigre már hígul. Az elmélet szerint $\sim 75\%$ H, $\sim 25\%$ He és < 1% egyéb anyagnak kell lennie.

Vannak azonban egyelőre meg nem oldott problémák is:

- 1. simaság problémája: k értéke miért pont 0?
- 2. horizont probléma: a kozmikus háttérsugárzás hőegyensúlyt mutat, de ez hogy alakulhatot ki ekkora léptékben? Hogy lehet ok-okozati kapcsolat az akkor Univerzum két távoli pontja között?
- 3. struktúra eredetének problémája: Mi a magyarázat a kozmikus háttérsugárzásban látható kis mértékű inhomogenitásra? Honnan jön és miért ekkora?

A három problémára eddig született megoldási javaslatok közül az infláció a leginkább elterjedtebb, elfogadottabb.

18.2. Galaxisok

A galxisok létezése sokáig ismeretlen volt. A távcsövek fejlődésével észleltek ún. nebulákat. A nebulák mibenléte nagy vitát váltott ki a csillagászok között. 1920-ban tartották a Nagy Vitát (Shapley – Curtis vita), mely arról szólt, hogy a nebulák galaxisok vagy gázfelhők. Ezt pontos távolságmérés segítségével lehet eldönteni, azonban ezt akkor még nem tudták megtenni. Később Hubble-nak sikerült megmérnie az Androméda távolságát, mellyel eldöntöttek a vitát: léteznek galaxisok a Tejútrendszeren kívül.

A galaxisok keletkezési mechanizmusa és evolúciója a mai napig kutatott terület, több elmélet is született ezekkel kapcsolatban. Az egyik legelfogadottabb elmélet szerint az Ősrobbanás után az Univerzum anyageloszlása homogén volt, csak nagyon kis fluktuációk voltak jelen (a kozmikus háttérsugárzás megfigyelése alapján). A tágulás következtében ezek a fluktuációk megnőttek. A sűrűbb részek a gravitáció hatására (lokálisan ez a meghatározóbb, nem a tágulás) összehúzódtak, teret adva ezzel a galaxisok, illetve csillagok születésének. Az összehúzódó gáz egy része a központa hullt, ott feketelyukat alkotva. Amennyiben a gáznak nincs perdülete ez gyorsan megtörténik, így nincs idő struktúra kialakulására. Ez az egyik módja az **elliptikus galaxisok** kialakulásának. Ha viszont a gáznak volt perdülete, akkor a folyamat lassabban zajlott le, a gáz akkréciós korongot létrehozva zuhan a keletkezett fekete lyukba. Az akkréciós korongban a gáz súrlódik, felhevül, így energiát bocsájt ki. Ekkor beszélük aktív galaxismagról (Actie Galactic Nuclei, AGN), melynek fényessége nagyobb a teljes galaxis fényességénél.

Az akkretáló gáz elfogyása után egy szupermasszív feketelyuk marad vissza. Ilyet minden galaxis középpontjában találtak. A gáz azon része, ami nem akkretál a fekelyukba ellaposodik, korongot alkotva akörül. Ahogyhűl a gáz, kisebb fluktuációk hatására csillagok, csillagrendszerek keletkeznek. Így alakulnak ki a **spirálgalaxisok**, melyeket részletesebb vizsgálunk majd. Spirálgalaxisok ütközése során az összeolvadó galaxisok elveszthetik gáztartalmukat. A magok összeolvadnak és visszamaradnak a már kialakult csillagok (egy részük ki is repülhet a galaxisból). A korong struktúra felbomlik, a csillagok mozgása nem rendezett illetve gáz hiányában nincs csillagképződés. Ez a másik módja az elliptikus galaxisok kialakulásának. Természetesen ha egy



40. ábra. Galaxis csoportok

kisebb galaxis olvad be egy nagyobb spirálgalaxisba, akkor megmaradhat a spirál struktúra. A galaxisok ehelyezkedés alapján csoportokat, halmazokat illetve szuperhalmazokat alkotnak.

