

Záróvizsga tematika

A TételWiki wikiből

Ezúton is szeretnénk köszönetet mondani mindenkinek, aki vette a fáradságot és szerkesztéssel, vagy megjegyzésekkel segítette a tételek kidolgozását. Továbbá gratulálunk mindenkinek a záróvizsgák eredményeihez.

A szerkesztők nevében: Jeffrey

Általános bevezető:

Az itt szereplő tematikus bontást régebbi záróvizsgák anyagai alapján próbáltuk meg összeállítani, illetve a BSc-n elhangzottakhoz, és a valószínű elvárásokhoz.

Az itt található tételtípusokat gyakorlatilag véglegesnek tekintjük. Az egyes tételekben felsorolt fogalmak azokból kerültek összeválogatásra, amelyeket szerintünk illik tudni, akár tanultuk, akár nem, ugyanis igen nagy valószínűséggel kérdezhetik. Ezen felül a felsorolt fogalmak csak tájékoztató jellegűek, az egyes tételek lapjain további fogalmak is szerepelhetnek ezeken túl, amiket kell vagy érdemes tudni.

A tételeket nem lehet diszjunktan és egyértelműen szétválasztani, továbbá sok helyen a modern és a klasszikus rész sokban átfed, ezért van, hogy ugyanaz a lap áll két témakör mögött, illetve ugyanaz a fogalom több helyen is előkerül. Leginkább a logikai egységre törekedtünk a besorolásokkor és a címek megfogalmazásakor.

Megjegyzés: Ahol nem voltunk biztosak benne, hogy egy rész a kötelező tananyag része, vagy kitekintésként gondoltuk, hogy a megértést segíti, de szinte biztos, hogy nem kéri számon, azon szakaszok címébe (*)-ot tettünk.

FONTOS! Szerkesztés előtt mindenkit nyomatékosan megkérek, hogy olvassa el a záróvizsgára vonatkozó tételszerkesztési irányelveket.

Valamint figyeljétek a szerkesztési időbeosztást!

Tartalomjegyzék

- 1 A klasszikus mechanika alapjai
- 2 A klasszikus mechanika elméleti tárgyalása
- 3 A relativitás elmélet alapjai
- 4 Egzaktnál megoldható fizika problémák
- 5 Folytonos közegek mechanikája
- 6 Fenomenologikus termodinamika
- 7 Elektro- és magnetosztatika, áramkörök
- 8 Elektrodinamika
- 9 Hullámegyenlet és hullámoptika
- 10 Geometriai optika és alkalmazásai
- 11 A kvantumelmélet alapvető kísérletei
- 12 A kvantummechanika elméleti háttere

- 13 Atom- és molekulaszervezet
- 14 A magfizika alapjai
- 15 A termodinamika statisztikus alapozása
- 16 Kvantumstatisztikák
- 17 Kölcsönható rendszerek, mágneses anyagok
- 18 Kristályos anyagok fizikája
- 19 Nemegeensúlyi folyamatok leírása
- 20 Az asztrofizika alapjai

A klasszikus mechanika alapjai

- Mérés, mértékegységek, dimenzióanalízis
- Kinematikai alapfogalmak, mozgás leírása különböző koordinátarendszerekben.
- Statika, dinamika, Newton-törvények, erőfogalom, mozgásegyenlet, tehetetlen és súlyos tömeg, Eötvös-kísérlet.
- Gyorsuló koordinátarendszerek, jelenségek a forgó Földön, tehetetlenségi erők, Foucault-kísérlet.
- Munka tétel.
- Pontrendszerek. Merev testek: statika: egyensúly feltétele, típusai, dinamika: forgások, tehetetlenségi tenzor, pörgettyűk

A klasszikus mechanika elméleti tárgyalása

- Virtuális munka elve, d'Alembert-elv
- Gauss féle legkisebb kényszer
- Hamilton-elv.
- Legkisebb hatás elve {Maupertuis-elv}
- Lagrange-féle elsőfajú mozgásegyenletek.
- Lagrange-féle másodfajú mozgásegyenletek.
- Hamilton függvény, kanonikus egyenletek.
- Kanonikus transzformációk, ciklikus koordináták.
- Hamilton-Jacobi egyenlet. {Hatásváltozók, invariáns tórusz, Poisson-zárójelek}
- Szimmetriák és megmaradási tételek.
- Klasszikus energia, impulzus és impulzusmomentum megmaradási tételek tömegpontra és pontrendszerre {Liouville-tétel}.

A relativitás elmélet alapjai

- Inerciarendszer, Galilei-, Lorentz-transzformáció, relativisztikus hatások, paradoxonok.
- A relativitáselmélet kísérleti alapjai: Michelson-Morley kísérlet.
- Relativisztikus kinematika, relativisztikus dinamika.
- Négyesimpulzus, energia-impulzus megmaradás a relativitáselméletben. {Energia-impulzus tenzor}
- Energia és tömeg ekvivalencia, tömegdefektus.

Egzaktnul megoldható fizika problémák

- Csillapított- és kényszerrezgések, rezgések összetétele, csatolt rezgések, lineáris lánc
- Kepler-probléma (bolygómozgás, kúpszeletek, kozmikus sebességek).
- Potenciálvölgy, oszcillátor, rotátor, Coulomb-potenciál (hidrogénatom).
- Klasszikus határesetek. Eltűntető és keltő operátorok.

Folytonos közegek mechanikája

3/209

- Rugalmas és képlékeny alakváltozások, Hooke-törvény, speciális deformációk.
- A deformációval kapcsolatos mennyiségek (Young-modulus, Poisson-szám, {Lamé-állandók}, energiasűrűség, feszültség- és deformációs tenzor)
- Hullámterjedés deformálható testekben, Doppler-effektus
- Folyadékok tulajdonságai, hidrosztatika, Torricelli-kísérlet, úszás feltétele és stabilitása, felületi feszültség Laplace-törvények, felhajtóerő.
- Áramlások jellemzése, Bernoulli-egyenlet, tökéletes folyadék áramlása, Euler-egyenletek, viszkózus folyadék áramlása, örvények, turbulencia. {Navier-Stokes-egyenletek}

Fenomenologikus termodinamika

- Kinetikus modell, ideális gázok.
- Termodinamikai állapotjelzők, hőtágulás, ideális gáz és folyamatai, állapotegyenlet.
- Gázok munkája, nyílt és zárt folyamatok, Carnot-folyamat, bezin- és dízelmotor.
- Főtételek.
- Termodinamikai potenciálok, fundamentális egyenlet.
- Fázisátalakulások jellemzői, típusai, Gibbs féle fázis szabály, fázisdiagramok. {skálátörvények}
- Kémiai potenciál, fázisegyensúlyok.

Elektro- és magnetosztatika, áramkörök

- Coulomb- és Gauss-törvény, szuperpozíció elve, stacionárius áram.
- Vezetők, szigetelők, dielektrikumok, elektromos polarizáció, magnetosztatika.
- Anyagi jellemzők hatása a kapacitásra (kondenzátor) és a permeabilitásra.
- Stacionárius áram, áramköri törvények: Kirchhoff-törvények, Ohm-törvény.

Elektrodinamika

- Maxwell-egyenletek alakja, jelentése, Lorentz-erő.
- Nyugalmi-, ön-, kölcsönös-, mozgási indukció.
- Elektromágneses tér energiája, impulzusa, impulzusmomentuma.
- RLC elemek, és a belőlük felépíthető áramkörök, rezonancia, transzformátor.
- Váltakozó áram: elektromos áram előállítása, szállítása, felhasználása, motorok.

Hullámegyenlet és hullámoptika

- Hullámegyenletek származtatása, megoldásai, EM-hullámok előállítása.
- Hullámok vákuumban, dielektrikumban, hullámjelenségek, diszperzió, csoport és fázissebesség, Doppler-effektus.
- Retardált potenciálok.
- Antennák. {hullámvezetők, üregrezonátorok}
- Dipólsugárzás, szórás szabad töltésen (Rayleigh-szórás). {multipólsugárzások}
- Hullámjelenségek: törés, visszaverődés, interferencia.
- Polarizáció, Fresnel-formulák, diffrakció (skaláris elmélet, Fraunhofer és Fresnel), nemlineáris optika.

Geometriai optika és alkalmazásai

- Fény, fénysugár, eikonál, Fermat-elv, analógia a klasszikus mechanikával. Paraxiális közelítés.
- Optikai eszközök (távcső, mikroszkóp), mátrix reprezentáció, leképezési törvények, felbontóképesség.
- Optikai jelenségek a természetben, kausztikák.

A kvantumelmélet alapvető kísérletei

3/209

4/209

- Hőmérsékleti sugárzás, foto-, Compton-effektus.
- Rutherford-kísérlet, atommodellek.
- Davisson-Germer-kísérlet, Stern-Gerlach-kísérlet, Einstein-de Haas-kísérlet, Zeeman-effektus.
- Az elektron adatainak mérése (Millikan-kísérlet).

A kvantummechanika elméleti háttere

- A kvantummechanika matematikai háttere, kvantummechanikai reprezentációk, Schrödinger és Heisenberg kép.
- Fizikai mennyiségek operátorai, sajátfüggvények, sajátértékek.
- Határozatlansági elv, szuperpozíció.
- A hullámfüggvény valószínűségi értelmezése, a fizikai állapot leírása.
- Szabad részecske hullámfüggvénye, anyaghullámok.
- Impulzusmomentum operátor, sajátértékei, sajátfüggvényei.
- Schrödinger-egyenlet, a Schrödinger-egyenlet szeparálása sugár és szögfüggő részekre.
- Spin, Pauli-egyenlet
- Korrespondancia elv, Ehrenfest-tétel.
- EPR paradoxon, Bell-egyenlőtlenség.

Atom- és molekulaszervezet

- Kvantummechanikai közelítő módszerek {Perturbációszámítás, Variációszámítás, Hartree-Fock közelítés}
- Atomi energiaszintek, emissziós-, abszorpciós spektrumok.
- A hidrogénatom spektruma, felhasadások, Lamb-féle eltolódás
- Spektrumvonalak felhasadása külső térben: Stark- és Zeeman-effektusok
- Szórás centrális térben, hatáskeresztmetszet, Rutherford-kísérlet.
- Kvantumátmenetek: alagútjelenség, Raman- és infravörös spektroszkópia.
- He-atom, Kéttomos molekulák, Pauli-elv.
- Periodusos rendszer, kémiai ismeretek kvantummechanikai alapjai.

A magfizika alapjai

- Az izotóp térkép, atommagok tömege, mérete, kötési energiája.
- A cseppmodell és a félempirikus kötési formula.
- Maghasadás, magfúzió, radioaktivitás, sugárzás és anyag kölcsönhatása.
- Radioaktív bomlások, magátalakulások.
- Elemi részecskék és alapvető kölcsönhatások.
- Kísérleti eszközök (GM cső, buborékkamra, szcintillátor)

A termodinamika statisztikus alapozása

- Egyensúlyi feltételek
- Termodinamikai potenciálok, állapotjelzőkre és az entrópiára vonatkozó összefüggések.
- A termodinamika főtételei.
- Az egyensúly stabilitása, fluktuációk.
- Maxwell-féle sebességeloszlás
- Mikroállapotok foglalma, Boltzmann entrópia.
- Mikrokanonikus, kanonikus, nagykanonikus tárgyalásmód, egyszerű alkalmazások.

Kvantumstatisztikák

- Bose-Einstein-eloszlás, ideális Bose-gáz, klasszikus határeset, Bose-Einstein kondenzáció.
- Hőmérsékleti sugárzás, Stefan-Boltzmann törvény.

4/209

5/209

- Fononok, szilárdtestfizikai alkalmazások (diszperziós reláció).
- Fermi-Dirac-eloszlás, Ideális Fermi-gáz, klasszikus határeset. Degenerált Fermi-gáz.
- Elektronfajhő, kvantumkorrekciók. {Bethe-Sommerfeld sorfejtés, Landau-paramágnesség}

Kölcsönható rendszerek, mágneses anyagok

- Ritka gázok állapotegyenlete, viriál sorfejtés, Van der Waals gázok.
- Mágnesség statisztikus elmélete: Ising modell.
- Atomi paramágnesség, atomi diamágnesség, Pauli szuszceptibilitás, Landau diamágnesség.
- Ferro-, antiferro-, ferrimágneses anyagok, ferromágneses domainek, hiszterézis.
- Curie-Weiss-törvény.
- Speciális anyagok: spinüveg, mágneses ellenállás, szupravezetés.

Kristályos anyagok fizikája

- Pontcsoportok, Bravais-rácsok, szimmetriák.
- Bloch tétel, adiabatikus szétesatolás.
- Diffrakció, kinetikus elmélet. Ewald-szerkesztés. Elektron- és röntgendiffrakció sajátosságai.
- Elektronoptika, elektronmikroszkóp.
- Rácsrezgések termikus hatásai.

Nemegyensúlyi folyamatok leírása

- Irreverzibilis folyamatok. {az idő nyila}
- Master egyenlet, részletes egyensúly.
- Entrópia és szabadenergia.
- Ingadozási jelenségek: Brown-mozgás, diffúzió, Langevin-egyenlet, Brown-mozgás potenciálban (Drude modell).
- Vezetési jelenségek
- Kereszteffektusok

Az asztrofizika alapjai

- Newton-féle gravitációs erőtvény.
- 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.

A lap eredeti címe: „http://mafihe.hu/~wiki/wiki/index.php/Z%C3%A1r%C3%B3vizsga_tematika”

- A lap utolsó módosítása: 2009. augusztus 14., 16:44

A klasszikus mechanika alapjai

A TételWiki wikiből

Tartalomjegyzék

- 1 Mérés, mértékegységek, dimenzióanalízis^[1]
 - 1.1 Mérés
 - 1.2 Mértékegységek
 - 1.3 Dimenzióanalízis
- 2 Kinematikai alapfogalmak, mozgás leírása különböző koordinátarendszerekben^[2]
 - 2.1 Kinematikai alapfogalmak
 - 2.2 Mozgás leírása különböző koordinátarendszerekben
- 3 Newton törvények, statika, dinamika, erőfogalom, mozgásegyenlet, tehetetlen és súlyos tömeg, Eötvös-kísérlet
 - 3.1 Statika
 - 3.2 Dinamika
 - 3.3 Erőfogalom
 - 3.4 Newton törvények, tehetetlen tömeg
 - 3.5 Mozgásegyenlet
 - 3.6 Tehetetlen és súlyos tömeg
 - 3.7 Eötvös-kísérlet
- 4 Gyorsuló koordinátarendszerek, tehetetlenségi erők
- 5 Jelenségek a forgó Földön
 - 5.1 Foucault-kísérlet
- 6 Munka tétel
 - 6.1 Impulzus-tétel
 - 6.2 Impulzuszómomentum-tétel
- 7 Pontrendszerek
 - 7.1 Pontrendszerek tételei
 - 7.1.1 Impulzus-tétel
 - 7.1.2 Tömegközéppont-tétele
 - 7.1.3 Impulzuszómomentum-tétel
 - 7.1.4 Munka-tétel
- 8 Merev testek
 - 8.1 Sztatika: az egyensúly feltétele
 - 8.1.1 Az egyensúly típusai
 - 8.2 Dinamika: forgások
 - 8.3 A tehetetlenségi-tenzor
 - 8.4 Pörgettyűk
 - 8.4.1 Erőmentes pörgettyű
 - 8.4.2 Erőmentes aszimmetrikus pörgettyű
 - 8.4.3 Szimmetrikus súlyos pörgettyű
 - 8.4.4 Gyors pörgettyű

Mérés, mértékegységek, dimenzióanalízis^[1]

Mérés

A fizikai fogalmakat (út, idő, sebesség, tömeg stb.) mérhető mennyiségekkel tesszük egyértelművé (egzakttá). A *mérés* általában valamilyen *önkéntesen megválasztott* egységgel történő *összehasonlítás*. A mérés eredményét a

mértékegység és a *mérőszám* együtt fejezi ki. Azt, hogy milyen mennyiség mértékegységéről van szó, az illető mennyiség *mértékével*, *dimenziójával* adjuk meg (például a sebesség dimenziója a hosszúság dimenziójának és az idő dimenziójának a hányadosa). A mértékegység megválasztása megállapodás kérdése.

Mértékegységek

Ebben a szakaszban főleg az SI mértékegységrendszerben használt alap mértékegységekre (alaplennyiségekre), illetve azok definícióira térnek ki. A mértékegységre definíciót az előző szakaszban láthattunk. *Alaplennyiségnek* nevezzük azokat a mértékegységeket, melyek nem vezethetők vissza korábban értelmezett mértékegységekre. Amelyek visszavezethetők, azokat *származtatott* mennyiségeknek hívjuk. A fizikai mennyiségek összessége a *mértékegységrendszer*, melynek alapját az alaplennyiségek képezik. Megállapodás kérdése, hogy mit választunk alaplennyiségnek.

A mértékegységek egységesítésére tett legsikeresebb próbálkozás az SI (Système International d'Unités) nemzetközi mértékegységrendszer. Alaplennyiségei: hosszúság, idő, tömeg, elektromos áramerősség, termodinamikai hőmérséklet, anyagmennyiség, fényerősség. Az SI mértékegységrendszer az alaplennyiségekből, kiegészítő mennyiségekből, és az egységek többszörösét vagy törtrészét kifejezni segítő prefixumokból (előtagokból) áll.

SI alaplennyiségek

Az **idő** mértékegysége a másodperc, jele: s. A másodperc az alapállapotú cézium-133 atom két hiperfinom energiaszintje közötti átmenetnek megfelelő sugárzás 9 192 631 770 periódusának időtartama.

A **hosszúság** mértékegysége a méter, jele: m. A méter annak az útnak a hosszúsága, melyet a fény vákuumban $\frac{1}{299792458}$ másodperc alatt megtesz.

A **tömeg** mértékegysége a kilogramm, jele: kg. A kilogramm az 1889. évben Párizsban megtartott 1. Általános Súly- és Mértékügyi Értekezlet által a tömeg nemzetközi etalonjának elfogadott, a Nemzetközi Súly- és Mértékügyi hivatalban, Sévres-ben őrzött platina-irridium henger tömege.

A **villamos áramerősség** mértékegysége az amper, jele: A. Az amper olyan állandó villamos áram erőssége, mely két egyenes, párhuzamos, végtelen hosszúságú, elhanyagolhatóan kicsiny kör keresztmetszetű és egymástól 1 méter távolságban, vákuumban elhelyezkedő vezetőben fenntartva, e két vezető között méterenként $2 \cdot 10^{-7}$ newton erőt hoz létre.

A **termodinamikai hőmérséklet** mértékegysége a kelvin, jele: K. A kelvin a víz hármaspontja termodinamikai hőmérsékletének $\frac{1}{273,16}$ -szorososa.

Az **anyagmennyiség** mértékegysége a mól, jele: mol. A mól annak a rendszernek az anyagmennyisége, amely annyi elemi egységet tartalmaz, mint ahány atom van 0,0012 kilogramm szén-12-ben. (A mól alkalmazásakor meg kell határozni az elemi egység fajtáját; ez atom, molekula, ion, elektron, más részecske vagy ilyen részecskék meghatározott csoportja lehet.)

A **fényerősség** mértékegysége a kandela, jele: cd. A kandela az olyan fényforrás fényerőssége adott irányban, amely $540 \cdot 10^{12}$ hertz frekvenciájú monokromatikus fényt bocsát ki és sugárerőssége ebben az irányban $\frac{1}{683}$ -ad watt per szteradián.

SI kiegészítő mennyiségek

1 *fok* a teljes szögnek 360-ad része. 1 fok = 60 szögperc, 1 szögperc = 60 szögmsodperc. 1 *radián* annak a középponti szögnek a nagysága, melynek ívhossza egyenlő a kör sugarával. A szög ívmértékben kifejezett nagysága: $\varphi = \frac{s}{r}$, ahol s a körív hossza, r a kör sugara. A teljes szög ívmértékben 2π , mivel a sugár a kör kerületére 2π -szer mérhető fel. 360 fok = 2π radián.

A térszöget *szteradiánban* mérjük (jele: sr). A szteradián a gömbsugar négyzetével egyenlő területű gömbfelületrészhez tartozó középponti térszög. Képlete: $\Omega = \frac{A}{r^2}$, ahol A a gömbfelületrész területe, r a gömb

sugara. A teljes térszög a következő formula alapján adható meg: $\Omega = \frac{4\pi r^2}{r^2} = 4\pi$

SI prefixumok

A következő prefixumok használatosak 10^{-18} -tól 10^{18} -ig sorrendben felírva, két szomszédos prefixum között 1000-szeres a különbség: atto, femto, piko, nano, mikro, milli, egy(ség), kilo, mega, giga, tera, peta, exa.

Dimenzióanalízis

A mérések célja a vizsgált jelenségek minél pontosabb megismerése. A mérés többször elvégezhető, különböző személyek által reprodukálható, ezáltal az adott jelenséget irányító törvények megismeréséhez kerülhetünk egyre közelebb. A törvényszerűségek megfogalmazása többnyire matematikai képletekkel, egyenletekkel történik. A jelenség megértését az eredményekből kapott törvényszerűségek elméleti értelmezése teszi teljessé.