18.2.1. Spirál galaxisok felépítése

Ebben a részben a spirálgalaxisok általános felépítéséről lesz szó, kisebb eltérések az alosztályokban vannak, de attól most eltekintünk. Egy spirálgalaxis 3 részre osztható: mag, korong és halo. Értelemszerűen a **mag** helyezkedik el középen. Ebben a régióban van a szupermasszív fekete lyuk, illetve öreg, fémszegény csillagok. Átlagos mérete a magnak kb. 1–2 kpc. A korongban találató a galaxist alkotó por és gáz egy része, emiatt itt öreg csillagok

mellett fiatal, újonnan keletkezett csillagok is megtalálhatóak. A korong lapult, átmérője kb. 20 kpc, míg vastagsága 1 – 2 kpc. Ebben a régióban találhatóak a logaritmikus spirálkarok, melyek valójában sűrűséghullámok a korongot kitöltő gázban. A spirálkarokban található a legtöbb neutrális H, itt történik a csillagképződés, ezek a fényesebb részei a régiónak. Általában páros számú kar van. Rádiótávcsövekkel figyelve a galaxist megállapítható a H eloszlása, illetve a felhők sebessége. Harmadik része a galaxisnak a **halo**, ami nagyjából gömbszerű és 50 – 100 kpc átmérőjű. Összetétele a következő: ritkán elhelyezkedő öreg, halvány csillagok és sötét halo. Utóbbi olyan részecskékre utal, melyek csak a gravitáción keresztül interaktálnak. A halo gömbszerű létére és összetételére a galaxis rotációs görbéje alapján következtethetünk. Azt várnánk, hogy a központtól távolodva a keringési sebesség a központtól való távolságtól nem függ (a kezdeti részt leszámítva), konstans. Ezt $1/r^2$ -es, azaz gömbszerű eloszlás és nagy tömeg (10-szer több a láthatónál) eredményezheti.



41. ábra. Spirálgalaxis rotációs görbéje.

18.3. Csillagok és kompekt objektumok

18.3.1. A HR diagramm

Wien eltolódási törvénye alapján a különböző hőmérsékletű feketetestek spektrumainak csúcsai más hullámhosszokon vannak. Ez alapján a különböző felszíni hőmérsékletű csillagokat különböző színképosztályokba lehet rendelni. Történelmi okok miatt ezek a következők: O, B, A, F, G, K, M⁴. 1911-ben Ejnard Hertzsprung kapcsolatot fedezett föl adott csillag abszolút magnitúdója és színe (azaz hőmérséklete) között. Tőle függetlenül 1913-ban Henry Norris Russel az abszolút magnitúdó és a színképosztálya között. Ezzel rájöttek, hogy a csillagok luminozitása (fényessége) és hőmérséklete erősen összefügg, mely összefüggés alapján a csillagok csoportosíthatók. A luminoztiást ábrázolva a hőmérséklet függvényében kapjuk a Hertsprung-Russel diagrammot (HR diagramm).

A csillagok nagy része – akárcsak a Nap – a **fősorozat** (main sequence) mentén helyezkedik el. Nagy vonalakban az mondható el, hogy az itt lévő csillagok minél nagyobb

⁴Könnyen meg lehet jegyezni egy kis szöveggel: Oh Be A Fine Girl/Guy Kiss Me.

hőmérsékletű felszínnel rendelkeznek, annál nagyobb a luminozitásuk, így a bal felső sarokban lévő forró és fényes csillagoktól a jobb alsó sarokban lévő hidegebb és halványabb csillagokig tart. Ezek a csillagok H és He fúziójával termelnek energiát. A csillagok életük egy jelentős részét a fősorozaton töltik. A fősorozat felett elhelyezkedő **óriások** és **szuperóriások** csoportja olyan csillagokat tartalmaznak, melyek hőmérséklete nem a legnagyobb, ellenben fényességük ehhez képest igen. Ezekbe a régióiban a diagrammnak a csillagok életük vége felé kerülnek. Érdekes megfigyelni, hogy köztes csillagok nem igazán vannak, ami egy gyorsan lezajlódó átmenetre utal. A fősorozat alatt helyezkednek el a nagyobb hőmérsékletű, azonban halványabb (méretükből adódóan) **fehér törpék**.



42. ábra. A Hertzsprung–Russel diagramm.