A kísérletezés és az adatkiértékelés során nagyban megkönnyítjük saját dolgunkat, ha figyelembe vesszük, hogy a legtöbb fizikai mennyiség mérőszámmal és mértékegységgel rendelkezik, s a különböző fizikai törvényeket leíró egyenletek két oldalán álló kifejezéseknek azonos *dimenziójúnak* kell lennie. A fizikai mennyiségek dimenzióját úgy értelmezzük, hogy mint az adott mennyiség mérésekor használatos alapmennyiségek összességét. A mechanikával kapcsolatos problémákban leggyakrabban a hosszúság (L), tömeg (M) és idő (T) dimenzió szerepel. A származtatott mennyiségek (pl. v - sebesség, F - erő, ρ - sűrűség) dimenziója minden esetben az alapidimenziók hatványának szorzataként jelenik meg: $\dim v = LT^{-1}$, $\dim F = MLT^{-1}$, $\dim \rho = ML^{-3}$.

Legyen x bizonyos x_1, x_2, \dots, x_N paraméterek X függvénye, azaz: $x = X(x_1, x_2, \dots, x_N)$.

A paraméterek közül néhány kísérletileg is változtatható. A fenti függvénykapcsolat feltérképezése jelenti a fizikai törvény megismerését, a rá vonatkozó matematikai összefüggések felállítását. A fizikai törvények gyakran hatványalakban jelennek meg. Ekkor: $x = \varphi(x_1, x_2, \dots, x_N) \cdot (x_1^{\alpha_1} \cdot x_2^{\alpha_2} \cdot \dots \cdot x_N^{\alpha_N})$ alakú, ahol $\varphi(x_1, x_2, \dots, x_N)$ dimenzió nélküli függvény. A fenti egyenletből tehát a dimenziókra vonatkozóan a következő egyenletet kapjuk:

$$\dim x = \dim(x_1^{\alpha_1} \cdot x_2^{\alpha_2} \cdot \dots \cdot x_N^{\alpha_N}).$$

Mechanikai mennyiségek esetén: $\dim x = L^p M^q T^r$, $\dim x_i = L^{p_i} M^{q_i} T^{r_i}$ ($i = 1, 2, \dots$)

A fenti egyenletbe történő behelyettesítés után: egyrészt:

$$1 = L^{(p-p_1\alpha_1-p_2\alpha_2-\dots-p_N\alpha_N)} M^{(q-q_1\alpha_1-q_2\alpha_2-\dots-q_N\alpha_N)} T^{(r-r_1\alpha_1-r_2\alpha_2-\dots-r_N\alpha_N)},$$

másrészt:

$$p = p_1\alpha_1 + p_2\alpha_2 + \dots + p_N\alpha_N$$

$$q = q_1\alpha_1 + q_2\alpha_2 + \dots + q_N\alpha_N$$

$$r = r_1\alpha_1 + r_2\alpha_2 + \dots + r_N\alpha_N$$

egyenletekre jutunk. (Az alapegységek dimenziói a vektortér bázisvektoraihoz hasonlóan viselkednek.) A fenti lineáris egyenletrendszerben az ismeretlenek az $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N$ mennyiségek. Az egyenletrendszernek általában több megoldása van, ezek közül lehet kiválasztani azokat, melyek fizikailag reálisan írják el a keresett törvényt. Ez a dimenzióanalízis alap gondolata, mellyel bizonyos sejtések tartalmilag reális formában fogalmazhatók meg.

Kinematikai alapfogalmak, mozgás leírása különböző koordinátarendszerekben^[2]

Kinematikai alapfogalmak

9/209

- A *mozgás* az ember legősibb élménye. A mozgás során a testek egymáshoz viszonyított helyzete változik.
- Ahhoz, hogy egy test mozgását leírassuk, célszerű kiválasztani egy másik testet - *vonatkoztatási rendszert* -, amelyhez viszonyítva megadjuk a szóban forgó test hely-, illetve helyzetváltozását. Vonatkoztatási rendszer lehet például a tanterem, mint rögzített test, amelyhez viszonyít leírjuk a kísérletekben felhasznált testek mozgását.
- Az anyagi pont mozgását vonatkoztatási rendszerhez rögzített *koordináta-rendszerben* írjuk le. A koordináta-rendszer kezdőpontjából (origójából) az anyagi ponthoz húzott szakaszt (amely időfüggő is) r helyvektornak nevezzük, $r(t)$ -vel jelöljük.
- *Pálya*: az a görbe, amelyet az anyagi pont mozgása során leír.
- A pálya teljes hosszának, vagy egy részének hossza az *út*, jele: s .
- A pálya két, kezdő- és végpontját összekötő irányított szakasz az elmozdulás, jele: Δr . Az elmozdulás hossza általában nem egyezik meg a két pont között megtett út hosszával.
- A pálya alakja függ a vonatkoztatási rendszertől (pl. egy a megfigyelt anyagi ponthoz képest mozgó vonatkoztatási rendszerben egész más alakú a pálya, mint egy nem mozgóban).
- A sebesség általánosított definíciója: tetszőleges görbén mozgó test esetén képezzük az elmozdulás és a közben eltelt idő hányadosát:

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

$$\text{Ebből pillanatnyi sebesség: } \mathbf{v}(t_0) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left(\frac{\Delta \mathbf{r}}{\Delta t} \right) = \lim_{t \rightarrow t_0} \left(\frac{\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(t_0)}{t - t_0} \right) = \left(\frac{d\mathbf{r}}{dt} \right) = \dot{\mathbf{r}}(t_0)$$

A fentiekben a helyvektorból vezettük le a sebesség definícióját. Most vezessük le az elmozdulás-vektorból:

$$\frac{\Delta \mathbf{r}}{\Delta t} = \frac{\Delta \mathbf{r}}{\Delta s} \frac{\Delta s}{\Delta t}$$

Belátható, hogy a fenti képlet jobb oldalának első tagja az egységnyi hosszúságú érintő irányú t (tangenciális) vektorhoz tart, míg a bal oldalát egyszerűen v -vel jelölhetjük. A fentiekből látható, hogy a helyvektorból és az elmozdulásvektorból számolt pillanatnyi sebesség közötti összefüggés:

$$\mathbf{v} = v\mathbf{t}.$$

Egy mozgó pont sebessége derékszögű koordináta-rendszerben: $\mathbf{v}(t_0) = \sqrt{\dot{x}^2(t_0) + \dot{y}^2(t_0) + \dot{z}^2(t_0)}$.

- A gyorsulás általánosított definíciója: tegyük fel, hogy $v(t)$ sebességet minden időpillanatban ismerjük. Ekkor a pillanatnyi gyorsulásvektor:

$$\mathbf{a}(t_0) = \lim_{t \rightarrow t_0} \left(\frac{\Delta \mathbf{v}}{\Delta t} \right) = \left(\frac{d\mathbf{v}}{dt} \right)_{t_0} = \dot{v}(t_0) = \left(\frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} \right)_{t_0} = \ddot{\mathbf{r}}(t_0)$$

A gyorsulás meghatározása derékszögű koordináta-rendszerben: $\mathbf{a}(t_0) = \sqrt{\ddot{x}^2(t_0) + \ddot{y}^2(t_0) + \ddot{z}^2(t_0)}$.

- *Hajtás*: függőleges: egyszerű gyorsulási feladat, a gyorsulás nagysága g , vízszintes és általános: mindig felbontható a mozgás egy egyenes vonalú egyenletes mozgást és egy szabadesést leíró komponensre. A test pillanatnyi állapota ezek szuperpozíciójával írható le.
- *Körmozgás*: kényszerfeltétel: a test egy rögzített, r sugarú pályán, egy adott (rögzített) középpont körül mozoghat. Főbb mennyiségek:
 - *Periódusidő*: egy körülfordulás ideje, jele: T , mértékegysége: másodperc. (Fordulatszám = $1/T$).
 - *Szögelfordulás*: adott idő alatt a kiindulási helyzetből történő elfordulás szöge. Jele: φ , vagy $\Delta\varphi$ (ha két időpont közötti szögváltozást nézzük).
 - *Ívhossz*: adott idő alatt befutott pályaszakasz (ív hossz, mert ez a kör kerületének törtrésze), jele: $s = \Delta\varphi \cdot r$.

9/209

10/209

- **Sebesség:** időegység alatt befutott ívhossz: $v = \frac{s}{t}$.
- **Szögsebesség:** egységnyi idő alatti szögelfordulást adja meg; jele: $\omega = \dot{\varphi}$.
- A sebesség és a szögsebesség közötti kapcsolat: $v = \frac{2r\pi}{T} \rightarrow \omega = \frac{2\pi}{T}$.
- A fentiek alapján a körmozgás sebessége, a kerületi sebesség: $v = r\omega$

A körmozgást végző test sebességének iránya pillanatról pillanatra, változik, ezért a körmozgást végző test gyorsul. A gyorsulás értéke:

$|\Delta v| = 2v \sin\left(\frac{\Delta\varphi}{2}\right)$. Kis szögekre azonban: $\Delta\varphi \ll 1 \rightarrow \sin\frac{\Delta\varphi}{2} \approx \frac{\Delta\varphi}{2}$. Ennek alapján a fenti kifejezést a következőképpen írhatjuk át:

$a = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{|\Delta v|}{\Delta t} = v \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta\varphi}{\Delta t} = v\omega = r\omega^2 = \frac{v^2}{r}$. A gyorsulás iránya megegyezik a sebességváltozás irányával, ami $\Delta\varphi \rightarrow 0$ határesetben merőleges a sebességre, és a kör középpontja felé mutat. Ezért az egyenes körmozgást végző test gyorsulását centripetális gyorsulásnak nevezzük., amelyet a fentebbi kifejezéssel adhatunk meg. Vektoros alakban pedig:

$$\mathbf{a}_{cp} = r\omega^2 \mathbf{n} = \frac{v^2}{r} \mathbf{n} = v\omega \mathbf{n}, \text{ ahol } n \text{ a kör középpontja felé mutató (normális) egységvektor.}$$

Egyenesen gyorsuló körmozgás esetén mind az ívhossz, mint a szögelfordulás az idő négyzetével arányos, és bevezetjük a szöggyorsulást, amely a szögsebesség idő szerinti első deriváltja:

$$\beta = \dot{\omega} = \ddot{\varphi} \rightarrow \varphi = \frac{\beta}{2}t^2, \omega = \beta t, \beta = \text{állandó.}$$

Szögsebességvektor: vegyünk egy Q pontot a körmozgás síkjára merőlegesen, amiből kiinduló, a körmozgás rögzített pontja felé irányuló egységvektor és a szögsebesség értékének szorzata a szögsebességvektor. Válasszunk egy r vektort, mely a Q pontból a test aktuális helyére mutat, és a rendszert úgy alakítsuk ki, hogy (e, r, v) jobbsodrású rendszer legyen. Ekkor a pillanatnyi sebesség: $\mathbf{v} = \vec{\omega} \times \mathbf{r}$

A harmonikus rezgések a körmozgás adott egyenesre levetített változatai.

Mozgás leírása különböző koordináta-rendszerekben

Kiindulási alapként a Descartes-koordinátákat használom (DK - x, y, z), ehhez írom fel a különböző egyéb koordináta-rendszerekre történő átszámítást oda és vissza.

Hengerkoordináták (HK) Gömbi koordináták (GK)

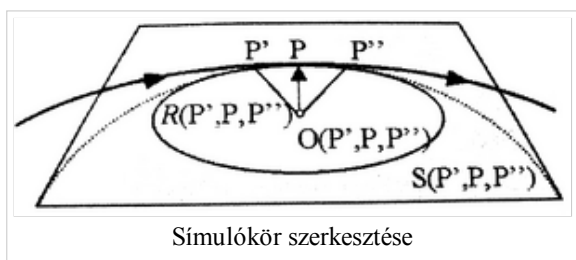
ρ, φ, z	r, ϑ, φ
DK \rightarrow HK	DK \rightarrow GK
$\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$	$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$
$\varphi = \arctg\left(\frac{y}{x}\right)$	$\varphi = \arctg\left(\frac{y}{x}\right)$
$z = z$	$\vartheta = \arctg\left(\frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z}\right)$

DK \leftarrow HK	DK \leftarrow GK
$x = \rho \cos\varphi$	$x = r \sin\vartheta \cos\varphi$
$y = \rho \sin\varphi$	$y = r \sin\vartheta \sin\varphi$
$z = z$	$z = r \cos\vartheta$

A sebességek/gyorsulások kiszámítása a Descartes-koordináták alapján történik, csak x, y, z helyére mindig a másik koordináta-rendszerbeli megfelelőjét kell behelyettesíteni (természetesen a deriválási szabályok figyelembevételével).

10/209

Simulósík és simulókör



Legyen egy mozgó pont t időpillanatban a pályagörbe P pontjában. Ehhez felvesszük egy kis idővel korábbi, majd egy kis idővel későbbi ($P'(t')$ és $P''(t'')$) pontokat. A P', P, P'' ponthármas egy síkot határoz meg, illetve ezen a három ponton keresztül kör rajzolható, melynek középpontja a $P'P$ és a $P''P$ szakaszok felezőmerőlegeseinek metszéspontja. Ha $t' \rightarrow t$ és $t'' \rightarrow t$, akkor a fent nevezett síkot simulósíknak, a kört simulókörnek nevezzük, melynek sugara $R(P)$. A

térgörbe P pontbeli görbületét a $g(P) = \frac{1}{R(P)}$. Kis sugárhoz nagy görbület tartozik, az egyenes görbülete minden pontban nulla. A síkgörbe görbületi sugara egyébként minden olyan pontban, ahol $y'(x_0) \ll 1$, ott körülbelül:

$$\frac{1}{R(x_0)} \cong y''(x_0)$$

A természetes koordinátarendszer

A térgörbe a P pont környezetében belesimul a simulósíkba. A görbe adott pontbeli \mathbf{t} érintő egységvektora a simulókör középpontja felé mutató \mathbf{n} egységvektorra merőleges. A fenti két vektor a simulósíkban van. Erre a síkra válasszunk egy merőleges egységvektort, amely a P pontból indul ki, méghozzá úgy, hogy a $(\mathbf{t}, \mathbf{n}, \mathbf{b})$ jobbsodrású, derékszögű rendszer legyen. A $(\mathbf{t}, \mathbf{n}, \mathbf{b})$ koordinátarendszert természetes koordinátarendszernek nevezzük. Sebesség:

$$\mathbf{v} = v \cdot \mathbf{t} = (R\dot{\varphi}) \cdot \mathbf{t}, \text{ gyorsulás: } \mathbf{a} = \dot{\mathbf{v}} = \dot{v} \cdot \mathbf{t} + v \cdot \dot{\mathbf{t}} = \dot{v} \cdot \mathbf{t} + v\dot{\varphi} \cdot \mathbf{n} = \dot{v} \cdot \mathbf{t} + \left(\frac{v^2}{R}\right) \mathbf{n}$$

Speciális térbeli mozgások

Csavarmozgás	Ciklois mozgás	Spirál	Logaritmikus spirál
$x(t) = R\cos(\omega t + \varphi)$	$x = R(\varphi - \sin\varphi)$	$r(t) = v_0 t + r_0$	$r(t) = r_0 - (v_0 t$
$y(t) = R\sin(\omega t + \varphi)$	$y = R(1 - \cos\varphi)$	$\varphi(t) = \omega_0 t + \varphi_0$	$\varphi(t) = -tg\alpha \cdot ($
$z(t) = ct + z_0$		$r(\varphi) = v_0 \left(\frac{\varphi - \varphi_0}{\omega_0}\right) + r_0 = a\varphi + b$	$r(\varphi) = r_0 e^{-\left(\frac{\varphi}{tg\alpha}\right)}$

A sebességek kiszámítása itt is az idő szerinti első deriváltakkal történik.

Newton törvények, statika, dinamika, erőfogalom, mozgásegyenlet, tehetetlen és súlyos tömeg, Eötvös-kísérlet

Statika

A statika a mechanikának az az ága, mely a különböző rendszerekre ható, vagy azokban ébredő erőket, forgatónyomatékokat/momentumokat vizsgálja statikus egyensúlyban, azaz olyan állapotban, ahol a testek egymáshoz viszonyított helyzete időben nem változik, vagy ahol a komponensek és struktúrák állandó sebességgel mozognak. Statikus egyensúlyban a rendszer nyugalomban van, vagy a tömegközéppontja egyenes vonalú egyenletes mozgást végez. A mozgó testeket a dinamika vizsgálja.

Dinamika

A különböző fizikai jelenségek időbeli fejlődését vizsgálja.

Erőfogalom

- **Empirikus:** Az erő bármi olyan hatás, mely egy tömeggel rendelkező testet gyorsulásra készítet. Rugós erőmérőnél a rugó azért nem gyorsul, mert benne ellenerő ébred.
- **Dinamikai:** Adjuk meg a mozgásállapot-változást a sebességváltozás és a tömeg segítségével. Ha két teljesen egyforma kocsi ütköztetünk, azok "sebességet cserélnek" az ütközés után. Ha különbözőeket, akkor a sebességváltozások nem lesznek egyenlők, de megfelelő (önkéntes) szorzók bevezetésével egyenlővé tehetők: $m_A \Delta v_{AB} = m_B \Delta v_{BA}$. A m_i szorzók az ütköző kocsik tulajdonságát fejezik ki. Belátható, hogy három testet páronként ütköztetve a fenti egyenlet mintájára kapott három egyenletből álló túlhatározott egyenletrendszer megoldható, a testekre jellemző együtthatót találtunk. Vezessük be az impulzusváltozás (lendületváltozás) mennyiségét: $\Delta p = m \Delta v$, ahol m a fentebb megismert szorzó, a test tömege. A kocsikat különböző minőségű rugós erőmérőkkel ellátva tapasztalható, hogy ugyanaz a mozgásállapot-változás különböző idő alatt is végbemehet, a mechanikai kölcsönhatás folyamatának elemzésére szolgáló erőt ezért célszerű az $F = \frac{dp}{dt}$ alak felírása (ezt az összefüggést impulzustételnek is nevezik).

Newton törvények, tehetetlen tömeg

1. Tehetlenség törvénye: erőhatás mentes inerciarendszerben minden test nyugalomban van, vagy egyenes vonalú egyenletes mozgást végez.
2. Mozgás törvény (dinamika alaptörvénye): különböző erők, különböző gyorsulásokat hoznak létre a testeken, de az arány jellemző a testre, ez a **tehetetlen tömeg**. $\mathbf{F} = m \cdot \mathbf{a} \rightarrow m = \frac{\mathbf{F}}{\mathbf{a}}$.
3. Hatás-ellenhatás törvénye: Ugyanakkora, de ellentétes irányú erő ébred minden párkölcsönhatásban.
4. Erőhatások függetlenségének elve (szuperpozíció): A test úgy mozog, mint a ráható erők által egyenként létrehozott mozgások eredője. $\sum_i \mathbf{F}_i = \mathbf{F}$

Mozgásegyenlet

A dinamika alaptörvénye a testre ható eredő erő és a test gyorsulása között állapít meg kapcsolatot. A törvény segítségével, ha az erőket ismerjük, akkor a test mozgására következtethetünk, ha a test kinematikai jellemzőit ismerjük, akkor az erőkről nyerhetünk információkat. A tapasztalat azt mutatja, hogy az erők igen sokszor a kölcsönhatás természetétől függetlenül, pusztán az erőt kifejtő test meghatározott paramétereinek (pl. a helykoordinátáinak) függvényében megadhatók. Az ilyen függvényeket *erőtörvényeknek* nevezzük. Azt az egyenletet, amit akkor kapunk, ha a dinamika alaptörvényébe beírjuk az erőtörvényeket, valamint a gyorsulás helyébe a helyvektor második deriváltját, *mozgásegyenletnek* nevezzük. Az $m \cdot \ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F}$ mozgásegyenlet általában a mozgás pályáját meghatározó másodrendű differenciálegyenlet. Ahhoz, hogy a mozgás pontos leírását megadjuk, az erők mellett valamely pillanatban ismernünk kell a mozgás kinematikai jellemzőit is (vagyis a *kezdőfeltételeket*).

Tehetetlen és súlyos tömeg

Newton második törvényében - mint fentebb látható - a tömeg, mint a tehetlenség mértéke jelenik meg. A tehetetlen tömeg számértéke alapján a testek sorrendbe rakható aszerint, hogy mennyire gyorsulnak az adott erő hatására.

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 el súlyos tömegnek, és helyettesítsünk be a mozgásegyenletbe:

$$m_{1t} \ddot{\mathbf{r}} = -G \frac{m_{1s} m_{2s}}{r^2} \frac{\mathbf{r}}{r}$$

A fenti mozgásegyenletben az egyes test mindkét tulajdonsága szerepel. A kérdés az, hogy a súlyos, és a tehetetlen tömeg egyenlő-e, egyszerűsíthetünk-e m_1 -gyel? Newton fonalga-kísérletekben vizsgálta ezt a kérdést, ahol adott

fonalhosszúság mellett változtatta a lengő test anyagi minőségét és mérte a periódusidőt. $T = 2\pi \sqrt{\frac{l}{B} \frac{m_t}{m_s}}$, ahol B

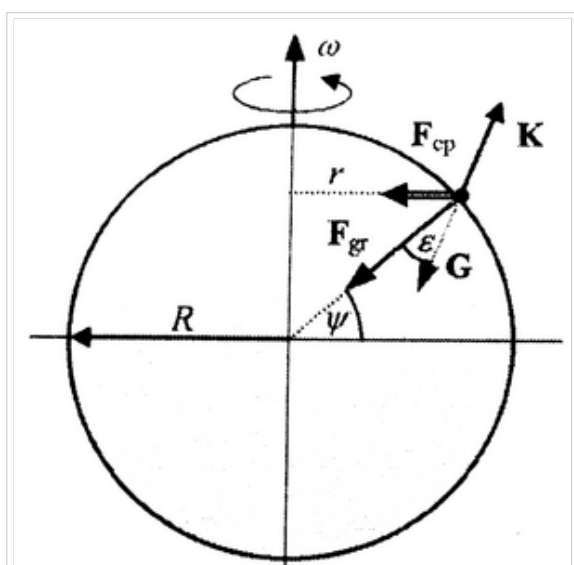
a Föld sugarára és tömegére jellemző állandó, l a fonal hossza, m_t és m_s pedig a súlyos és tehetetlen tömeg. Ha a kettő eltérő lenne, akkor az anyagi minőségtől függően változna az inga lengésideje. Newton mérési pontosságán belül ilyet nem tapasztalt, azaz a tehetetlen és a súlyos tömeg aránya állandó, az anyagi minőségtől függetlenül. A súlyos és tehetetlen tömeg arányát igen nagy pontossággal Eötvös Loránd mérte.