A HR diagram arra is alkalmas, hogy a csillagok sugarát megállapítsuk. Ehhez a Stefan-Boltzmann- törvényt és a luminozitás definícióját kell használni. Előbbi szerint egy feketest sugárzásának fluxusa arányos annak hőmérsékletének 4. hatványával: $F = \sigma T^4$ (σ a Stefan-Boltzmann állandó). A fluxusból a luminozitás $L = 4\pi R^2 F = 4\pi R^2 \sigma T^4$ módon kapható meg. Tehát ha ismert a luminozitás és a hőmérséklet, akkor a sugarat is ki lehet számolni. Adott hőmérsékleten vizsgálva a HR diagrammot azt tapasztaljuk, hogy nagyobb luminozitáshoz nagyobb sugár tartozik, innen a törpe és óriás elnevezései a csoportoknak. Hasonlóan adott luminozitásnál nézve a diagrammot az alacsonyabb hőmérséklethez nagyobb sugár tartozik. Fontos adat egy csillagról annak tömege is, így érdemes lehet ezt is összekötni valamely, eddig ismert tulajdonságával a csillagnak. Ehhez azt használjuk fel, hogy a csillagok kb. 50 %-a kettős rendszerben található meg. Kepler törvényét felhasználva így megállapítható a csillagok tömeg, azaz ismertté válik a luminozitás–tömeg összefüggés. Az eredmények alapján a fősorozat egy tömegsorozat is. A fősorozatban a Nap felett lévő csillagok tömege nagyobb, míg az alatt lévők tömege kisebb a Nap tömegénél.

18.3.2. Csillagfejlődés és kompakt objektumok

A galxisokban, gázfelhőkben lévő forró gáz kisugározza energiáját, lehűl. A gáz gravitációsan csomósodhat az inhomogenitás vagy valamilyen külső tényező hatására (pl. sűrűség-
hullám a galaxisban, másik keletkező csillag kisöpri a körülötte lévő teret). A csomókban egy kritikus tömeg elérése után megindul a csillagképződés: a belsőbb, sűrűbb régióban kialakul az ún. protocsillag. A protocsillag körül egy gázkorong keletkezik (impulzusmomentummegmaradás), ahol bolygók alakulnak ki. A protocsillagba zuhanó anyag növeli annak tömegét, miközben a hőmérséklete is nő. Egy idő után beindul a H fúziója, megszületik a csillag. Az anyag behullása ekkor megszűnik, mert a fúzió erős sztelláris szelet eredméynez, ami kisöpri a gázt a csillag környezetéből. A csillag élete annak tömegétől függően alakul. A kis tömegű csillagok – melyeknek fősorozatra kerülésükkori tömege ($< 4M_{\odot}$ (M_{\odot} a Nap tömege) – a hidrogén fogyásának következtében egyre kevesebb energiát termelnek. A magba hulló He fúziójához nem elég nagy a hőmérséklet és a körülötte lévő H-réteg fúziója nem biztosít elég energiát ahhoz, hogy ellentartson a csillag gravitációjának. A csillag elkezd összeesni, aminek hatására a nyomás és hőmérséklet megnő a magban, beindul a He fúziója. Ennek következtében a csillag felfújódik (vörös óriás állapot). Miután a He nagy része elfúzionált szénné és oxigénné a mag újra elkezd összeesni. Azoban mérete már kisebb és így nem hevül fel eléggé újabb fúziók beindításához. Az összeesés akkor áll meg, amikor az összes elektron a legkisebb megengedett energiaállapotba kerül, tehát a gravitációnak az elektron degenerációs nyomás tart ellen. Leáll az energiatermelés és a külső, távoli részek ledobódnak planteráis ködöt alkotva. A visszamardt objektumot hívjuk fehér törpének. Nagyobb tömegű csillagok esetében hasonló események követik egymást, az üzemanyag elfogyása után a mag összehúzódik, majd felhevül és így nehezebb elemek fúziója is beindul. A nagyobb tömeg és méret miatt már a kis tömegűeknél bemutatottnál nehezebb elemek is keletkezhetnek. Ha a fősorozatra kerüléskori tömeg $< 8M_{\odot}$ a fúzió leállása után a nagyobb gravitációnak nem képes ellentartani az elektronnyomás, így az elektronok az atommagba préselődnek, ahol a protonokkal neutront alkotnak. A visszamardt magban a neutronnyomás tart ellen a gravitációak. Az összenyomódás hirtelen megállása egy lökéshullámot indít el, ami miatt a héj gyorsan lökődik le (magösszeomlásos szupernova). A visszamaradt mag a **neutroncsillag**. A neutroncsillag igen kis méretű (10 - 20 km átmérőjű) ám a legsűrűbb objektumok egyike. Az ennél is nagyobb tömegű csillagok esetében (mag tömege nagyobb mint kb 3 M_{\odot}) a neutronnyomás sem képes ellentartani a gravitációnak, fekete lyuk alakul ki.