Eötvös-kísérlet

Eötvös az $\frac{m_t}{m_s}$ arányt az általa kifejlesztett torziós ingával mérte (1889-ben). A mérés a következő elven alapult: a forgó Földhöz képest nyugvó testre - inerciarendszerből szemlélve - hat a Föld gravitációs vonzásából származó \mathbf{F}_{gr} erő, valamint a talaj által kifejtett \mathbf{K} kényszererő. A két erő tartja körpályán a testet: $m_t \mathbf{a}_{cp} = \mathbf{F}_{gr} + \mathbf{K}$,

$$(a_{cp} = r\omega^2 = R \cos\psi \cdot \omega^2).$$

A test \mathbf{G} súlyvektora a Föld középpontjából húzott sugárral ϵ szöget zár be. Ez a szög megadható az \mathbf{F}_{gr} , \mathbf{F}_{cp} , \mathbf{G} vektorokból álló háromszögre:



Az Eötvös-inga mögötti elképzelés

$$\frac{\sin\epsilon}{\sin(\psi + \epsilon)} = \frac{|\mathbf{F}_{cp}|}{|\mathbf{F}_{gr}|} = \frac{m_t R \cos\psi \cdot \omega^2}{m_s g_{90^\circ}} = \left(\frac{m_t}{m_s}\right) \frac{R \omega^2 \cos\psi}{g_{90^\circ}}$$

A fenti egyenlet teremt kapcsolatot a súlyos és a tehetetlen tömeg között. A $\psi = 45^\circ$ földrajzi szélességen a súlyos és a tehetetlen tömeg megegyezősége esetén $\epsilon = 357''$. Ha ϵ adott helyen, különböző testekre más és más lenne, az azt jelenteni, hogy a súlyos és tehetetlen tömeg aránya anyagi minőségtől függ.

Eötvös módszere a következő volt: A torziós inga vízszintes rúdja azonos magasságban függesztett testeket. A rúd egyik végére platina hengert, a másik végére pedig különböző anyagú testeket. Ha a két test súlyának iránya különbözik, akkor a torziós szál kissé elcsavarodik. Ha az inga rúdját K-Ny irányba állítva egyensúlyba állítjuk, akkor nem lehet megállapítani, hogy a torziós szál csavarodásmentes állapotában hol lenne az ingarúd egyensúlyi helyzete. Amennyiben azonban az egész ingatestet, a torziószálat tartalmazó műszerházzal és a felfüggesztéssel együtt száznyolcvan fokkal elforgatjuk, akkor az első helyzetben ható forgatónyomaték ellentétes irányúvá válik, emiatt az ingarúdnak az első mérési helyzethez képest el kellett volna fordulnia. Ilyet azonban Eötvös nem tapasztalt, pedig a $357''$ milliommód részét is képes volt kimutatni a műszere. A tehetetlen és súlyos tömeg közötti eltérés Eötvös méréseiben: $\Delta\kappa < 1 : 20000000 = 5 \cdot 10^{-8}$.

Gyorsuló koordinátarendszerek, tehetetlenségi erők

Ha egy egyenes vonalon egyenletesen gyorsuló koordinátarendszerben végzünk kísérleteket, akkor azt tapasztaljuk, hogy:

14/209

- A magára hagyott test gyorsul,
- A nyugalom fenntartásához erő kell.

Ezek alapján a Newton-törvények nem tarthatóak fenn eredeti alakukban. Ez azt jelenti, hogy a gyorsuló rendszer nem inerciarendszer. Ebben az esetben a számítások úgy végezhetőek el, ha bevezetünk egy fiktív erőt, amely a mozgástörvényben a ható erők közül vonódik le, és értéke a koordináta-rendszer gyorsulása szorozva a tekintett test tömegével:

$$F - F' = ma'$$

a' ekkor a relatív gyorsulás.

Ha a koordináta-rendszerünk forgó mozgást végez, akkor az szintén nem lesz inerciarendszer. Belátható, hogy ekkor tetszőleges V vektor nyugalmi rendszerben vett időderiváltjára és a forgórendszerben vett deriváltjára a következő kapcsolat áll fenn:

$$\frac{dV}{dt} = \frac{d'V}{dt} + \omega \times V$$

Ezt alkalmazva a helyvektorra kétszer, megkapjuk a gyorsulásokat és a tömeggel beszorozva a fiktív erőket. A kifejezés ekkor:

$$F - ma_0 - m[\omega \times (\omega \times R)] - 2m(\omega \times v') - m\left(\frac{d\omega}{dt} \times R\right) = ma'$$

Az első korrekciós tag az egyenes gyorsulásnál is fellépett translációs tag, a második a centrifugális erő, a harmadik a Coriolis-erő, a negyedik az Euler-erő.

Jelenségek a forgó Földön

A fentiek egy életszerű alkalmazása a forgó Földön megfigyelhető jelenségek számolása. A Föld gyakorlatilag egyenletesen forog, így az Euler-erő nem lép fel. A centrifugális erő a kettős kereszt-szorzat hatására a forgási tengelytől kifelé mutat. Ennek hatására a nehézségi erő csökken, továbbá irányát is megváltoztatja egy kicsit. A centrifugális erő hatása a Föld lapultsága is. Igen kis mértékben a nehézségi erő vektora érzékeny a közelében levő anyagsűrűség eloszlására. Ezt igen érzékeny műszerekkel, például az Eötvös-ingával ki lehet mérni, ennek segítségével próbáltak több helyen az országban kőolajat keresni.

Mozgó testek esetén játszik szerepet a Coriolis-erő. Célszerű lehet a szögsebességet a lokális felszínre merőleges és érintőleges komponense bontani. Ekkor a Coriolis-erőnek három tagja lesz amelyek három rokon jelenségért felelősek:

- A vízszintesen elindított test az északi féltekén jobbra, délen balra térül el,
- A lefelé mozgó testek keletfelé, a felfelé mozgó testek nyugatra térülnek el,
- A kelet felé mozgó testekre az erő függőlegesen felfelé hat, a nyugatfelé mozgókra lefelé.

A második pont igen nagy jelentőségű a mérsékeltövi ciklonok leírásában, amelyek mozgására igen nagy hatással van a Coriolis-erő.

Foucault-kísérlet

Szintén az előbbiekhöz tartozik a Jean Foucault által demonstrált kísérlet, amelyben egy felfüggesztett és lengésbe hozott inga lengéssíkja lassan elfordul, ahogy a lengés vízszintes sebessége miatt a fenti első pontban leírt erő hat rá.

Munka tétel

Definiáljuk F erő *munkáját* úgy, mint az erő és az erő irányába eső elmozdulás szorzatát: $W = F \cdot s \cdot \cos\alpha$, ha F erő α szöget zár be az elmozdulás irányával. Az erő azonban helyről helyre változhat, vezessük be az elemi munkát,

14/209

amelyen olyan kis szakaszokon nézzük az erőt, ahol az állandónak tekinthető. Az *elemi munka* definíciója:

$$\delta W_i = F_i \cos \alpha_i \Delta s_i. [3] \text{ A teljes munka ekkor: } W = \sum_i \delta W_i = \sum_i F_i \Delta s_i \cos \alpha_i \xrightarrow{\Delta s \rightarrow 0}$$

$$W = \int_0^s (F_i \cos \alpha_i) ds_i \rightarrow W = \int \mathbf{F} \cdot d\mathbf{s} \text{ (ahol } \mathbf{F} \text{ és } \mathbf{s} \text{ vektorok).}$$

Eddig egyenes pályával és változó erővel foglalkoztunk, most nézzük a teljesen általános, görbe vonalú pályát (g). Ezen felvehetünk tetszőlegesen kicsiny ívdarabokat, amelyeket az ívdarab kezdőpontjából a végpontjába mutató elmozdulásvektorral helyettesítünk. Az ívdarabok hosszával a nullához tartva a következőt kapjuk (egyébként az \mathbf{F}

$$\text{erő (g) görbe mentén vett vonalintegrálját): } W = \int_{(g)} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} = \int_{A,(g)}^B \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r}. \text{ A munka skalármennyiség,}$$

$$\text{értéke pozitív és negatív is lehet. Dimenziója: } ML^2 / T^2, \text{ mértékegysége: } 1J = 1N \cdot m = 1 \frac{kg \cdot m^2}{s^2}$$

A munkatétel leírásához induljunk ki az impulzustételből: $\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt}$, és szorozzuk meg az egyenletet a pálya kicsiny szakaszát megadó $\Delta \mathbf{r} = \mathbf{v} \Delta t$ elemi elmozdulással. Ekkor az elemi munka:

$$\delta W = \mathbf{F} \cdot \Delta \mathbf{r} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} \cdot \mathbf{v} \cdot \Delta t = m \frac{d\mathbf{v}}{dt} \cdot \mathbf{v} \Delta t = m \mathbf{v} \cdot \Delta \mathbf{v}, \text{ mivel } \Delta \mathbf{v} = \frac{d\mathbf{v}}{dt} \Delta t.$$

$$\text{És használjuk fel azt is, hogy: } \Delta \left(\frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 \right) = \frac{1}{2} m (\mathbf{v} + \Delta \mathbf{v})^2 - \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 = m \mathbf{v} \cdot \Delta \mathbf{v} + \frac{1}{2} m (\Delta \mathbf{v})^2,$$

amiből elemi sebességváltozás esetére az következik, hogy:

$$\Delta \left(\frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 \right) = m \mathbf{v} \cdot \Delta \mathbf{v} \rightarrow \delta W = \Delta \left(\frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 \right). \text{ Az elemi munkára adódó járulékokat a teljes pályára}$$

összeadva a következőt kapjuk: $W = \frac{1}{2} m \mathbf{v}_2^2 - \frac{1}{2} m \mathbf{v}_1^2$, ahol \mathbf{v}_2 és \mathbf{v}_1 rendre a test sebessége a pálya végpontjában és kezdőpontjában. Ez a munkatétel.

Az $E_k = \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2$ mennyiséget *kinetikus*, vagy *mozgási energiának* nevezzük.

Impulzus-tétel

Pontosabb megfogalmazása Newton második törvényének: $\mathbf{F} = m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{d(m \cdot \mathbf{v})}{dt} = \frac{d\mathbf{p}}{dt}$, azaz az erő az impulzus - lendület - idő szerinti első deriváltja. Ezt az összefüggést impulzustételnek nevezik.

Impulzusmomentum-tétel

Írjuk fel a dinamika alaptörvényét pontszerű testre és szorozzuk balról vektoriálisan a test helyvektorával:

$$\mathbf{r} \times \mathbf{F} = \mathbf{r} \times \frac{d\mathbf{p}}{dt}. \text{ Az egyenlet jobb oldalát alakítsuk át a differenciálási szabályok figyelembe vételével a}$$

következőképpen: $\mathbf{r} \times \frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{d}{dt} (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) = \frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \mathbf{p} + \mathbf{r} \times \frac{d\mathbf{p}}{dt}$. Mivel \mathbf{r} idő szerinti első deriváltja, azaz a sebességvektor párhuzamos \mathbf{p} impulzusvektorral, ezért a vektoriális szorzatuk nulla, a jobb oldal első tagja ezért zérus.

Vezessük be az *impulzusnyomatékot* (*perdületet*): $\mathbf{N} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = \mathbf{r} \times m \mathbf{v}$. Ami a forgatónyomatékkal a következő kapcsolatban áll: $\mathbf{M} = \mathbf{r} \times \mathbf{F} = \frac{d\mathbf{N}}{dt}$.

A dinamika alaptörvényének közvetlen következményeként kapott összefüggés azt fejezi ki, hogy *a pontszerű testre*

ható erők forgatónyomatékainak eredője megegyezik a test impulzusnyomatékának időderiváltjával. Ezt az összefüggést nevezik *impulzusmomentum-tételnek*, vagy más néven *perdülettételnek*.

Pontrendszerek

Pontrendszerrel akkor beszélünk, ha tömegpontoknak olyan halmazát tekintjük, amelyek között csak centrális erők hatnak. A tömegpontok közötti erőket *belső erőknek*, a környezetből eredő erőhatásokat *külső erőknek* nevezzük.

Pontrendszerek tételei

Az egyes tömegpontok mozgásegyenleteinek összegzéséből kapható a következő összefüggés:

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

A hatás-ellenhatás törvénye miatt a belső erők teljes szummája zérus.

Impulzus-tétel

A fenti szummából egy időderiváltat kiemelhetünk:

$$\sum_i \mathbf{F}_i^{(k)} = \frac{d}{dt} \sum_i m_i \dot{\mathbf{v}}_i$$

Az időderiválás mögött a pontrendszer teljes impulzusa áll, ez a pontrendszer impulzus-tétele.

Tömegközéppont-tétele

Egy pontrendszer mozgása jellemezhető dinamikai szempontból egyetlen pont mozgásával, amely pontban egyesül a pontrendszer összipulzusa. Másképp megfogalmazva, bármely pontrendszer tömegközéppontja úgy mozog, mintha benne a rendszer össztömege lenne egyesítve, és rá a rendszerre ható erők eredője hatna. Ennek a pontnak a helyvektora:

$$\mathbf{r}_{TKP} = \frac{\sum_i m_i \mathbf{r}_i}{\sum_i m_i}$$

Impulzusmomentum-tétel

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. A végeredményben az időderiválás hasonlóan kiemelve:

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

Baloldalon a rendszerre ható erők eredő forgatónyomatéka áll, jobboldalon a deriválás alatt pedig a rendszer összeimpulzusnyomatéka (perdülete). Ez a pontrendszerre vonatkozó impulzusmomentum-tétel.

Az impulzusmomentum felbontható egy saját- és egy pályaösszetevőre. A pályaösszetevő időbeli megváltozása a tömegközéppontra ható külső erők forgatónyomatéka. A sajátösszetevőre a változás a tömegközépponti rendszerben felírt helyvektorokkal felírt forgatónyomatékok összege a külső erők hatására.

Munka-tétel

A mozgásegyenleteket most kis elmozdulásokkal beszorozva az erők által végzett munkák összegét kaphatjuk meg. Itt

nem esnek ki az erők, ezért az eredményben is megmarad a külső erők összmunkája, és a belső erők összmunkája. A kettő összege egyenlő a kinetikus energia megváltozásával:

$$W_k + W_b = \Delta \frac{1}{2} \sum_i m_i \mathbf{v}_i^2$$

Az energiakifejezés átírható a tömegközéppont mozgásából származó járulékok és az akörüli mozgásból származó járulékok összegére:

$$\frac{1}{2} \sum_i m_i \mathbf{v}_i^2 = \frac{1}{2} \left(\sum_i m_i \right) \cdot \mathbf{v}_0^2 + \frac{1}{2} \sum_i m_i \epsilon_i^2$$

ahol ϵ_i -k a tömegközépponthoz viszonyított sebességek.

Merev testek

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 koordinátaival 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).

Sztatika: 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 impulzusmomentum-tételből:

$$m \ddot{\mathbf{r}}_0 = \sum_{i=1}^N \mathbf{F}_i \quad [1]$$

$$\frac{d}{dt} \sum_{i=1}^N m_i (\mathbf{r}_i \times \dot{\mathbf{r}}_i) = \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \times \mathbf{F}_i \quad [2]$$

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 [1] 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. Az összes egyensúlyi feltételt megkaphatjuk a virtuális munka elvéből:

$$\sum_{i=1}^N \mathbf{F}_i \delta \mathbf{r}_i = 0$$

Ez a d'Alembert elv speciális esete $\ddot{\mathbf{r}}_i = 0$. Így szabad merev testre az alábbi feltételek adódnak:

$$\sum_{i=1}^N \mathbf{F}_i = 0 \text{ és } \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \times \mathbf{F}_i = 0$$

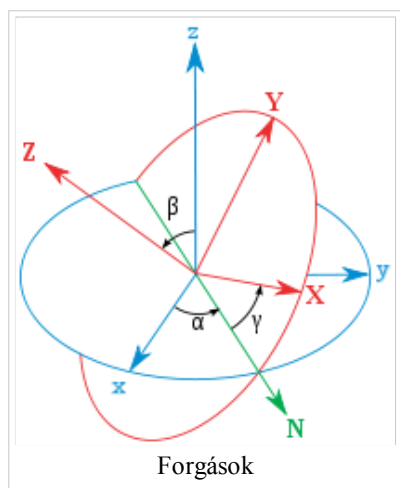
Egy nem szabad merev testnél ugyanezek a feltételek érvényesek, ha a külső erőkbe beleértjük azokat a külső kényszererőket is, amelyek a kényszerfeltételekből – az adott testnek más testekkel való érintkezéséből- származnak. Tehát: Merev test egyensúlyának szükséges és elégséges feltétele, hogy a testre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

Az egyensúly típusai

Az egyensúly típusai alatt az egyensúlyi helyzet stabilitását értjük. Ez úgy vizsgálható, hogy a testet kissé kimozdítjuk egyensúlyából és magára hagyjuk. Ha a test a kitérés 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.

Dinamika: forgások

A merev testek forgásának vizsgálatához két koordinátarendszert veszünk fel: az ábrán pirossal jelölt koordinátatengelyeket tartalmazó K' -t és a kékkel megrajzolt K koordináta-rendszert. Az ábrán látható szögeket Euler-szögeknek nevezzük. Segítségükkel (és a koordinátákkal) egy merev test helyzete egyértelműen megadható a Descartes-koordinátarendszerben. Az N vonal az ún. csomóvonal, azaz az a vonal, ami a két sík metszéspontja.



Az alábbi összefoglalásban az egyes szögek mellett az általuk felvett szögintervallum látható, ill. az, hogy melyik tengely körüli helyzetváltozást írja le.

- β $[0, \pi]$ csomóvonal
- γ $[0, 2\pi]$ piros Z
- α $[0, 2\pi]$ kék z

A forgási szögsebesség pedig kifejezhető a K és K' -beli koordináták, ill. az adott tengelyek és csomóvonal irányú egységvektorok segítségével:

$$\omega = \dot{\beta} \cdot \mathbf{n}_{cs} + \dot{\gamma} \cdot \mathbf{n}_Z + \dot{\alpha} \cdot \mathbf{n}_z$$

Az egységvektorok K -beli és K' -beli koordinátái pedig leolvashatóak az ábráról.

A tehetetlenségi-tenzor



Részletesebb leírás:

Merev test impulzuszmomentuma:

$$\sum_i \vec{r}_i \times \vec{p}_i = \sum_i m_i \vec{r}_i \times \vec{v}_i = \sum_i m_i \vec{r}_i \times (\vec{\omega} \times \vec{r}_i) = \sum_i m_i (r_i^2 \vec{\omega} - (\vec{r}_i \vec{\omega}) \vec{r}_i) = \sum_i m_i (\mathbf{I} r_i^2 - \vec{r}_i$$

Ahol Θ a tehetetlenségi tenzor. A forgómozgás egyenlete:

$$\frac{d\vec{N}}{dt} = \vec{M}$$

ekkor a következő alakú:

$$\frac{d(\Theta \vec{\omega})}{dt} = \vec{M}$$

Rögzített tengely körüli forgás esetén a tengely irányába mutató egységvektorral az arra a tengelyre vontkoztatott tehetetlenségi nyomaték:

$$\Theta = \vec{e} \Theta \vec{e}$$

A rögzített tengely körüli forgómozgás egyenlete:

$$\Theta \dot{\omega} = M$$

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. A mozgásegyenletek felírásához a pörgettyűt belehelyezzük egy forgó és egy nyugvó koordinátarendszerbe. A két koordinátarendszer origója megegyezik, a forgó rendszer nem feltétlenül forog együtt a pörgettyűvel.

Legyen $\frac{d\mathbf{A}}{dt}$ valamely \mathbf{A} vektor változásának sebessége a nyugvó koordináta-rendszerben (K). Ha a forgó rendszerhez képest \mathbf{A} nem változik, a nyugvó rendszerben a változás csak a forgásból áll:

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

Amennyiben a pörgettyű a forgó rendszerhez képest mozgást végez, az egyenlet így módosul (K'-ben):

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

Ha $\mathbf{A} = \mathbf{N}$, akkor az egyenletünk:

$$\frac{d\mathbf{N}}{dt} = \mathbf{M} - \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{N}$$

Ha K' főtengely-rendszer: $N_i' = \omega_i' \theta_i'$; $\boldsymbol{\omega}' = (\omega_1, \omega_2, \omega_3)$

A fenti egyenletből a forgatónyomatékok kifejezve és a keresztszorzás elvégezve komponensenként megkapjuk az Euler-egyenleteket:

$$\theta_1 \dot{\omega}_1 + \omega_2 \omega_3 (\theta_2 - \theta_3) = M_1$$

$$\theta_2 \dot{\omega}_2 + \omega_3 \omega_1 (\theta_1 - \theta_3) = M_2$$

$$\theta_3 \dot{\omega}_3 + \omega_1 \omega_2 (\theta_2 - \theta_1) = M_3$$

Erőmentes pörgettyű

$\mathbf{M} = 0$; két főtehetetlenségi nyomaték megegyezik: $\theta_1 = \theta_2$, ezek pedig nem egyeznek a harmadikkal. Így $\theta_3 \dot{\omega}_3 = 0 \Rightarrow \omega_3 = \text{all.} = \omega_0$. Jó közelítéssel a Föld is ez.