43. ábra

18.3.3. Csillagok energiatermelése

A csillagok fúzió segítségével termelnek energiát. Ez az egyetlen módja ilyen mértékű és hosszú ideig tartó energiatermelésnek. A fúzió lezajlásához magas hőmérsékletre (több millió K) van szükség, csak így tudják az atommagok legyőzni a Coulomb-törvényből származó taszítást. Három fő reakiómenete van a csillagok energiatermelésének: proton-proton lánc, CNO ciklus és tripla- α folyamat. Mind a **proton-proton lánc**, mind a **CNO ciklus** a hidrogén héliummá alakításának folyamata. A p–p lánc egyszerűbb, egyedül H jelenlétét igényli, melyből deutérium majd He keletkezik. A CNO ciklus megvalósulásához szükség van szén jelenlétére. Az, hogy melyik folyamat domináns a kettő közül a csillag tömegétől függ. $M < 1, 3M_{\odot}$ esetében a p–p lánc, míg $M > 1, 3M_{\odot}$ esetében a CNO ciklus a meghatározóbb. A **tripla** α **folyamat** a He utáni szén és oxigén kialakulását írja le. Ez csak nagy tömegű csillagokban játszódik le.





Progression depends on reversible reaction. High density and abundant energy required For triple-alpha to occur = High mass stars only



18.4. Megfigyelés alapjai

A csillagászati megfigyeléseket különböző hullámhossz tartományokon végezzük. Mindegyik hullámhohosszank megvan az előnye és hátránya is.

18.4.1. Luminozitás

A luminozitás az objektum által kisugárzott elektromágneses teljesítmény mértéke. Kiszámítási módja: $L = 4\pi r^2 F$, ahol r az objektum távolsága és F a sugárzás mért fluxusa. Általában erg/s-ban adják meg, hagyománytiszteletből.

18.4.2. Magnitúdó

A magnitúdó az égitestek fényességének mértéke. Kétféle magnitúdófogalmat használunk: az általunk észlelt fényességet hívjuk **látszólagos magnitúdónak (m)** (ami a valós fényességnél kisebb), illetve az objektum látszólagos fényességét abban az esetben, ha az 10 pc távolságra lenne hívjuk **abszolút magnitúdónak (M)**. Egy csillag magnitúdóját egy másikhoz viszonyíthatjuk a következő módon:

$$m - m_{ref} = -2,5 \log_{10} \left(\frac{F}{F_{ref}}\right)$$

ahol F a fluxus. Referenciapont a Vega csillag, melyre m = 0. A luminozitás definícióját felhasználva a látszólagos és abszolút magnitúdó között a következő összefüggés érvényes:

$$m - M = 5\log_{10}\left(\frac{r}{10\ pc}\right)$$

ahol r az objektum távolsága.

18.4.3. Vöröseltolódás

A vöröseltolódás a fény hullámhosszának hosszabbodását jelenti. Ennek három oka lehet: Doppler-effektus, gravitációs vöröseltolódás és az Univerzum tágulása miatti hullámhossznövekedés. Asztrofizikában utóbbit értjük és z-vel jelöljük. Spektroszkópiai úton értéke mérhető, hiszen

$$z = \frac{\lambda - \lambda_0}{\lambda_0} = \frac{f_0 - f}{f} = \frac{1}{a} - 1$$

ahol $\lambda_0,\,f_0$ a kibocsájtott fény és $\lambda,\,f$ az érzékelt fény hullámhossza és frekvenciája, rendre, illetveaa skála paraméter.