Ha bevezetjük az $\alpha = \frac{\theta_3 - \theta_1}{\theta_1} \omega_0$ mennyiséget, és ezt, valamint az előbbi feltételeket behelyettesítjük, lineáris oszcillátort leíró eredményt kapunk:

$$\boldsymbol{\omega}' = (A \cos(\alpha t + \delta), A \sin(\alpha t + \delta), \omega_0)$$

A szögsebesség az Euler-szögekkel is kifejezhető. A felírásakor fel kell írni a szögsebesség komponenseit az Euler-szögekkel kifejezve nyugvó koordináta-rendszerben. Ezután az egyes komponenseket egyenlővé tesszük az oszcillátor rezgését leíró megfelelő komponensekkel, és a kapott egyenletrendszer megoldjuk.

Erőmentes aszimmetrikus pörgettyű

$$\theta_3 > \theta_2 > \theta_1$$

az energiamegmaradás:

$$2E = \theta_1 \omega_1^2 + \theta_2 \omega_2^2 + \theta_3 \omega_3^2 \quad [1]$$

impulzusmomentum:

$$N^2 = \omega_1^2 \theta_1^2 + \omega_2^2 \theta_2^2 + \omega_3^2 \theta_3^2 \quad [2] = N_1^2 + N_2^2 + N_3^2 \Rightarrow \text{gömbfelület}$$

Az ω_1 és ω_3 az alábbi Knorr rafinériával határozható meg:

$$\theta_1 \cdot [1] - [2] \rightarrow \omega_3^2$$

$$\theta_3 \cdot [1] - [2] \rightarrow \omega_1^2$$

A második komponens pedig a 2. Euler-egyenletből fejezhető ki.

Szimmetrikus súlyos pörgettyű

Ennek a pörgettyűnek a mozgását csak abban az esetben vizsgáljuk, amikor a pörgettyűnek van szimmetriatengelye, a

21/209

rögzített O pont ennek egyik pontja, és az S tömegközéppont is a szimmetriatengelyen van, O-tól $OS=s$ távolságra. A térben rögzített koordináta-rendszer Z tengelye mutasson függőlegesen felfelé, a testhez rögzített X'Y'Z' fő tehetetlenségi rendszer (amelynek tengelyeire rendre az A,A,C fő tehetetlenségi nyomatékok és a p,q,r szögsebesség-komponensek vonatkoznak) helyzetét jellemezzük az Euler-szögekkel. A probléma megoldásához felhasználhatjuk a mozgásegyenletek első három integrálját (három elsőrendű differenciálegyenlet a szögekre). Az egyik integrált a $T+V=const.$ energiátétel adja. Ha m a pörgettyű tömege, a potenciális energia (az Euler-szöges ábra! a TKP a Z' tengelyen van):

$$\frac{1}{2}(Ap^2 + Aq^2 + Cr^2) + mgscos\beta = const.$$

A másik két integrálhoz úgy jutunk, hogy tudjuk azt, hogy a nehézségi erő forgatónyomatéka a Z és Z' által alkotott tengelyre merőleges, ezért a forgatónyomaték z komponense 0. Az impulzusmomentum tétele alapján $N_z = const.$; $N_z' = const.$

A további számítások: $N_z = \mathbf{N} \cdot \mathbf{n}_z$ felírjuk, majd az energiátételbe p,q,r-et az Euler-szögekkel és deriváltjaival felírva behelyettesítjük. Végül megoldjuk az egyenletrendszer (a megfelelő kezdeti feltételek felírása után: $\beta = 0$; $\dot{\alpha} = 0$; $\dot{\gamma} = r_0$).

Gyors pörgettyű

Ez a fajta pörgettyű az előbbinek egy speciális esete: ilyenkor $r_0 \gg \frac{2mgsA}{C^2}$. Ha a mozgást teljesen leírjuk, azt kapjuk, hogy a szimmetriatengelynek a függőlegessel bezárt szöge periodikusan ingadozik a kezdeti és egy ettől kicsit eltérő érték között. Ezt az ingadozást nutációnak nevezzük. Az ingadozások annál kisebbek, így egyúttal annál gyorsabbak, minél nagyobb a pörgettyű kezdeti r_0 szögsebessége. A szimmetriatengely vízszintes vetülete pedig állandóan meghatározott irányban forog. A szimmetriatengely e mozgásának, a precesszióknak a szögsebessége periodikusan változik 0 és egy maximális érték között. A precesszió és a nutáció együttesen az ún. pseudoreguláris precessziót eredményezi: a szimmetriatengely végpontja az O rögzített pont köré írt gömbfelület két paralel köre között cikloisszerű görbét ír le.

- ↑ Tasnádi-Skrapits-Bérces: Mechanika I., 4, 8, 10. §
- ↑ Tasnádi-Skrapits-Bérces: Mechanika I., 12, 17, 18, 21, 29. §
- ↑ A δW jelölés arra utal, hogy kicsiny munkavégzésről beszélünk. Mivel a munka nem a vizsgált rendszerre jellemző mennyiség, ezért a megváltozásáról nem beszélhetünk, innen a megkülönböztetés.

Záróvizsga tematika

A klasszikus mechanika alapjai | A klasszikus mechanika elméleti tárgyalása | A relativitás elmélet alapjai | Egzaktnál megoldható fizika problémák | Folytonos közegek mechanikája | Fenomenológikus termodinamika | Elektro- és magnetosztatika, áramkörök | Elektrodinamika | Hullámeqyenlet és

Tételek

hullámoptika | Geometriai optika és alkalmazásai | A kvantumelmélet alapvető kísérletei | A kvantummechanika elméleti háttere | Atom- és molekulaszervezet | A magfizika alapjai | A termodinamika statisztikus alapozása | Kvantumstatisztikák | Kölcsönható rendszerek, mágneses anyagok | Kristályos anyagok fizikája | Nemeqyensúlyi folyamatok leírása | Az asztrofizika alapjai

A lap eredeti címe: „http://mafihe.hu/~wiki/wiki/index.php/A_klasszikus_mechanika_alapjai”

- A lap utolsó módosítása: 2009. augusztus 14., 16:47

A klasszikus mechanika elméleti tárgyalása

A TételWiki wikiből

Tartalomjegyzék

- 1 A mechanika elvei
- 2 A virtuális munka elve
- 3 d'Alembert elv és a Lagrange-féle elsőfajú egyenletek
- 4 A Gauss-féle legkisebb kényszer
- 5 Általános koordináták és a Lagrange-féle másodfajú mozgástörvény
- 6 Hamilton-féle variációs elv és az Euler-Lagrange egyenletek
- 7 Kanonikus egyenletek, Hamilton-függvény
- 8 Ciklikus koordináták, kanonikus transzformáció
- 9 Maupertuis-elv (*)
- 10 A Hamilton-Jacobi egyenlet
- 11 A Liouville-tétel(*)
- 12 Megmaradási tételek, mint szimmetriák következményei
 - 12.1 Impulzusmegmaradás
 - 12.2 Impulzusmomentum megmaradása
 - 12.3 Energiamegmaradás
 - 12.4 Noether-tétel(*)

A mechanika elvei

A klasszikus mechanika alapvető törvényeinek megfogalmazását Newton megtette. Azonban ugyanezek az elvek megfogalmazhatóak számos, a Newton-i axiómákkal ekvivalens, azonban matematikailag más alakban, ami sokszor szemléletesebb, illetve egyszerűbb tud lenni. Ezek a mechanika elvei, amelyek nem bizonyítható axiómák, ezek helyességét a tapasztalatok adják.

A virtuális munka elve

Vegyünk egy N anyagi pontból álló mechanikai rendszert, amelynek koordinátái x_i, y_i, z_i , a ható erőt pedig F_i jelöli. Legyen δr_i az i -edik anyagi pontnak a kényszerek által megengedett infinitesimalis és **virtuális** elmozdulása. Itt a virtuális alatt azt értjük, hogy nem tartozik ezen elmozdulásokhoz időtartam. A tárgyalt rendszer akkor lesz egyensúlyban, ha a ható erők virtuális munkája zérus:

$$\sum_{i=1}^N F_i \delta r_i = 0$$

Szabad mozgás esetén minden δr_i tetszőleges, tehát az erővektoroknak kell zérusnak lenniük. Ha van N pontunk, akkor azokhoz $3N$ darab koordináta tartozik, és ennél kevesebb kényszerfeltétel lehet adott, különben nincs mozgás. Itt most feltesszük, hogy a kényszereink egy felületre korlátozzák a rendszert, és ezért alakjuk így írható:

$$\phi(r_1, r_2, \dots, r_N) = 0$$

A kényszerfeltételek a virtuális elmozdulások alatt is kell, hogy teljesüljenek, ebből valamint egy infinitezimális elmozduláshoz tartozó Taylor-sorfejtésből belátható, hogy a kényszerfeltételek a következő általános alakba írhatóak:

$$\sum_{i=1}^N \text{grad}_i \phi_k \delta r_i = 0 \quad k = 1, \dots, s < 3N$$

Ezeket a Lagrange-multiplikátorok módszerével vehetjük figyelembe: egy ismeretlen λ_k szorzóval hozzáadjuk őket a virtuális munka egyenlethez:

$$\sum_{i=1}^N \left(F_i + \sum_{k=1}^s \lambda_k \text{grad}_i \phi_k \right) \delta r_i = 0$$

Most a szabad esettel szemben csak $(3N-s)$ darab együttható lesz zérus, de a többinél a Lagrange-multiplikátorokat választjuk úgy, hogy a maradék együtthatók is eltűnjenek. Ekkor úgy tekinthetjük, mintha a virtuális elmozdulások függetlenek lennének, ezért az egyenlőség teljesüléséhez az erők összegének kell zérusnak lennie, ezért:

23/209

$$\mathbf{F}_i + \sum_{k=1}^s \lambda_k \text{grad}_i \phi_k = 0$$

A második tagot elnevezhetjük kényszererőknek, és ekkor a az egyensúly feltétele, hogy a szabad és kényszererők összege zérus legyen. A λgrad -s definícióból az is látható, hogy felületen mozgásnál a kényszererő merőleges a felületre (mivel $\text{grad} \phi$ a felületi normális irányába mutat).

d'Alembert elv és a Lagrange-féle elsőfajú egyenletek

Jean le Rond d'Alembert a virtuális munka elvéhez hasonló kifejezést vezetett be, de az nem csak az egyensúlyt írja le, hanem egyben mozgástörvény is:

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

A mechanikai rendszer az elv értelmében úgy mozog, hogy a fenti kifejezés minden időpillanatban teljesül. Szabad rendszerre ez a Newton mozgásegyenletet adja, hiszen tetszőleges $\delta \mathbf{r}_i$ -re el kell tűnnie a zárójelnek, azaz $\mathbf{F}_i = \dot{\mathbf{p}}_i$. Ha kényszerek is jelen vannak, akkor ismételten a Lagrange-multiplikátoros átalakítást végezzük el:

$$\sum_{i=1}^N \left(\mathbf{F}_i + \sum_{k=1}^s \lambda_k \text{grad}_i \phi_k - \dot{\mathbf{p}}_i \right) \delta \mathbf{r}_i = 0$$

A virtuális munka elvéhez hasonlóan itt is formálisan függetlenként kezelhetők a megváltozások, így

$$\dot{\mathbf{p}}_i = \mathbf{F}_i + \sum_{k=1}^s \lambda_k \text{grad}_i \phi_k$$

Ha feltesszük, hogy a tömeg állandó, akkor $\dot{\mathbf{p}}_i = m_i \ddot{\mathbf{r}}_i$, tehát:

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{F}_i + \sum_{k=1}^s \lambda_k \text{grad}_i \phi_k$$

Ezt az egyenletet nevezzük a Lagrange-féle elsőfajú egyenleteknek (N darab van belőlük). Mivel ezek vektor egyenletek, így tulajdonképpen $3N$ darab egyenletünk van, és ezenkívül az s darab kényszeregyenlet. Ez éppen annyi, mint az ismeretlenek száma: $3N$ darab térkoordináta az idő függvényében, és az s darab multiplikátor.

A Gauss-féle legkisebb kényszer

Gauss bevezette a kényszer mértékét:

$$Z = \sum_{i=1}^{3N} \frac{1}{m_i} (m_i \ddot{x}_i - X_i)^2$$

Itt X_i szabaderő. A zárójelben tehát a szabad mozgástól való eltérés áll a kényszerek hatására. Gauss elve a következőt mondja: a kényszerek által megengedett gyorsulásváltozások közül a legkisebb valósul meg. Variációs módszerrel alakítható ez tovább, amikor csak a gyorsulást variáljuk. Holonom-szkleronom kényszerekre $\sum_{i=1}^{3N} \frac{\partial \phi_k}{\partial x_i} \delta x_i = 0$. Ez időderiválás után: $\sum_{i=1}^{3N} \frac{\partial \phi_k}{\partial x_i} \delta \ddot{x}_i = 0$. Ugyanakkor a kényszert is megvariáljuk:

$$2 \cdot \sum_{i=1}^{3N} (m_i \ddot{x}_i - X_i) \delta \ddot{x}_i = 0$$

Ehhez hozzáadva a szokásos módon Lagrange multiplikátorral a kényszereket:

$$\sum_{i=1}^{3N} \left(m_i \ddot{x}_i - X_i - \sum_{k=1}^s \lambda_k \frac{\partial \phi_k}{\partial x_i} \right) \delta \ddot{x}_i = 0$$

Ismét a megszokott módon a megválasztás független, illetve ahol nem, ott a Lagrange együtthatókat választjuk meg, tehát:

$$m_i \ddot{x}_i = X_i - \sum_{k=1}^s \lambda_k \frac{\partial \phi_k}{\partial x_i}$$

23/209

Általános koordináták és a Lagrange-féle másodfajú mozgástörvény

Az eddigi tárgyalásokban a kényszerek, mint független egyenletek voltak figyelembe véve. Ha azonban olyan koordinátákra térünk át, amelyek illeszkednek a kényszerekhez, akkor ezekben ezek a feltételek eltűnnek, így egyszerűbb alakot kapunk a mozgásegyenletekre. Az állítás az, hogy ilyen transzformációk léteznek, az ilyen áttéréssel kapott új koordinátákat általános koordinátáknak nevezzük, és q_k -val jelöljük, az általános sebességeket pedig \dot{q}_k -val. Itt kell megjegyezni, hogy ezek nem feltétlen hosszúság illetve sebesség dimenziójú változók.

A koordináta transzformációs függvények deriváltjaival és kis megváltozásaival átírható a d'Alembert-elv variációs módszerrel. Ha

bevezetjük a $Q_k = \sum_{i=1}^{3N} X_i \frac{\partial x_i}{\partial q_k}$ általánosított erőt, amely nem feltétlen erő dimenziójú, de a

$$\sum_i Q_i \delta q_i$$

munka dimenziójú. Továbbá bevezetjük a mozgásienergiát: $K = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3N} m_i \dot{x}_i^2$. Ezekkel átírva a d'Alembert-elv a következő alakú lesz:

$$\sum_{k=1}^f \left(\frac{d}{dt} \frac{\partial K}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial K}{\partial q_k} - Q_k \right) \delta q_k = 0$$

Itt f a szabadsági fokok száma (a $3N$ szabadság az s darab kényszerrel csökkentve). A tetszőleges variáció miatt:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial K}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial K}{\partial q_k} = Q_k, k = 1, \dots, f$$

Ezek a Lagrange-féle másodfajú mozgásegyenletek. Ha az erők konzervatívak, akkor felírhatók potenciál deriváltjaként, és ekkor minden K helyére $K-V$ írandó, amelyet elnevezhetünk Lagrange-függvénynek, így a képlet a jól ismert alakot ölti:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial L}{\partial q_k} = 0, k = 1, \dots, f$$

Ezek felhasználásával általános módszert adhatunk a mechanikai problémák megoldására: Ismerjük fel a rendszert jellemző általános koordinátákat, és írjuk fel a transzformációs függvényeket. Az így definiált általános koordinátákkal fejezzük ki a potenciált (V), az általános sebességekkel pedig a kinetikus energiát (K). Végül írjuk fel a Lagrange-függvényt ($L = K - V$), és belőle a Lagrange-féle másodfajú mozgásegyenleteket. Az így kapott mozgásegyenlet pedig elvileg megoldható.

Hamilton-féle variációs elv és az Euler-Lagrange egyenletek

A Hamilton által kimondott variációs elv, az eddigieken azért mutat túl, mert nem csupán a mechanikai problémák általános megfogalmazásában használható, hanem az optika és a kvantummechanika törvényeit is egyszerűen meg lehet általa fogalmazni. Konzervatív rendszerre az állítás a következő:

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L dt = \text{extrémum}$$

Itt S a hatás, L a Lagrange-függvény. Az állítás az, hogy ebből $q_k(t)$ meghatározható. A problémát variációs számítási módszerekkel lehet megoldani, amely egy funkcionált szélsőértékbe vevő függvényeket határozza meg. Ez pont az itteni probléma, hiszen a Lagrange az általánosított koordinátáktól, sebességektől és esetleg az időtől függ, és mi az általánosított koordinátákat keressük. A variációs módszerből adódó egyenlet a következők:

$$\frac{\partial L}{\partial q_k} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} = 0, k = 1, \dots, f$$

Ezek az Euler-Lagrange egyenletek.

Kanonikus egyenletek, Hamilton-függvény

Az eddig használt Lagrange leírásban másodrendű differenciálegyenletet kaptunk. Az úgynevezett kanonikus egyenletek azzal szemben elsőrendű differenciálegyenleteket szolgáltatnak, amelyek a másodrendűekkel egyenértékűek, azonban kétszer annyi van belőlük. Bevezetjük a kanonikusan konjugált impulzust:

$$p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}$$

És bevezetjük a Hamilton-függvényt:

$$H = \sum_{k=1}^f p_k \dot{q}_k - L$$

Az Euler-Lagrange egyenletek figyelembevételével, és a Hamilton-függvény teljes differenciájának felhasználásával kapjuk a kanonikus egyenleteket:

$$\dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k}$$

$$\dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k}$$

Továbbá:

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

Ha a rendszer konzervatív, és az általánosított koordinátákra való áttérés időfüggetlen, akkor a Hamilton-függvény a mechanikai energiát adja. Ennek a formalizmusnak kiemelkedő szerepe van a kvantummechanika és a kvantumtérelméletek tárgyalásánál.

Ciklikus koordináták, kanonikus transzformáció

Ha a Hamilton-függvény nem függ valamely koordinátától, akkor az ahhoz a koordináta-hoz tartozó konjugált impulzus állandó a kanonikus egyenletek miatt, és azonnal megoldást szolgáltat a mozgásegyenletre ($q_k(t) = \dot{q}_k \cdot t + c = \frac{\partial H}{\partial p_k} \cdot t + c$). Az ilyen tulajdonságú

koordinátát ciklikus koordinátának nevezzük. Értelemszerűen minél több ciklikus koordinátánk van, annál egyszerűbb megoldani az adott problémát. Ezért érdemes foglalkozni azokkal a transzformációkkal, amelyek változatlanul hagyják a kanonikus egyenleteket, de ciklikus koordinátákra térhetünk át segítségükkel. Ezek a transzformációk tehát olyan koordináták között visznek át, amelyek teljesítik a kanonikus egyenletet továbbá a variációs elvnek is eleget tesznek (a kanonikus egyenletek is abból származtathatóak). Ezek alapján belátható, hogy a variált funkcionálban van egy szabadságunk egy tetszőleges függvény időszerinti deriváltjának erejéig. Ezt a függvényt nevezzük alkotó függvénynek, mert segítségével kifejezhetőek a transzformációs szabályok. Az alapján, hogy az alkotó függvényt melyik két változóval fejezzük ki a régi és új koordináta, régi és új impulzus) közül, különböző összefüggéseket kapunk a koordináták és az alkotó függvény között, valamint megkapjuk a Hamilton-függvény transzformációját is.

Maupertuis-elv (*)

A Maupertuis-elv energiamegmaradó rendszerekre vonatkozik, vagyis a Lagrange-függvény nem függ explicit az időtől. Az elv kimondja, hogy a rendszer által megtett út olyan, hogy a rövidített hatás

$$S_0 = \int p dq = \min.$$

ahol az integrált a pályára vett vonalintegrálként kell érteni.

A Hamilton-Jacobi egyenlet

A mozgásegyenletek megoldhatóak egy szélsőséges transzformációval is, amennyiben a Hamilton-függvényt zérusra transzformáljuk. Ekkor mind a koordináták, mind az impulzusok deriváltjai nullával egyenlőek a kanonikus egyenletek értelmében. A Hamilton-függvényre vonatkozó transzformációs egyenlet az alkotófüggvénnyel kifejezve a következő:

$$\bar{H} = H + \frac{\partial W}{\partial t}$$

Mivel a végső Hamiltonnak zérust szeretnénk, ezzel a feltétellel egy speciális alkotófüggvényt definiálhatunk, amely a következő egyenletet elégíti ki:

$$0 = H + \frac{\partial S}{\partial t}$$

A Hamilton-függvény a koordináták, az impulzus és az idő függvénye lehet. Ezek közül az alkotó függvénnyel az impulzus is kifejezhető, ezért:

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

Ez a Hamilton-Jacobi egyenlet, és S a hatásfüggvény, amelyet már korábban bevezettünk a Hamilton-féle variációs elvnel. A Hamilton-Jacobi egyenlet abban különbözik az eddigiektől, hogy parciális differenciálegyenlet, ezért határfeltételek is kellenek hozzá, és nehezebb megoldani, ennek ellenére ha nem közvetlenül a mozgásegyenletet akarjuk megkapni, csak összefüggéseket a hatás és a koordináták között, akkor sokfelé jól használható.

A Liouville-tétel(*)

A Hamilton-i mechanikai rendszerekre kimondható a Liouville-tétel, ami azt fogalmazza meg, hogy nem-disszipatív rendszerre a fázistérfogat állandó marad. Ha ρ a fázistérbeli eloszlás függvény, és a rendszer d dimenziós:

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^d \left(\frac{\partial \rho}{\partial q^i} \dot{q}^i + \frac{\partial \rho}{\partial p^i} \dot{p}^i \right) = 0$$

Ez azért fontos egyenlet, mert nem csak egyensúlyi szituációkban használható, hanem sokrészesekés bonyolult dinamikai problémákra is, ezért alapvető fontosságú a statisztikus jelenségek tárgyalásában.

Megmaradási tételek, mint szimmetriák következményei

A közismert és a klasszikus mechanikában előbukkanó megmaradási tételek igen egyszerűen következnek a Hamilton-függvényes formalizmusból.

Impulzusmegmaradás

Az impulzusmegmaradás a tárgyalási koordináta-rendszer eltolásával szembeni invarianciából vezethető le. Ez tulajdonképpen a tér homogenitása: mindegy hogy hova tesszük a mechanikai rendszert, a Hamiltonja ugyanaz, és az események ugyanúgy zajlanak.

Impulzusmomentum megmaradása

Az impulzusmomentum megmaradása a koordináta-rendszer elforgatásával szembeni invarianciából vezethető le. Ez tulajdonképpen a tér izotrópiája: mindegy hogy hogyan forgatjuk el a mechanikai rendszert, a Hamiltonja ugyanaz, és az események ugyanúgy zajlanak.

Energiamegmaradás

Ez az időbeli eltolásból következik, azaz mindegy, hogy egy adott kísérletet mikor végzünk el, a lefolyása ugyanaz, a Hamiltonja ugyanaz.

Noether-tétel(*)

A Noether-tétel azt mondja, hogy a Lagrange-függvény szimmetriáihoz hogyan lehet megmaradó mennyiséget rendelni.

Állítás: Ha a Lagrange-függvénynek szimmetriája a:

$$\begin{aligned} q_i &\rightarrow q'_i = q_i + \epsilon f_i(q, \dot{q}) \\ \dot{q}_i &\rightarrow \dot{q}'_i = \dot{q}_i + \epsilon \dot{f}_i(q, \dot{q}) \end{aligned}$$

akkor a következő mennyiség megmaradó:

$$\sum \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} f_i$$

Bizonyítás:

$$L(q_i + \epsilon f_i, \dot{q}_i + \epsilon \dot{f}_i) - L(q_i, \dot{q}_i) = \sum \frac{\partial L}{\partial q_i} \epsilon f_i + \sum \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \epsilon \dot{f}_i = \sum \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \epsilon f_i + \sum \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \epsilon \dot{f}_i = \epsilon \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} f_i \right) = 0$$

Záróvizsga tematika

A klasszikus mechanika alapjai | **A klasszikus mechanika elméleti tárgyalása** | A relativitás elmélet alapjai | Egzaktnál megoldható fizika problémák | Folytonos közegek mechanikája | Fenomenológikus termodinamika | Elektro- és magnetosztatika, áramkörök | Elektrodinamika | Hullámegyenlet és hullámoptika | Geometriai optika és alkalmazásai | A kvantumelmélet alapvető kísérletei | A kvantummechanika elméleti háttere | Atom- és molekulaszervezet | A magfizika alapjai | A termodinamika statisztikus alapozása | Kvantumstatisztikák | Kölcsönható rendszerek, mágneses anyagok | Kristályos anyagok fizikája | Nemeqyensúlyi folyamatok leírása | Az asztrofizika alapjai

A lap eredeti címe: „http://mafihe.hu/~wiki/wiki/index.php/A_klasszikus_mechanika_elm%C3%A9leti_t%C3%A1rgyal%C3%A1sa”

- A lap utolsó módosítása: 2009. augusztus 14., 16:48

A relativitás elmélet alapjai

A TételWiki wikiből

Tartalomjegyzék

- 1 Vonatkoztatási rendszer
- 2 Galilei-transzformáció
- 3 A Lorentz-transzformáció
- 4 A Michelson-Morley kísérlet
- 5 A Lorentz transzformációk következményei
 - 5.1 Az inerciarendszerek relatív sebessége
 - 5.2 Sebességek összeadása
 - 5.3 Paradoxonok
- 6 Relativisztikus fizika
- 7 Az elektrodinamika relativisztikus formája (*)

Vonatkoztatási rendszer

Amikor egy test pozícióját, vagy pályáját akarjuk megadni, valamihez azt viszonyítanunk kell. Viszonyítási alapként felveszünk egy koordináta-rendszert (origó, és bázisvektorok, illetve a rendszer időfejlődése, pl.: mozgása, forgása) és ebben tárgyaljuk a mozgásokat. Vannak kitüntetett vonatkoztatási rendszerek, ezeket Newton első törvényével tüntetjük ki: ahol a tehetetlenségi axióma teljesül, azok inerciarendszerek. Különböző mozgású koordináta-rendszerekben fellépnek egyéb nemfizikai erők is, az inerciarendszerekben definícióból kifolyólag ilyenek nincsenek. A többi Newton-törvény is inerciarendszerekre érvényes.

Galilei-transzformáció

Newton második axiómája a mozgásokra vonatkozik, azonban az itt tárgyalt differenciálegyenletben van egy szabad konstans, amely a deriválások miatt kiesik, ezért erre invariáns a második axióma. Ez az invariancia a Galilei-transzformációban foglalható össze:

$$r' = r + vt$$

$$t' = t$$

Szavakban elmondva az egymáshoz képest egyenes vonalú egyenletes mozgást végző koordináta-rendszerekben a mechanikai jelenségek azonosan mennek végbe. Az egyes rendszerek között a Galilei-transzformációval térhetünk át.

A Lorentz-transzformáció

Amikor a XIX.-XX. század fordulóján a megpróbálták egységes képbe összehozni a mechanikát és az elektrodinamikát, egyre problémásabb lett az a felismerés, hogy a hullámenyilet nem invariáns a Galilei-transzformációra. Úgy tűnt, mintha az elektrodinamikában lenne kitüntetett koordináta-rendszer, szemben a mechanikával. A korabeliek három feloldását képzelték el a problémának, csökkenő valószínűség szerint:

- A Maxwell féle elmélet hibás, a valódi elmélet Galilei-invariáns.
- A mechanika Galilei-invariáns, az elektrodinamikában van kitüntetett koordináta-rendszer, amelyben a fény terjedését lehetővé tevő éter nyugszik.
- Létezik egy mind a mechanikára, mind az elektrodinamikára érvényes relativitási elv, ami nem a Galilei-féle, és ez egyben azt is jelenti, hogy a mechanika törvényeit kell megváltoztatni.

A Maxwell-féle leírást rengeteg kísérlet támasztotta alá, és minden jóslatát sikerült ellenőrizni. A második lehetőséget nem sikerült alátámasztani kísérletekkel, azonban egyre irreálisabb megszorításokat lehetett rá adni, amik végső soron tarthatatlanná tették az elméletet. Az új relativitási elmélet kidolgozását Einstein végezte el, két posztulátumra építve:

- A természet törvényei, és a kísérleti eredmények azonosak az egymástól csak egyenes vonalú egyenletes mozgásban különböző inerciarendszerekben.
- A fénysebessége véges, és forrásának mozgásától független.

Ha feltesszük, hogy a tér izotrop, továbbá az új transzformáció is csoportot alkot a Galileihez hasonlóan, és megengedjük, hogy az idő is transzformálódjon az áttéréskor (és nem szeretnénk véges sebességekből kiindulva végtelen sebességeket kapni a transzformációk és sebességösszeadások során), akkor a 2. posztulátumból és az izotrópiából következik az ívelemnégyzet állandósága ($ds^2 = dt^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2$), a többi feltételből pedig levezethető a Lorentz-transzformációk alakja (1+1 dimenzióban):

$$t' = \gamma \left(t - \frac{v}{c^2} x \right)$$

$$x' = \gamma (x - vt)$$

ahol $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$ a Lorentz-faktor.

A c konstans értékét a kísérletek adják meg, itt csak az derül ki, hogy határsebesség, mégpedig felső, az kísérleti tény, hogy ez egyezik a fénysebességgel.

A Michelson-Morley kísérlet

A relativitás elmélet kialakulása felé az egyik nagy lökést ez a kísérlet szolgáltatta azzal, hogy nem mutatta ki az éter hatását. Az elméletileg feltételezett éter a fény terjedésének közege lett volna. Ha ez igaz lenne, akkor a közeghez képest relatív mozgást végző megfigyelő másnak mérte a fénysebességet. A kísérletet ezért félév különbséggel megismételték, ekkor ugyanis a Föld éppen ellenkező irányban halad a feltételezett éterben, akármilyen mozgást is végez az. A kísérleti elrendezés egy fényforrásból állt, annak a fényét egy féligáteresztő tükörrel kettéosztották, majd az azonos utakon visszaverődő fénysugarakkal interferenciát hoztak létre. Ez az elrendezés ha az azonos utakon más a fénysebesség eltérést tesz láthatóvá az interferencia segítségével. Az elméletileg megjósolt eltérések a vizsgálati időpontokban nem jelentkeztek, ezért erőteljesen kétségesé vált az éter elmélet tarthatósága.

A Lorentz transzformációk következményei

A Lorentz-transzformációk képleteiből több a klasszikus gondolkodással szembenálló jelenség vezethető le. Ezekben felül hasznos, a különböző rendszerek közötti összefüggések is levezethetőek.

Az inerciarendszerek relatív sebessége

Ahogy korábban láttuk, a Lorentz-transzformációk is csoportot alkotnak. Belátható, hogy a transzformáció csak a sebességtől függ, ezért egyparaméteres a csoport, ekkor van úgynevezett kanonikus paramétere. Ez azt jelenti, hogy ha egymásután csoportelemeket haddatunk, akkor az eredő transzformáció előállítható az egyes elemek paramétereinek összegeként (analógiaként gondoljunk 2D-s forgatásokra: az eredő forgatási mátrix előállítható a részforgatások szögeinek összegeként). A Lorentz-transzformációk ezen paraméterét *rapiditásnak* nevezzük, ez tehát összeadódik. Definíciója: $\chi = \operatorname{arctanh} \frac{v}{c}$

Levezethető a transzformációs szabályokból, hogy bármely két inerciarendszer (amelyek között a χ paraméterű Lorentz-transzformáció visz át) relatív sebessége:

$$V = c \cdot \operatorname{th} \chi$$

amiből az is következik, hogy ez a sebesség nem lehet c -nél nagyobb. **VIGYÁZAT** Ez az egész csak 1 idő és 1 tér dimenzióban igaz, amikor is a tér-tengely egyirányú a sebességgel. Az általános eset bonyolult, azt érdemes megjegyezni, hogy két egymás utáni, de különböző irányú rendszerbe való átranzformáció (boost) eredője egy megfelelő irányú boost és egy *forogás*. Ennek ellenére a rapiditás paraméter az egyirányú boostok kezelésére igen alkalmas, például egy kísérletben a nyaláb és a labor rendszer közötti transzformációkra, amikor a lényeges mozgások egy irányba esnek.

Sebességek összeadása

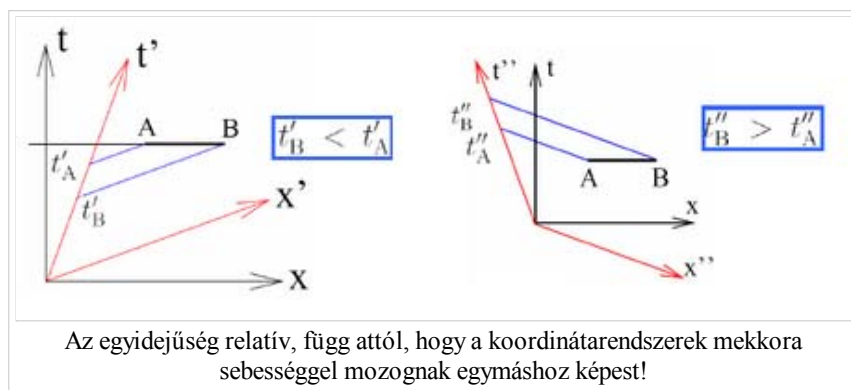
Az előző formulából a tangens-hiperbolikus szögösszeadási formuláját felhanszálva:

$$V_3 = \frac{V_1 + V_2}{1 + \frac{V_1 V_2}{c^2}}$$

Ennek kis sebességű ($v \ll c$) határesetét visszaadja a klasszikus $V_3 = V_1 + V_2$ formulát.

Paradoxonok

A paradoxonok az egyidejűség relativitására vezethetők vissza: ha egy koordinátarendszerben adott egy két esemény, akkor létezik olyan koordinátarendszer is, amelyekben ezek egyidejűek, illetve olyanok is, ahol az egyik, és olyanok is, ahol a másik történik hamarabb.



A legfontosabb paradoxonok a következők:

- Az álló megfigyelő a mozgó tárgyakat rövidebbnek látja: Lorentz-kontrakció
- Az álló megfigyelő a hozzáképest mozgó rendszerekben eltelő időt hosszabbnak látja: idődilatáció.
- Ikerparadoxon: két iker közül az egyik a Földön marad, a másik egy gyorsuló űrhajóban elmegy, majd visszajön a Földre. Ez utóbbi személy fiatalabbként ér vissza. A gyorsuló rendszerekben inerciarendszerváltás történik, ezekben a pillanatokban változik az egyidejűség is.

Relativisztikus fizika

A relativitáselméletben csak olyan mennyiségeket engedünk meg, amelyek invariánsak a Lorentz-transzformációra. Ez azt jelenti, hogy a klasszikusan ismert mennyiségeket valahogy át kell alakítani, hogy ne a Galilei-transzformációra legyenek invariánsak, hanem a Lorentzre. Az általános an levezethető 3+1 dimenziós Lorentz-transzformáció az ívelemnégyzetet változatlanul hagyja:

$$ds^2 = dt^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2$$

Ez úgy interpretálható, hogy a relativitáselméletben a tér és az idő együtt alkot egy kovariáns mennyiséget. Hasonlót láthattunk a klasszikus geometriában, az ottani transzformációk a térbeli távolságnégyzetet (skalárisszorzatot) tartották változatlanul, ezzel definiáltuk a vektorokat. Ezzel az analógiával élve vezetjük be itt is a vektorokat, melyeket megkülönböztetésképpen négyesvektornak nevezünk, a négyesvektorok skalárisszorzatát a Lorentz-transzformáció változatlanul hagyja. A klasszikus mennyiségekből tehát négyesvektorokat kell létrehozunk. Például:

31/209

$$k = \left(\frac{\omega}{c}, k_1, k_2, k_3 \right)$$

$$p = \left(\frac{E}{c}, p_1, p_2, p_3 \right)$$

Ez utóbbi különösen jelentős, hiszen ennek a hossznégyzete a részecske nyugalmi tömegével áll kapcsolatban:

$$p^2 = \frac{E^2}{c^2} - |p|^2 = m^2 c^2$$

Ebből az is következik, hogy ez minden rendszerben ugyanaz. Belátható, hogy az itt definiált négyesimpulzussal egybefoglalható az energia és az impulzusmegmaradás, mert a négyesimpulzus maga a megmaradó mennyiség a relativitáselméletben. Ezt átrendezve az E-p összeüggést kaphatjuk meg, ami diszperziós relációként is felfogható:

$$E = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2}$$

Ez pedig álló részecskére a híres:

$$E = mc^2$$

képletet adja. Nemrelativisztikus esetekben továbbra is visszakapjuk a klasszikus képleteket. A relativisztikus dinamika alaptörvényeként a Newton-törvény relativisztikus megfogalmazását vehetjük. A klasszikus $F = ma$ -val egyenértékű kis sebességekre az

$$F = \frac{d}{d\tau} p,$$

ez utóbbi azonban relativisztikusan is igaz, itt τ a részecske nyugalmi rendszerében mért idő (sajátidő), ami kis sebességekre a mindenkori idővel helyettesíthető. Fontos, hogy az időderiválás alól a tömeg nem emelhető ki, hiszen ez is függ a sebességtől, tehát sebességváltozáskor ez is változik.

A fenti energia kifejezésnek van még egy fontos következménye. Ha egy rendszer két állapota közötti átmenet energia kisugárzással, vagy elnyeléssel jár, akkor az a rendszer tömegét is megváltoztatja. Ennek legkésebb példája a periódusos rendszerben megfigyelhető moláristömegek értéke. A periódusos rendszerben szereplő magok mélyebb energiaszinten vannak, mint az alkotóik külön-külön összeadva, ezért a két állapot közötti különbség valamikor felszabadult, és ekkor tömeget is elvitt, tehát a periódusos rendszerbeli tömegek mindig kisebbek, mintha a protonok, és neutronok szabad tömegét adnánk össze. Ezt az effektust nevezik tömegdefektusnak.

Az elektrodinamika relativisztikus formája (*)

Az elektrodinamika már eleve egy relativisztikus diszciplína, így a Maxwell-egyenletek relativisztikus általánosára nincs szükség. Ez úgy fejezhető ki, hogy a Maxwell-egyenletek átírhatók szembeötlően kovariáns egyenletekké.

$$\operatorname{div} \vec{B} = 0$$

Következésképpen B felírható mint egy vektorpotenciál rotációja:

$$\vec{B} = \operatorname{rot} \vec{A}$$

Ha ezt behelyettesítjük az elektromos tér rotációját leíró egyenletbe, akkor a következőt kapjuk:

$$\operatorname{rot} \left(\vec{E} + \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right) = 0$$

így a zárójelben lévő kifejezés felírható, mint egy skalártér gradiense:

32/209

$$\vec{E} + \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = -\text{grad}\phi$$

Ez a ϕ skálár- és \vec{A} vektorpotenciálok szokásos definíciója. Könnyen belátható, hogy a potenciálok egyértelműen meghatározzák a térerősségeket, de ez fordítva nincs így. A potenciálok rögzítéséhez mértéket szokás előírni. Ezt a feltételt pedig érdemes úgy megadni, hogy maga is szembeötlően kovariáns legyen. Olyan megszorítást érdemes megtenni, hogy a skálár- és vektorpotenciálokból egy (ϕ, \vec{A}) négyesvektort lehessen csinálni.

Belátható, hogy a $j_\mu = (\rho, \vec{j})$ áramsűrűség egy négyesvektor. Ekkor az elektrodinamika kontinuitási egyenlete:

$$\partial^\mu j_\mu = 0$$

Most emlékezzünk vissza **Lorenz-mérték** definíciójára:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{A} = 0$$

és arra, hogy ezen mértékben a négyespotenciálokra a következő hullámegyenletek adódtak:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \phi &= \frac{\rho}{\epsilon_0} \\ \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \vec{A} &= \frac{\vec{j}}{\epsilon_0} \end{aligned}$$

Namost, mivel a jobboldal négyesvektor, és a d'Alembert operátor a koordinátarendszer megváltozásával nem változik, ezért az $A_\mu = (\phi, \vec{A})$ is négyesvektor. Négyesvektor jelölésben a hullámegyenlet:

$$\partial_\nu \partial^\nu A_\mu = \frac{j_\mu}{\epsilon_0}$$

Záróvizsga tematika

Tételek A klasszikus mechanika alapjai | A klasszikus mechanika elméleti tárgyalása | **A relativitás elmélet alapjai** | Egzaktul megoldható fizika problémák | Folytonos közegek mechanikája | Fenomenologikus termodinamika | Elektro- és magnetosztatika, áramkörök | Elektrodinamika | Hullámegyenlet és hullámoptika | Geometriai optika és alkalmazásai | A kvantumelmélet alapvető kísérletei | A kvantummechanika elméleti háttere | Atom- és molekulaszervezet | A magfizika alapjai | A termodinamika statisztikus alapozása | Kvantumstatisztikák | Kölcsonható rendszerek, mágneses anyagok | Kristályos anyagok fizikája | Nemegyensúlyi folyamatok leírása | Az asztrofizika alapjai

A lap eredeti címe: „http://mafihe.hu/~wiki/wiki/index.php/A_relativit%C3%A1s_elm%C3%A9let_alapjai”

- A lap utolsó módosítása: 2009. szeptember 12., 17:54

Egzaktul megoldható fizika problémák

A TételWiki wikiből

Tartalomjegyzék

- 1 Rezgések
 - 1.1 Harmonikus oszcillátor
 - 1.2 Csillapított és gerjesztett harmonikus oszcillátor
 - 1.3 Regések összetétele
 - 1.4 Csatolt rezgések
 - 1.5 Lineáris lánc
- 2 A Kepler-probléma
 - 2.1 A bolygók mozgása
 - 2.2 A Kepler-mozgások és a kúpszeletek kapcsolata
 - 2.3 Kozmikus sebességek
- 3 Kvantummechanikai problémák
 - 3.1 Potenciálvölgy
 - 3.2 Oszcillátor Sommerfeld-módszerrel
 - 3.3 Oszcillátor léptető operátorokkal
 - 3.4 Rotátor
 - 3.5 A Schrödinger-egyenlet megoldása Coulomb-potenciálban, H-atom
 - 3.6 Klasszikus határesetek

Rezgések

Harmonikus oszcillátor

Az egész kvantitatív fizika legalapvetőbb megoldható rendszere a harmonikus oszcillátor. Ez egy olyan tömegpont mozgása, amely $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$ alakú potenciálban végez csillapítatlan rezgőmozgást. Ekkor:

$$F(x) = -\frac{dV}{dx} = -kx$$

És a mozgásegyenlet:

$$F = m\ddot{x} = -kx$$

Az általános matematikai alak:

$$\ddot{x} = -\alpha x$$

Ennek megoldása:

$$x(t) = A\cos(\omega t + \phi)$$

A kezdőfeltételek határozzák meg A -t és ϕ -t, a körfrekvenciára:

$$\omega = \sqrt{\alpha}$$

Csillapított és gerjesztett harmonikus oszcillátor

A fenti probléma két további, bonyolított változata is egzaktul megoldható. Hozzáadhatunk az egyenlethez, egy sebességgel arányos csillapítást:

$$\ddot{x} = -\alpha x - \beta \dot{x}$$

Ekkor a megoldás:

$$x(t) = \exp \left[\frac{1}{2} \left(-\beta \pm \sqrt{\beta^2 - 4\alpha} \right) t \right],$$

Három elkülönülő régió van, a négyzetgyök alatti mennyiség előjele alapján:

- Ha negatív: alulcsillapított, létrejön oszcilláció, ami lecseng,
- Ha nulla: kritikusan csillapított, egy félhullám lehet az egyensúly felé tartásban, de nincs nullátmenet,
- Ha pozitív: túlcsillapított: a kitérés mindig az egyensúlyi helyzet felé húz, hullámok nélkül.

A fenti differenciál-egyenlethez állandó periodikus gerjesztőerőt is hozzáadhatunk:

$$\ddot{x} = -\alpha x - \beta \dot{x} + F(\omega_D)$$

Az előbb részletezett három régió most is ugyanaz, a kezdeti állapotból a rendszer a csak csillapítottnál megfigyelhető relaxációval kerül be a gerjesztési amplitúdó és frekvencia által megszabott oszcillációhoz. Az explicit megoldásokat lásd itt (<http://mathworld.wolfram.com/DampedSimpleHarmonicMotion.html>).

Regések összetétele

Egyszerű trigonometriával belátható, hogy azonos frekvenciájú, de tetszőleges amplitúdójú és fázisú harmonikus rezgőmozgások eredője is harmonikus rezgőmozgás, ugyanazzal a frekvenciával. Az amplitúdóra az összegzés eredménye:

$$A^2 = A_1^2 + A_2^2 + 2A_1A_2\cos(\phi_1 - \phi_2)$$

és a fázisszögre:

$$\operatorname{tg}\delta = \frac{A_1\sin\phi_1 + A_2\sin\phi_2}{A_1\cos\phi_1 + A_2\cos\phi_2}$$

Ezek a formulák tetszőleges számú, azonos frekvenciájú harmonikus rezgés összeadására általánosíthatóak.

Két eltérő frekvenciájú, de azonos amplitúdójú és fázisú rezgés összetételének eredménye pedig:

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

Az eredő amplitúdó pedig:

$$A_E(t) = 2A\cos\left(\frac{\omega_1 - \omega_2}{2}t\right)$$

Az eredő amplitúdó időbeli harmonikus változása a lebegés jelensége.

Csatolt rezgések

Csatolt rezgésről akkor beszélünk, hogyha a testeket nem csak az egyensúlyihelyzetükhöz, hanem egymáshoz is harmonikus erő köti. A mozgásegyenletek ekkor:

$$\begin{aligned} m_1\ddot{x}_1 &= -D_1x_1 + k(x_2 - x_1) \\ m_2\ddot{x}_2 &= -D_2x_2 - k(x_2 - x_1) \end{aligned}$$

Megfelelő változócserevel a csatolás kitranszformálható, és két független harmonikus rezgőmozgást kapunk eredményül. Ezek összege és különbsége adja a helyfüggvényeket. Az itt megjelenő frekvenciákat *normálfrekvenciáknak* nevezzük. Ha megvizsgáljuk az energiaviszonyokat, akkor azt tapasztaljuk, hogy a két test harmonikus energiáján ($E = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}Dx^2$) kívül fellép egy csatolási energia is:

$$E_{csat} = \frac{1}{2}k(x_2 - x_1)^2$$

A teljes energiamegmaradás ennek a három energiának az összegére érvényes. Az időfejlődés során periodikusan változik az egyik és a másik test rezgési amplitudója, szemléletesen az energia oda-vissza vándorol a két test között.

Lineáris lánc

Tekintsünk egy N tömepontból álló sorozatot, amelyet ideális rugók kötnek össze. Tekintsünk el a külső erőterétől. Ekkor az egyes mozgásegyenletek a következő alakúak:

$$\begin{aligned} m_1 \ddot{x}_1 &= k_{12}(x_2 - x_1) \\ m_2 \ddot{x}_2 &= -k_{12}(x_2 - x_1) + k_{23}(x_3 - x_2) \\ &\vdots \\ m_{N-1} \ddot{x}_{N-1} &= -k_{N-2,N-1}(x_{N-1} - x_{N-2}) + k_{N-1,N}(x_N - x_{N-1}) \\ m_N \ddot{x}_N &= -k_{N-1,N}(x_N - x_{N-1}) \end{aligned}$$

Osszuk át a tömegek *négyzetgyökével* és vezessük be a következő jelölést: $y_i = x_i \cdot \sqrt{m_i}$. Az egyszerűség kedvéért, csak szemléltetésül az egyik középső egyenlet így alakul:

$$\ddot{y}_i = -\frac{k_{i-1,i}}{\sqrt{m_i}} \left(\frac{y_i}{\sqrt{m_i}} - \frac{y_{i-1}}{\sqrt{m_{i-1}}} \right) + \frac{k_{i,i+1}}{\sqrt{m_i}} \left(\frac{y_{i+1}}{\sqrt{m_{i+1}}} - \frac{y_i}{\sqrt{m_i}} \right)$$

Az így kapott egyenletrendszer sokkal áttekinthetőbb, ha mátrixos alakba írjuk.

$$\ddot{\mathbf{Y}} = \mathbf{M}\mathbf{Y}$$

Az itt bevezetett \mathbf{M} mátrix tartalmazza a tömegekből, és rugóállandókból adódó konstansokat. A fenti változócsere azért volt szükség, hogy ez a mátrix szimmetrikus legyen, így a sajátértékei valósak. Ez pedig azért jó, mert ekkor a sajátértékprobléma megoldásával megkapott sajátértékek a normálfrekvenciák négyzeteit adják, a sajátvektorok pedig a rezgési módusokat (azaz, hogy az egyes pontok mekkora amplitúdóval, milyen irányba rezegnek). A mátrixnak mindig lesz egy 0 sajátértéke, ez a translációt írja le. Az általános megoldás most is az egyes meghatározott frekvenciák és amplitúdók által definiált harmonikus rezgőmozgások eredője, amiben a szabad paramétereket (összesen $2N$ darab) a kezdőfeltételek szabják meg.

A Kepler-probléma

A Kepler-probléma a Newtoni-gravitációs erőtvény hatására mozgó test mozgásegyenletének vizsgálata. Ez tulajdonképpen egy centrális erőterben történő mozgás, azonban kitüntetett jelentősége volt a csillagászat fejlődésében, hiszen jó közelítéssel írja le a Bolygók mozgását a Nap körül.

A bolygók mozgása

Adott a Newton-i gravitációs erőtvény, itt most vektoros alakban felírva:

$$\mathbf{F} = -\gamma \frac{mM}{r^2} \frac{\mathbf{r}}{r}$$

itt m az adott bolygó, M a Nap tömege. Ez az erő centrális, azaz a tekintett testek középpontján keresztül hat. Ebből következik, hogy a mozgás síkmozgás, amihez tartozik egy megmaradó mennyiség, az impulzusmomentum:

$$\frac{36}{209}$$

$$r^2 \omega = \lambda$$

A mozgásegyenleteket polárkoordinátákban felírva a gyorsulás radiális egyenlete:

$$m\ddot{r} - mr\dot{\phi}^2 = -\gamma \frac{mM}{r^2}$$

És a síkszöghez tartozó egyenlet:

$$m\ddot{\phi} = m \frac{1}{r} \frac{d}{dt}(r^2 \dot{\phi}) = 0$$

hiszen az erőnek nincs ilyen irányú komponense. Ezt az egyenletet az impulzusmomentum állandósága megoldja, tehát csak az első egyenlet megoldása marad hátra. Ennek érdekében az idő szerinti deriváltakat átírjuk szögszerinti deriváltakra, azaz áttértünk a szögre, mint paraméterre. Az eredményül kapható differenciál-egyenlet:

$$\frac{d^2}{d\phi^2} \left(\frac{1}{r} - \frac{\gamma M}{\lambda^2} \right) = - \left(\frac{1}{r} - \frac{\gamma M}{\lambda^2} \right)$$

ami nem más, mint egy harmonikus oszcillátor egyenlete. Ennek ismert a megoldása, amelyből a sugár kifejezhető:

$$r(\phi) = \frac{\lambda^2}{\gamma M} \frac{1}{1 + \frac{A\lambda^2}{\gamma M} \cos(\phi + \alpha)}$$

A koszinuszos tag szorzófaktor a az excentricitás, a külső tört szorzófaktor a pálya paramétere. A kapott egyenlet egy kúpszelet egyenlete.

A Kepler-mozgások és a kúpszeletek kapcsolata

Az előzőekben bemutattuk, hogy a Kepler-probléma kúpszelet egyenletre vezet, amelyek általános alakja:

$$r(\phi) = \frac{p}{1 + \epsilon \cos(\phi + \alpha)}$$

Ekkor három alapvetően különböző mozgás jöhet létre, amelyeket az excentricitás különböztet meg:

- $\epsilon < 1$: Ellipszis (speciálisan, 0 esetén kör),
- $\epsilon = 1$: Parabola,
- $\epsilon > 1$: Hiperbola.

Ezek kifejezhetőek az energiával is:

- $E < 0$: Ellipszis,
- $E = 0$: Parabola,
- $E > 0$: Hiperbola.

Kozmikus sebességek

A fenti energiák fontosak az űrkutatásban. Ha a Földről indítunk egy testet, akkor a legkisebb energiájú stabil pálya a valamely ellipszis pálya elérése. Első kozmikus sebességnek nevezzük a föld sugarával egyező körpálya eléréséhez szükséges sebességet, ez kb. 7,9 km/s. A második kozmikus sebesség a Föld gravitációs terének elhagyása, azaz a fenti esetek közül a parabolikushoz tartozó sebesség, ez kb.: 11,2 km/s. A harmadik kozmikus sebesség az előző, de a Napra viszonyítva, azaz ebben az esetben a naprendszer elhagyásáról beszélünk. Ez megközelítőleg 42,1 km/s.

Kvantummechanikai problémák

Potenciálvölgy

Oscillátor Sommerfeld-módszerrel

A lineáris harmonikus oszcillátor energia operátora:

$$\mathbf{E} = \frac{\mathbf{P}^2}{2\mu} + \frac{\omega^2\mu}{2}\mathbf{x}^2.$$

Az \mathbf{x} operátor helyére az x szerinti szorzást, a \mathbf{P} helyére pedig a $\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ -t írva a sajátérték-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{\omega^2\mu}{2}x^2\psi = E\psi, \text{ ebből:}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2}\mu\omega^2x^2 \right) \psi = 0.$$

Bevezetve a $k = \frac{2E}{\hbar\omega}$ jelölést és x -ről áttérve a $\xi = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}x$ változóra az egyenlet a következőképpen néz ki:

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + (k - \xi^2)\psi = 0.$$

Az egyenlet aszimptotikus alakja: $\frac{d^2\psi}{d\xi^2} - \xi^2\psi = 0$. Ennek megoldása: $\psi_a = e^{-\xi^2/2}$. Az eredeti egyenlet megoldását a Sommerfeld-féle polinom-módszer segítségével szeretnénk megkapni, ezért a pontos megoldást $\psi = e^{-\xi^2/2}v(\xi)$ alakban keressük. Ezt beírva a differenciálegyenletbe kapjuk:

$$\frac{d^2v}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dv}{d\xi} + (k - 1)v = 0.$$

$v(\xi) = \sum_{r=0}^n c_r \xi^r$ alakban felírva képezzük $v(\xi)$ első és második deriváltját:

$$\frac{dv}{d\xi} = \sum_r r c_r \xi^{r-1},$$

$$\frac{d^2v}{d\xi^2} = \sum_r r(r-1)c_r \xi^{r-2}.$$

Ezt beírva v differenciálegyenletébe: $\sum_r \left((r+2)(r+1)c_{r+2} - (2r+1-k)c_r \right) \xi^r = 0$.

Ez akkor igaz, ha ξ minden hatványának együtthatója 0. Így egy rekurzív összefüggést kapunk a c_r együtthatók között:

$$c_{r+2} = \frac{2r+1-k}{(r+2)(r+1)} c_r.$$

Belátható, hogy $r = n$ fokszámtól kezdve az összes együtthatónak azonosan 0-nak kell lennie, ezért $2n+1 = k$. Az E és k közötti összefüggés alapján így az energia sajátértékek: $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) = h\nu \left(n + \frac{1}{2} \right)$.

Az egyes energia sajátértékekhez tartozó sajátfüggvények: $\psi_n = e^{-\xi^2/2} v_n(\xi)$, ahol $v_n(\xi) = H_n(\xi)$ ún. Hermite-polinom.

Oscillátor léptető operátorokkal

A harmonikus oszcillátor Hamilton-operátora némi alakítgatás után:

$$\mathbf{H} = \hbar\omega \frac{m\omega}{2\hbar} \left(x^2 + \frac{1}{m^2\omega^2} + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{i}{m\omega} p \right) \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{i}{m\omega} p \right) + \frac{1}{2} \right)$$

A léptetőoperátorok:

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{i}{m\omega} p \right)$$

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{i}{m\omega} p \right)$$

ezek természetesen egymás adjungáltjai. A felcserélési reláció:

$$[a, a^\dagger] = 1$$

Legyen $a^\dagger a = N$ a részecskeszám-operátor. Koncentráljunk ennek a sajátállapotaira:

$$N|n\rangle = n|n\rangle$$

Könnyen megmutatható, hogy ha $|n\rangle$ sajátállapota N-nek, akkor $a|n\rangle$ és $a^\dagger|n\rangle$ is:

$$Na|n\rangle = (n-1)a|n\rangle$$

$$Na^\dagger|n\rangle = (n+1)a^\dagger|n\rangle$$

az így kapott sajátállapotok nem normáltak. Mivel $a|n\rangle$ normája n , ezért a normált állapotok:

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$$

és hasonlóan:

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$$

Tehát elindulva egy n sajátértékről, az a eltüntető operátor $n-1, n-2, \dots$ sajátértékkel generál új N sajátállapotokat. Ezek sorozata viszont nem mehet negatívba, hiszen az N sajátértéke egyben a $|a|n\rangle$ normája ami nem negatív. Ez csak úgy lehet, ha n egész értékéről indulunk, majd elérünk $n=0$ -hoz és akkor:

$$a|0\rangle = 0$$

Ebből az egyenletből rögtön adódik az alapállapot hullámfüggvénye, a keltő operátor alkalmazással pedig a gerjesztett állapotok hullámfüggvényei. A spektrum is azonnal leolvasható.

Rotátor

A forgó mozgást végző tömegpontot rotátornak nevezzük. Szabadon forgó tömegpont energia sajátérték egyenlete:

$$-\frac{\hbar}{2\mu} \Delta \psi = E \psi. \text{ A problémához leginkább a térbeli polárkoordináta-rendszer illeszkedik, ugyanis a forgás}$$

centrumától mért r távolság állandó.

A Laplace-operátor polárkoordináta rendszerben:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \cot(\vartheta) \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{(\sin(\vartheta))^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right).$$

$r = \text{állandó}$, ezért $\psi = \psi(\vartheta, \varphi)$ csak a szögektől függ:

39/209

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

Legyen $\mu r^2 = \Theta$ (a tehetetlenségi nyomaték a forgás centrumára vonatkozóan). Az egyenlet a következő alakra módosul:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta^2} + \cot \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} + \frac{1}{(\sin(\vartheta))^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2\Theta}{\hbar^2} E \psi = 0.$$

$\psi(\vartheta, \varphi) = F(\vartheta)G(\varphi)$ alakban keresve a megoldást:

$$F''G + \cot(\vartheta)F'G + \frac{1}{(\sin(\vartheta))^2}FG'' + \frac{2\Theta}{\hbar^2}EFG = 0.$$

$$\text{Átalakítva: } \frac{F''}{F}(\sin(\vartheta))^2 + \cos(\vartheta)\sin(\vartheta)\frac{F'}{F} + \frac{2\Theta}{\hbar^2}E(\sin(\vartheta))^2 + \frac{G''}{G} = 0.$$

A ϑ -tól és a φ -tól függő részek külön-külön állandók kell, hogy legyenek:

$$\frac{G'}{G} = -m^2, \text{ azaz } G = e^{im\varphi}.$$

Az azimutszöget 2π -vel növelve ugyanabba a pontba jutunk vissza, ezért meg kell követelnünk, hogy $e^{im2\pi} = 1$ legyen.

Az F -et meghatározó egyenletnél érdemes a $\xi = \cos(\vartheta)$ változóra áttérni, így az eredeti egyenletet $F / (1 - \xi^2)$ -tel megszorozva ($(1 - \xi^2) \neq 0$) kapjuk:

$$(1 - \xi^2) \frac{\partial^2 F}{\partial \xi^2} - 2\xi \frac{\partial F}{\partial \xi} + \left(\frac{2\Theta}{\hbar^2} E - \frac{m^2}{(1 - \xi^2)} \right) F = 0.$$

A $\xi = 1$ -ben a differenciálegyenletnek szingularitása van, hogy a megoldás itt is véges legyen, ezért $F(\xi) = (1 - \xi^2)^{\frac{|m|}{2}} v(\xi)$. Ezt visszaírva és a kapott egyenlet megoldását a polinom-módszer alapján

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

alakban keresve kapjuk:

$$\sum_r \left((r+2)(r+1)c_{r+2} - \left[(r+|m|)(r+|m|+1) - \frac{2\Theta E}{\hbar^2} \right] c_r \right) \xi^r = 0.$$

Ez alapján a c_r együtthatókra egy rekurziós képletet kapunk: $c_{r+2} = \frac{(r+|m|)(r+|m|+1) - \frac{2\Theta E}{\hbar^2}}{(r+2)(r+1)} c_r$.

Ahhoz, hogy a sajátfüggvény reguláris legyen egy bizonyos fokszámú együtthatótól kezdve az összes értéke azonosan 0 kell hogy legyen. A lehetséges energia-sajátértékek így: $E_l = \frac{\hbar^2}{2\Theta} l(l+1)$, ahol $k + |m| \geq 0$ -t jelöltük l -el ($l = 0, 1, 2, \dots$).

A differenciálegyenletet kielégítő polinom neve módosított Legendre-polinom, amit P_l^m szimbólummal jelölünk. A forgó mozgást végző tömegpont sajátfüggvényei tehát: $\psi_{l,m} = (\sin(\vartheta))^{|m|} P_l^m(\cos(\vartheta)) e^{im\varphi}$.

39/209

A Schrödinger-egyenlet megoldása Coulomb-potenciálban, H-atom

A szögfüggő tagok leválasztása után:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) R_l(r) = E \cdot R_l(r)$$

Bevezetve $u = rR$ -t:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} u''(r) + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - E \right) u(r) = 0$$

Ezek után dimenziótlanítunk. Legyen $\rho = r/r_B$ és $\epsilon = E/Ry$, ahol a Bohr-sugár $r_B = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{M_e e^2}$ és a Rydberg-

állandó $Ry = \frac{e^4 M_e}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2}$. Ekkor:

$$-\frac{d^2 u}{d\rho^2} + \left(\frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{2}{\rho} - \epsilon \right) u = 0$$

A szükséges határfeltételek:

- $\rho \rightarrow \infty$ -ben $u=0$.
- $\rho \rightarrow 0$ -ban?

Ha $\rho \rightarrow a \neq 0$ akkor $R \propto \rho^{-1}$, erre hivatva a Laplace operátort az origóban Dirac-deltát kapunk, vagyis nem elégítjük ki a Schrödinger-egyenletet. Ezért itt is $u=0$ lesz a határfeltétel.

Az egyenlet megoldási módszere **Sommerfeld féle polinom módszer**:

- Megoldjuk az egyenletet aszimptotikusan.

Az aszimptotikus megoldás $\rho \rightarrow \infty$ -ben $e^{\pm\alpha\rho}$ ahol $\alpha = \sqrt{|\epsilon|}$. A norma miatt csak a negatív előjel jó.

- A megoldást $f(r) \cdot \psi_a(r)$ alakban keressük, ahol $f(r) = \sum a_n r^n$ hatványsor. Az $f(r)$ eredeti egyenletbe való visszahelyettesítése után kapunk egy rekurziót az a_n -ekre.
- A rekurzió megoldása elrontja az aszimptotikát, az egyetlen megoldás, ha a hatványsorunk véges, vagyis valamilyen n -re $a_n = 0$. Ebből a feltételből közvetlenül kapjuk az energiaszinteket. Az együtthatók kiszámolásával pedig a sajátfüggvényeket.

Az energiaszintek:

$$\epsilon = -\frac{1}{n^2}$$

Minden energiaszint $\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$ -szeresen degenerált.

Klasszikus határesetek

Záróvizsga tematika

A klasszikus mechanika alapjai | A klasszikus mechanika elméleti tárgyalása | A relativitás elmélet alapjai
Tételek | **Egzaktnál megoldható fizika problémák** | Folytonos közegek mechanikája | Fenomenologikus termodinamika | Elektro- és magnetostatika, áramkörök | Elektrodinamika | Hullámegyenlet és

41/209

hullámoptika | Geometriai optika és alkalmazásai | A kvantumelmélet alapvető kísérletei | A kvantummechanika elméleti háttere | Atom- és molekulaszervezet | A magfizika alapjai | A termodinamika statisztikus alapozása | Kvantumstatisztikák | Kölcsonható rendszerek, mágneses anyagok | Kristályos anyagok fizikája | Nemegyensúlyi folyamatok leírása | Az asztrofizika alapjai

A lap eredeti címe: „http://mafihe.hu/~wiki/wiki/index.php/Egzaktul_megoldhat%C3%B3_fizika_probl%C3%A9m%C3%A1k”

- A lap utolsó módosítása: 2009. augusztus 14., 16:51

Folytonos közegek mechanikája

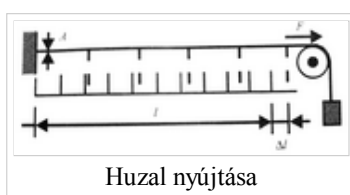
A TételWiki wikiből

Tartalomjegyzék

- 1 Rugalmas és képlékeny alakváltozások
 - 1.1 Nyújtás
 - 1.2 Térfogati összenyomás
 - 1.3 Nyírás
 - 1.4 Csavarás
 - 1.5 Hajlítás
- 2 Feszültség- és deformációs tenzor
 - 2.1 Feszültség tenzor felírása
 - 2.2 Deformációs tenzor felírása
 - 2.3 Általános Hooke-féle törvény
 - 2.4 A kompresszibilitás és a hangsebesség
- 3 Hullámterjedés deformálható testekben, Doppler-effektus. ^[2]
 - 3.1 Transzverzális hullámok terjedési sebessége:
 - 3.2 Hullámfüggvény
 - 3.3 Hullám-tulajdonságok
 - 3.4 Doppler-effektus
- 4 Folyadékok tulajdonságai
 - 4.1 Hidrosztatika
 - 4.2 Felhajtóerő
 - 4.3 A testek úszása és annak stabilitása
 - 4.4 Felületi feszültség
 - 4.5 Torricelli-kísérlet
- 5 Áramlások
 - 5.1 Lagrange-féle leírás
 - 5.2 Euler-féle leírás
 - 5.3 Tökéletes folyadék áramlása
 - 5.4 A Bernoulli-egyenlet
 - 5.5 Viskózus folyadék áramlása
 - 5.6 Turbulencia
 - 5.7 Áramlások hasonlósága
 - 5.8 Örvények
 - 5.9 A Navier-Stokes-egyenlet(*)

Rugalmas és képlékeny alakváltozások

Nyújtás



Ha egy homogén, A keresztmetszetű, l hosszúságú huzalt terhelünk megfelelően (nem túl) kicsi F erővel, akkor a megnyúlásra a következő arányosság (illetve egyenlőség) fog teljesülni:

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

ahol E a Young-modulus [nyomás dimenziójú]. Ez utóbbi nem más, mint a nyúlásra vonatkozó *Hooke-törvény*.

Bevezetve a relatív hosszváltozást $\left(\varepsilon = \frac{\Delta l}{l}\right)$ és a (mechanikai) feszültséget $\left(\sigma = \frac{F}{A}\right)$, a Hooke-törvény a következőképp alakul:

$$\sigma = E\varepsilon$$

Ez az összefüggés már lokális törvény (tetszőleges keresztmetszetre igaz). Mivel ε teljes hosszon egyenletes, ezért homogén deformációról beszélünk. Ellenkező esetben inhomogén deformációról van szó (pl.: saját súlyával terhelt rúd megnyúlása).

Munka és energiasűrűség nyújtás közben:

Ha Δl -lel megnyújtunk egy l hosszúságú rudat, akkor nyújtás közben x megnyújtásnál $F(x) = \frac{EA}{l}x$ erő ébred a rúdban. Így a lineárisan növekvő erő összes munkája (összevetve a rugóerővel):

$$E_r = W = \int_0^{\Delta l} F(x)dx = \frac{EA}{l} \int_0^{\Delta l} xdx = D \left[\frac{x^2}{2} \right]_0^{\Delta l} = \frac{1}{2} D (\Delta l)^2,$$

ahol D a húzal direkciós állandója. Mivel homogén deformációról van szó, ezért alkalmazhatjuk a következő felírást az **energia sűrűsége**:

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

Nyújtást kísérő harántösszehúzódás:

Kísérletek alapján nyújtás során a harántmérték relatív változása $\left(\frac{\Delta d}{d}\right)$ egyenesen arányos a hossz méret relatív változásával $\left(\frac{\Delta l}{l}\right)$:

$$\frac{\Delta d}{d} = -\mu \frac{\Delta l}{l} \text{ és } \mu \geq 0,$$

ahol μ a **Poisson-szám**. Tehát nyújtáskor harántösszehúzódás, összenyomáskor haránt irányú méretnövekedés lesz. Ennek következtében a rúd térfogata megváltozhat. Tapasztalat szerint az anyagok térfogata nyújtáskor általában nem csökken, tehát

$$0 \leq \mu \leq \frac{1}{2}$$

Speciális anyagú testek térfogata nőhet is, ekkor a Poisson-szám negatív.

Térfogati összenyomás

A test felületén egységesen eloszló térfogati összenyomást úgy valósíthatunk meg, ha például folyadékba tesszük, és úgy fejtünk ki a rendszerre nyomást:

Tapasztalat szerint a térfogat csökkenés arányos a test térfogatával és a testre gyakorolt nyomással/nyomás változással:

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

ahonnan:

$$\kappa = -\frac{1}{V} \left(\frac{\Delta V}{\Delta p} \right)$$

az anyag kompresszibilitása. Ez utóbbi megadja, mekkora a relatív térfogat csökkenés egységyi nyomásnövekedés hatására. Ez összefüggésben van a fentebb bevezetett Young és Poisson számokkal:

$$\kappa = \frac{E}{3(1 - 2\mu)}$$

Nyírás

Ha egy rugalmas hasábra lapjával párhuzamosan erőt fejtünk ki, akkor a hasáb egy bizonyos γ szöggel fog deformálódni. Ez a nyírás, és a szög (tapasztalatok szerint) megfelelően kis erő esetén arányos az erővel és fordítottan arányos a lap területével. Továbbá függ az anyagi minőségtől:

$\gamma = \frac{1}{G} \frac{F}{A}$, ahol G az anyagi minőségtől függő nyírási modulus. Ha ez nagy érték, akkor az anyag erősen ellenálló a nyíró erőknek.

Mindent úgy értelmezhetjük, hogy külső F erő hatására az erővel párhuzamos rétegek elcsúsznak egymáson, így ennek megfelelően visszahúzó τ nyírófeszültség ébred. Az ebből származó erő kiegyenlíti a külső erőt:

$$\tau A = F, \text{ azaz } \tau = G\gamma.$$

γ -t kifejezve a Hooke-törvénnyel analóg kifejezést kapunk. Mindkét egyenletnek a lényege, hogy a deformáció arányos a feszültséggel. A nyújtáshoz hasonlóan itt is bevezethető (és hasonlóan számolható is) a munka (W) valamint az energiasűrűség (u).

Csavarás

Az ábrákon látható módon deformáljuk a hengert, és a megértés érdekében felbontjuk koncentrikus hengerekre/csövekre (2. ábra).

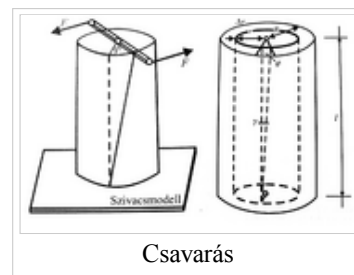
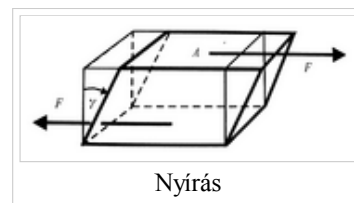
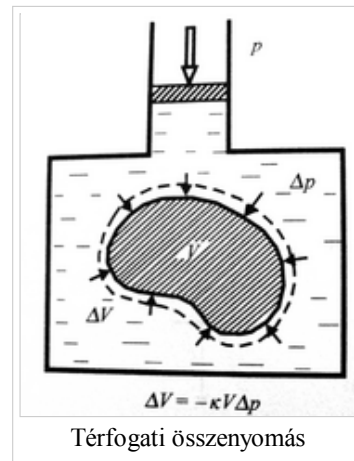
Az r és r + Δr falvastagságú hengerek a csavarás során nyíródnak egymáson. (Tehát az eredetileg hasáb formájú palást paralelepipedonná torzul.) Így a deformációt leíró két szög között az összefüggés:

$$r\varphi = l\gamma$$

Tehát γ és így vele a deformáció mértéke is r-rel arányos. A fentiekből:

$$\gamma = \frac{\tau}{G} = \frac{1}{G} \frac{\Delta F}{\Delta A} = \frac{1}{G} \frac{\Delta F}{2\pi r \Delta r} \frac{r}{r} = \frac{1}{G} \frac{\Delta M}{2\pi r^2 \Delta r}, \text{ ahol } \Delta M \text{ az erőnyomaték.}$$

A nyomatékokat kiszámítva (integrálva) a teljes hengerre, megadható az elcsavarodás szöge (φ), amiből azt kapjuk, hogy az elfordulás szöge egyenesen arányos a szabad végen ható forgatónyomatékkal és fordítottan arányos a sugár negyedik hatványával. Ez utóbbi tulajdonság miatt széleskörben alkalmaznak torziós mérlegeket.

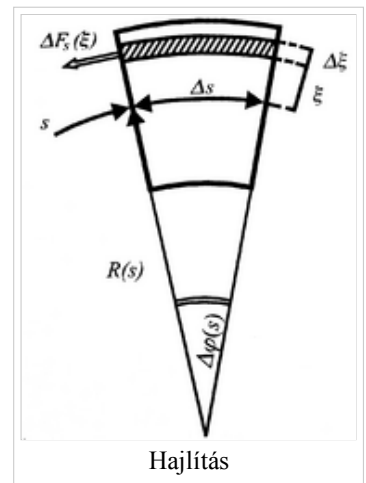
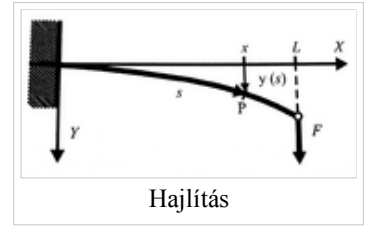
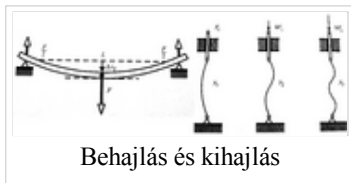


Hajlítás

Rugalmas rúd hajlítása esetén a keresztmetszeti lapok mozdulnak el egymáshoz képest. Az egyes rúddarabok úgy deformálódnak, hogy egy réteg felett nyúlik, alatta pedig összenyomódik az anyag (ezek mértéke függ a köztes résztől való távolságtól). A köztes részt, melynek hossza nem változik, neutrális zónának nevezzük. Egyik jól használható példa, ha egy oldalan rögzített rúdnak a másik végére F erőt fejtünk ki, lásd az ábrát.

Továbbá eltekintünk a rúd hossz tengelyére merőleges síkkeresztmetszetének torzulásától. Így feltételezhetjük, hogy mindig érvényes a Hooke-törvény (Ekkor a neutrális réteg egy neutrális görbe lesz csupán).

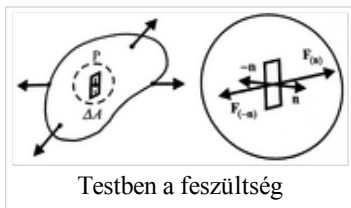
Mindezek alapján megadható mekkora erő ébred az egyes tartományokban, mekkora a Young-modulus, mekkora a belső feszültségek eredő forgatónyomatéka stb. További tipikus hajlítási módszerek:



Feszültség- és deformációs tenzor

Feszültség tenzor felírása

A pontos vizsgálat céljából vegyünk egy ΔA nagyságú felületelemet a testben, ami tartalmazza a P pontot. \mathbf{n} a felületre merőleges normálvektorunk.



Ha szétvágjuk a testet ΔA mentén, akkor ahhoz hogy újra összeillesszük, egy ugyanakkora, ellentétes irányú erőre lesz szükségünk. Tehát

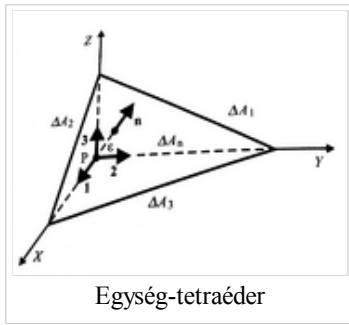
$$\mathbf{F}_{(\mathbf{n})} + \mathbf{F}_{(-\mathbf{n})} = 0$$

Bevezetve a feszültségvektort: $\sigma_{(\mathbf{n})} = \frac{\mathbf{F}_{(\mathbf{n})}}{\Delta A} \implies \sigma_{(-\mathbf{n})} = -\sigma_{(\mathbf{n})}$

A feszültségek felületi erők, tehát egy adott felületen keresztül fejtik ki hatásukat. Továbbá belső erőkből származnak és rövid a hatótávolságuk. Valamint léteznek még térfogati erők, melyek tetszőleges ΔV térfogatelemre hatnak:

$$\mathbf{F} = \mathbf{f} \Delta V, \text{ ahol } \mathbf{f} \text{ a térfogati erősűrűség (amely helyfüggő).}$$

Ha a P pontban felvesszünk egy X, Y, Z (1,2,3) irányú egyégvektorok által kifeszített tetraédert, akkor a következő ábrát kapjuk (ΔA_i -k rendre az oldalak területei):



A térfogati erőkkel a 4 lapon működő feszültségekből származó erők tartanak egyensúlyt:

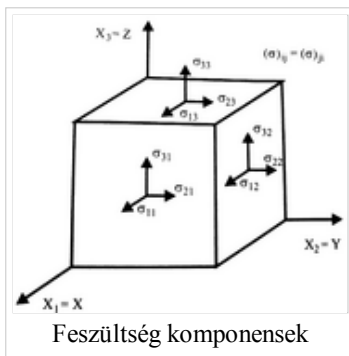
$$\sigma_{(-1)} \Delta A_1 + \sigma_{(-2)} \Delta A_2 + \sigma_{(-3)} \Delta A_3 + \sigma_{(-n)} \Delta A_n + \mathbf{f} \Delta V = 0$$

ε (ábra fent) nem más, mint ΔA_n távolsága P ponttól, mellyel a térfogati erők nagyságrendje köbösen, a felületi erők pedig négyzetesen változik. Ezért $\varepsilon \rightarrow 0$ határesetben:

$$\sigma_{(-1)} \Delta A_1 + \sigma_{(-2)} \Delta A_2 + \sigma_{(-3)} \Delta A_3 + \sigma_{(-n)} \Delta A_n = 0$$

Mivel az egyes felületek kifejezhetők ΔA_n segítségével ($\Delta A_i = \Delta A_n \cos \angle(i, n) = \Delta A_n n_i$), ezért az egyenlet a következőképp egyszerűsödik:

$$\sigma_{(\mathbf{n})} = \sigma_{(1)} n_1 + \sigma_{(2)} n_2 + \sigma_{(3)} n_3$$



Tehát ha ismerjük a koordinátasíkokon fellépő feszültséget, akkor bármilyen \mathbf{n} irányban meg tudjuk határozni a feszültséget:

$$\sigma_{(\mathbf{n}),i} = \sigma_{(1),i} n_1 + \sigma_{(2),i} n_2 + \sigma_{(3),i} n_3 \quad (i=1,2,3)$$

Így bevezethetjük a $\sigma_{i,j} = \sigma_{(j),i}$ **feszültség tenzort**, amellyel a fenti egyenlet:

$$\sigma_{(\mathbf{n}),i} = \sigma_i = \sum_{j=1}^3 \sigma_{ij} n_j$$

(Tenzorról akkor beszélünk, ha a mátrix homogén, lineáris vektortranszformációban szerepel.) A feszültség tenzor j-edik oszlopában a feszültség komponensek állnak. A főátló komponensei a nyújtási/összenyomási feszültségek, a többi elem pedig nyírási feszültség. Továbbá bizonyítható, hogy a feszültségtenzor szimmetrikus^[1].

Deformációs tenzor felírása

Síkbeli deformációt vizsgálva (amit később kiterjesztünk 3D-ra):

A P pont és környezete elmozdulása leírható egy egyszerű $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ vektor-vektor függvénnyel.

Q_X elmozdulásából Q'_X helykoordinátái:

$$((x + \Delta x) + u_x(x + \Delta x, y), y + u_y(x + \Delta x, y))$$

A $\overrightarrow{P'Q'_X}$ vektor x komponense:

$$(x + \Delta x) + u_x(x + \Delta x, y) - [x + u_x(x, y)] \simeq \Delta x \left(1 + \frac{\partial u_x}{\partial x} \right)$$

A $\overrightarrow{P'Q'_X}$ vektor y komponense:

$$y + u_y(x + \Delta x, y) - [y + u_y(x, y)] = \Delta x \left(\frac{\partial u_y}{\partial x} \right)$$

(Itt alkalmaztuk a skalár-vektor függvények megváltozására vonatkozó összefüggést:

$$\Delta \phi = \phi(\mathbf{r} + \Delta \mathbf{r}) - \phi(\mathbf{r}) = \partial_x \phi \Delta x + \partial_y \phi \Delta y + \partial_z \phi \Delta z)$$

Az X-tengely irányában fekvő szakasz relatív megnyúlása tehát:

$$\epsilon_{xx} = \frac{\Delta x \left(1 + \frac{\partial u_x}{\partial x} \right) - \Delta x}{\Delta x} = \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} \right) \rightarrow (\text{A kettős index mutatja a szakasz irányát és a változás irányát is})$$

Ugyanezzel a gondolatmenettel: $\epsilon_{yy} = \left(\frac{\partial u_y}{\partial y} \right)$

A $\overrightarrow{P'R'_Y}$ vektor Y tengellyel bezárt szöge: $\gamma_2 \simeq \frac{\partial u_x}{\partial y}$, ami alapján a nyírás szöge:

$$\gamma \simeq \gamma_1 + \gamma_2 = \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x}$$

Tehát a az alakváltozást leíró elmozdulásfüggvény parciális deriváltjai közvetlen fizikai jelentéssel bírnak.

$$\epsilon_{xx} = \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} \right); \quad \epsilon_{xy} = \epsilon_{yx} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right); \quad \epsilon_{yy} = \left(\frac{\partial u_y}{\partial y} \right) \implies \epsilon = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} \\ \epsilon_{yx} & \epsilon_{yy} \end{pmatrix}$$

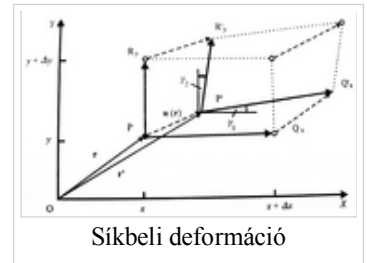
ahol ϵ a **deformációs tenzor**.

Általános 3D-ban: $\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad i, j = 1, 2, 3$

Ennek főátlóbeli komponensei a koordinátatengelyek irányában történő hosszváltozásokat, a vegyes indexű tagok a hozzájuk tartozó egyenesek közötti szögváltozások felével egyenlőek. A tenzor spurja a relatív térfogatváltozást adja meg. Fontos tétel még, hogy tetszőleges deformáció felírható egyenletes összenyomás és egy nyírás összegeként.

Általános Hooke-féle törvény

Éremes a Hooke-törvényt olyan deformációkra általánosítani, amelyek során a feszültség-tenzor elemei a deformációs-tenzor elemeinek lineáris függvényei. Mivel ezek a tenzorok szimmetrikusak, így hat független elemük



van, és helyettesíthetők a következő kifejezésekkel:

$$\tilde{\sigma} = (\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}, \sigma_{xy}, \sigma_{xz}, \sigma_{yz}), \quad \tilde{\epsilon} = (\epsilon_{xx}, \epsilon_{yy}, \epsilon_{zz}, \epsilon_{xy}, \epsilon_{xz}, \epsilon_{yz})$$

És az általános Hooke-törvény szerint ezek közt lineáris kapcsolat van: $\tilde{\sigma} = \hat{C}\tilde{\epsilon}$, ahol \hat{C} egy 6x6-os mátrix és a rugalmas állandók tenzora (ez is mindig szimmetrikus). Komponensekkel felírva:

$$\sigma_j = \sum_{i=1}^6 C_{ij}\epsilon_j \quad ; \quad j = 1, 2, \dots, 6$$

Tehát az általános Hooke-törvény egy 6 egyenletből álló egyenletrendszer, melyhez 36 rugalmas állandó szükséges. Ha figyelembe vesszük, hogy C is szimmetrikus, a deformáció homogén és izotrop és a koordináta rendszert is úgy választjuk, hogy a tengelyek egybeessenek a főfeszültségi irányokkal, akkor a Hooke-törvény 3 egyenletre egyszerűsödik:

$$\sigma_I = C_1\epsilon_I + C_2\epsilon_{II} + C_3\epsilon_{III}$$

$$\sigma_{II} = C_1\epsilon_{II} + C_2\epsilon_{III} + C_3\epsilon_I$$

$$\sigma_{III} = C_1\epsilon_{III} + C_2\epsilon_I + C_3\epsilon_{II}$$

ahol $\sigma_I, \sigma_{II}, \sigma_{III}$ a főfeszültségek, $\epsilon_I, \epsilon_{II}, \epsilon_{III}$ a fődilataciók, C_1, C_2, C_3 pedig a rugalmas állandók. Mivel a σ_I irányra merőleges másik két irány közül egyik sem kitüntetett, ezért $C_2 = C_3$. Így bevezethetőek a következő jelölések:

$$C_1 - C_2 = 2\mu' \text{ és } C_2 = C_3 = \lambda'$$

Ezekkel a fenti egyenletek átírhatók:

$$\sigma_I = 2\mu'\epsilon_I + \lambda'(\epsilon_I + \epsilon_{II} + \epsilon_{III})$$

$$\sigma_{II} = 2\mu'\epsilon_{II} + \lambda'(\epsilon_I + \epsilon_{II} + \epsilon_{III})$$

$$\sigma_{III} = 2\mu'\epsilon_{III} + \lambda'(\epsilon_I + \epsilon_{II} + \epsilon_{III})$$

Tehát izotrop test esetén a deformáció és a feszültség állapot között két rugalmas állandó teremt kapcsolatot, melyek itt μ' és λ' . Ezeket hívjuk **Lamé-féle állandóknak**. Ezek segítségével a korábban definiált deformációk állandói felírhatóak, néhány példa: Young modulus:

$$E = \frac{\mu(2\mu + 3\lambda)}{\mu + \lambda}$$

A Poisson-szám (itt most ν):

$$\nu = \frac{\lambda}{2(\mu + \lambda)}$$

Kis deformációkra a kompresszibilitás:

$$\kappa = \frac{3}{2\mu + 3\lambda}$$

Nyírási modulus:

$$G = \mu$$

A kompresszibilitás és a hangsebesség

Érdeemes még tudni két differenciális összefüggést a deformálható anyagokkal kapcsolatban, az egyik a kompresszibilitás:

49/209

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

A másik a hangsebesség:

$$c^2 = \frac{\partial p}{\partial \rho}$$

Hullámterjedés deformálható testekben, Doppler-effektus. [2]

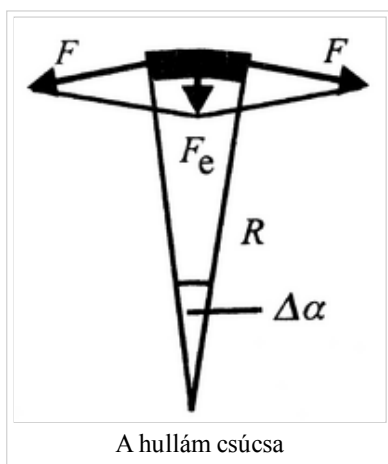
Rugalmas hullám: rugalmas közegben keltett deformáció térbeli terjedése.

Attól függően, hogy gömb vagy sík mentén terjed a hullám, beszélhetünk gömb- vagy síkhullámról.

- Transzverzális hullám: a részecskék elmozdulása merőleges a terjedés irányára
- Longitudinális hullám: a részecskék elmozdulása megegyezik a terjedés irányával

Transzverzális hullámok terjedési sebessége:

Egy kötélen levő hullám-hegy terjedését vizsgáljuk. Felfoghatjuk úgy, hogy a hullám csúcsa (egy, a csúcs mozgásához rögzített koordináta-rendszerben) körmozgást végez. Ehhez a centripetális erőt a kötélen két végén levő feszítőerők eredője adja.



Felhasználva, hogy $\Delta\alpha \ll 1 \implies \sin \frac{\Delta\alpha}{2} \approx \frac{\Delta\alpha}{2}$

$$F_e = 2F \sin \frac{\Delta\alpha}{2} = F\Delta\alpha$$

Az ív tömege: $R\Delta\alpha q\rho$, ahol q a kötélen keresztmetszete, ρ a sűrűsége.

A körmozgás dinamikai egyenlete alapján:

$$F\Delta\alpha = R\Delta\alpha q\rho \frac{c_t^2}{R}, \text{ ahonnan a terjedési sebesség: } c_t = \sqrt{\frac{F}{\rho q}}$$

Bevezetve a kötélen levő húzófeszültséget: $\sigma = \frac{F}{q} \implies c_t = \sqrt{\frac{\sigma}{\rho}}$

Hullámfüggvény

49/209

50/209

Egy kötélen egyik felén T periódusidővel hullámokat keltünk. Egy periódusidő alatt a deformáció cT távolságra jut, ez a hullámhossz: λ .

Egy általános pont rezgésére az összefüggés:

$$y(x, t) = A \sin \omega \left(t - \frac{x}{c} \right), \text{ ahol}$$

y a kötélen kitérése, A a rezgés amplitúdója, ω a körfrekvencia, $\frac{x}{c}$ az adott ponthoz tartozó időkéésés.

Ez a hullámfüggvény az eddigiek alapján átírható a következő alakba:

$$y(x, t) = A \sin 2\pi \left(\frac{t}{T} - \frac{x}{\lambda} \right), \text{ ahol ha bevezetjük a hullámszámot: } k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

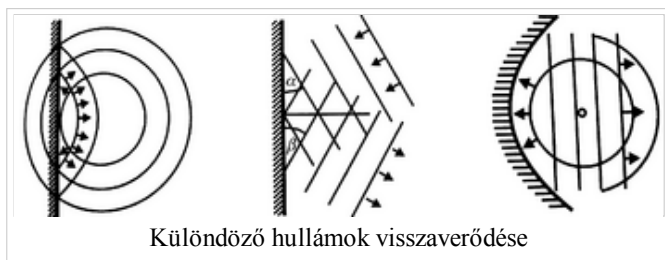
$y(x, t) = A \sin (\omega t - kx)$ egyenletet kapjuk, mint végső formát.

Hullám-tulajdonságok

A tulajdonságok demonstrálására jól alkalmas pl. a hullámkád...

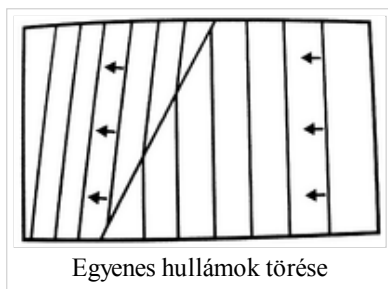
Visszaverődés (reflexió):

Az akadályhoz érkező és visszavert egyenes síkhullám ugyanakkora szöget zárnak be a fallal.



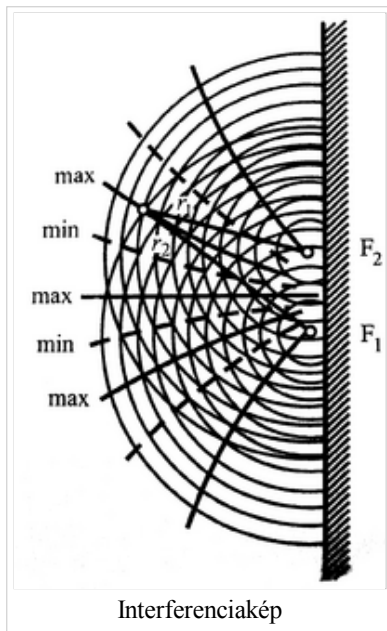
Törés (refrakció):

Pl. ha megváltozik a medence mélysége, akkor az más közegnek számít. A mélyebb vízben gerjesztett, adott hullámhosszúságú, egyenes hullámok a határfelületen irányváltozást és hullámhossz-rövidülést szenvednek.



Interferencia:

Két pont pontszerű hullámforrás a víz felszínén állandó interferenciaképet mutat.



A létrehozott körhullámok hol erősítik, hol kioltják egymást. A két hullámegyenlet:

$$y_1(x, r_1) = A \sin 2\pi \left(\frac{t}{T} - \frac{r_1}{\lambda} \right), \quad y_2(x, r_2) = A \sin 2\pi \left(\frac{t}{T} - \frac{r_2}{\lambda} \right)$$

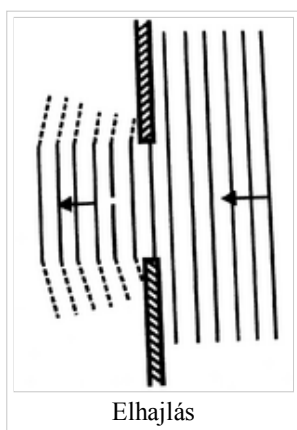
A két hullám fáziskülönbsége egy adott P pontban: $\delta = 2\pi \frac{r_2 - r_1}{\lambda}$, útkülönbsége: $\Delta s = r_2 - r_1$

Erősítés maximális helye ott van, ahol $\delta = 2n\pi$, ($n \in \mathbb{Z}$) illetve $\Delta s = n\lambda$

Kioltás pedig, ahol $\delta = 2(n + 1)\pi$, és $\Delta s = (2n + 1)\frac{\lambda}{2}$

Elhajlás (diffrakció):

Ha hullámvonulat útjába akadályt teszünk, melyen rést hagyunk, akkor azt tapasztaljuk hogy a fal mögötti "árnyéktérben" is keletkeznek hullámok. Sőt, ha a rés a hullámhosszal egy nagyságrendű, illetve kisebb, akkor a rés mögött körhullámok keletkeznek (mint egy pontforrás esetén).



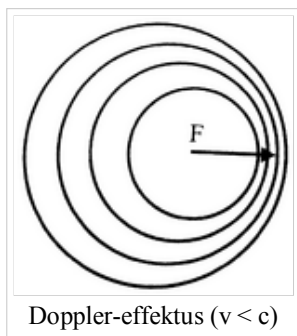
Ez magyarázható a **Huygens-elvvel**, mely szerint:

- A hullámfelületek minden pontjából elemi hullámok indulnak ki
- Az új hullámfelületet egy későbbi időpontban az elemi hullámok burkoló felülete adja.

Doppler-effektus

52/209

Ha egy hullámforrás mozog a közeghez viszonyítva, akkor a forrás előtt a hullámoknál hullámhossz rövidülés, mögötte hullámhossz növekedés figyelhető meg. Ennek megfelelően a mozgás irányában nagyobb a rezgés frekvenciája, mint a mögötte levő térrészben. Ez a **Doppler-effektus**.



Nézzük a hangtani esetet, mert ez “látványos”. Ha feltesszük, hogy a megfigyelő nem mozdul, a forrás közeledik, illetve hogy a terjedési sebesség kisebb, mint a hangsebesség ($v < c$), akkor a frekvenciaváltozás a következőképp adható meg:

A forrás egységnyi idő alatt f darab hullámot bocsájt ki, melyekből az első c távolságra jut. Ez alatt v távolságra jut a forrás, tehát az f darab hullámnak $c-v$ hosszra kell elhelyezkednie, ami csak úgy lehet, ha megváltozik a hullámhosszuk:

$$c - v = f \lambda', \text{ ahol } \lambda' \text{ az észlelt hullámhossz.}$$

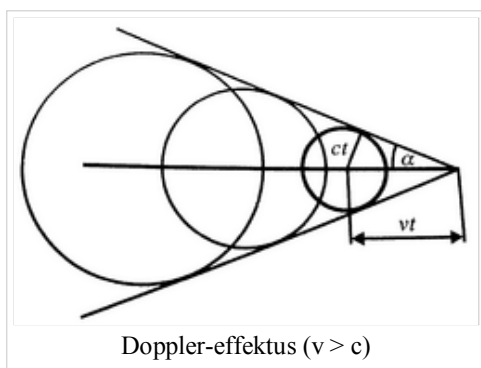
Az észlelt frekvencia pedig:

$$f' = \frac{c}{\lambda'} = f \frac{c}{c - v}$$

Ugyanezen gondolatmenet alapján, ha távolodik a forrás: $f' = f \frac{c}{c + v}$

Hasonló gondolatmenet alapján, ha nyugvó forrásnál közeledik/távolodik az észlelő: $f' = f \frac{c \pm v}{c}$

Ha a hullámforrás **gyorsabban mozog a hangsebességnél**, akkor a hanghullámok már nem tudják megelőzni a forrást:



A hang ekkor olyan kúp felület mentén terjed, melynek csúcsában a hangforrás van. Az ábra alapján a kúp nyílásszöge:

$$\sin \alpha = \frac{c}{v} \text{ (Ennek reciprokát nevezzük Mach-számnak [M])}$$

Folyadékok tulajdonságai

52/209

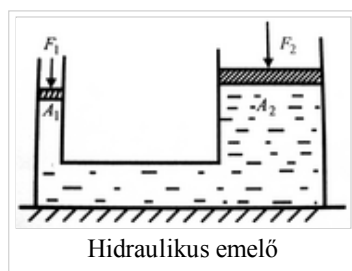
Hidrosztatika

Pascal-törvény: A nyomás a folyadékokban egyenletesen terjed, vagyis a külső nyomásból származó nyomás a folyadék belsejében és a határfelületén minden irányban ugyanakkora.

Demonstrációs példák:

- Vízibuzogány: minden irányban egyenlő mértékben áramlik ki a víz.
- Vékonyfalú üveg pohárban (bolognai) üvegcsépp: ha megroppantjuk a csépp végét, akkor az üveg porrá esik szét és a gyors folyamat széttöri a poharat is.

- Hidraulikus emelő: $\frac{F_1}{A_1} = \frac{F_2}{A_2}$



Hidraulikus emelő

A **hidrosztatikai nyomás** egyenesen arányos a felszíntől mért mélységgel és a folyadék sűrűségével:

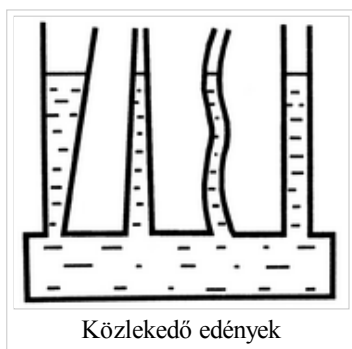
$$G = Ah\rho g \quad (A - \text{a folyadék oszlop alapterülete, } h - \text{a magassága, } \rho - \text{a sűrűsége})$$

A **hidrosztatikai paradoxon**: Különböző formájú, de azonos alapterületű edények esetén a mérleg egyensúly mutat, ha ugyanakkora magasságú folyadék van bennük. (Ilyenkor is a folyadék oszlop nyomása fontos... "Az edény fala vagy tartja, vagy nyomja a folyadékot")



Hidrosztatikai paradoxon

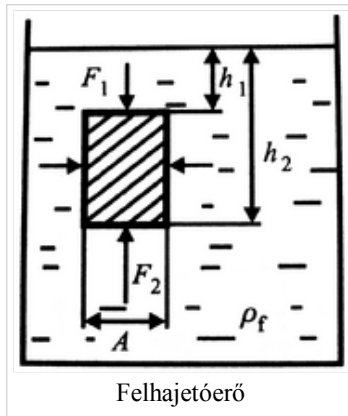
Közlekedő edények: Szintén a Pascal-törvény értelmében (és a fentiek alapján is látható), a folyadékszint az ábrán látható rendszerben ugyanolyan magas lesz mindenhol. (A hidrosztatikai nyomások egyenlőek!)



Közlekedő edények

Felhajtóerő

Egyszerű alakú testre (h magasságú, A keresztmetszetű henger sűrűségű folyadékba) a felhajtóerő:



A hidrosztatikai nyomásnál az oldallapra ható erők eredője 0, az alsó és felső lapra hatók összege pedig megadja a felhajtóerőt:

$$F_f = F_2 - F_1 = h_2 \rho_f g A - h_1 \rho_f g A = (h_2 - h_1) \rho_f g A = h A \rho_f g = V_f \rho_f g$$

Ez a törvény általánosan is igaz: bármely folyadékba merülő testre a test által kiszorított folyadék súlyával megegyező nagyságú felhajtóerő hat. Ez **Archimédész törvénye**.

A testek úszása és annak stabilitása

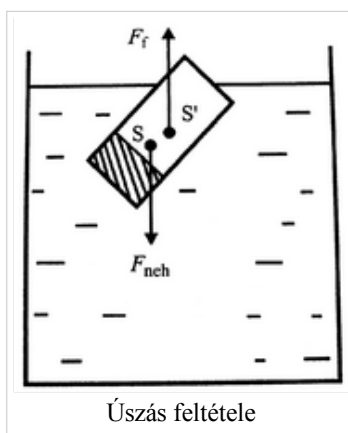
Attól függően, hogy a test súlya vagy a testre ható felhajtó erő nagyobb, a test úszhat, elmerülhet vagy lebeghet.

$$F_e = F_{nehezsegi} - F_{felhajto} = V_t(\rho_t - \rho_f)g$$

- Ha $\rho_t > \rho_f \Rightarrow F_e > 0$: a test elmerül
- Ha $\rho_t = \rho_f \Rightarrow F_e = 0$: a test lebeg
- Ha $\rho_t < \rho_f \Rightarrow F_e < 0$: a test úszni fog.

Úszás esetén a test részben belemerül a folyadékba úgy, hogy $V_t \rho_t = V_f \rho_f$ feltétel teljesüljön (ahol V_f a test folyadékban levő része).

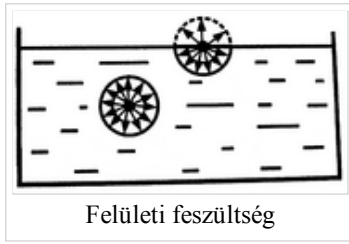
Ahhoz, hogy **stabil úszás**ról beszéljünk, további feltétel szükséges: a felhajtó- és a nehézségi erő ne fejtsen ki forgatónyomatékokat. Hiszen a test súlypontja (S) és a kiszorított folyadék súlypontja (S') nem mindig esik egybe.



Ha a kibillentett úszó test vissza áll eredeti helyzetébe, akkor **stabilis az úszás**. Ha ha kibillentve mindig ugyanúgy marad, akkor az egyensúlyi helyzet **indifferens** (pl. homogén gömb esetén). Ha pedig másik helyzetbe megy át, akkor **labilis** volt.

Felületi feszültség

Ha megnézzük egy folyadék molekula hatásgömbjét a folyadékon beljebb, akkor azt láthatjuk, hogy a kölcsönhatások eloszlása jóformán egyenletes. Viszont a felületen levő molekulákra ez nem igaz.



Felületi feszültség

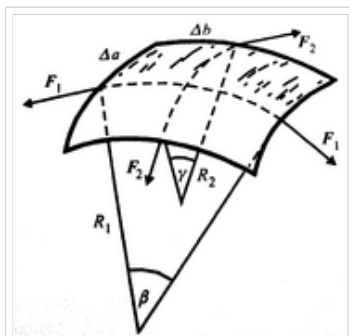
Tehát kísérletek és elméleti számítások alapján a felszíni réteg lazább, nagyobb az átlagos molekulatávolság, mint a folyadék belsejében. Ezért a felületi réteg feszítetté válik. És ennek a felszínnek a növeléséhez/átszakításához munkát kell végeznünk.

Ha egy keretre - aminek egyik oldala mozgatható - szappanhártyát feszítünk ki, akkor azt tapasztaljuk, hogy az erő (ami húzza az l hosszúságú oldalt) nem függ a hártya területétől:

$$F = \alpha \cdot 2l$$

Ebből arra következtethetünk, hogy összehúzódáskor a hártya szerkezete/struktúrája nem változik. Továbbá a potenciális energiaminimum-elve következtében létrejönnek a minimálfelületek. Az energiaminimumot pedig a felületi energia minimuma adja. (pl.: szappanos vízbe mártott kocka...)

Gömbült felület görbületi nyomása:



Gömbült felület görbületi nyomása

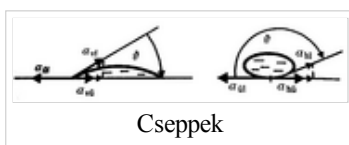
Az adott hártyadarabka nyomását a következő összefüggéssel kaphatjuk meg, mely **Laplace I. törvénye**:

$$p_g = \alpha \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right)$$

(Ennek segítségével lehet magyarázni a kapilláris emelkedést is ^[3])

Nedvesítő és nem nedvesítő folyadékok:

Az üvegre cseppentett folyadékok alakját a nehézségi erő és a felületi feszültség együttesen alakítják ki.



Cseppek

Az ábrán láthatóak a 3 anyag érintkezési vonalában ható felületi feszültségek. (Jelmagyarázat: v-víz, h-higany, ü-üveg, l-levegő) Az egyensúlyt a következő összefüggés írja le:

$$\alpha_{ul} = \alpha_{vu} + \alpha_{vl} \cos \vartheta, \quad \vartheta \text{ az illeszkedési szög. (Higanyra hasonló az egyenlet.)}$$

Ezt az összefüggést nevezzük **Laplace II. törvényének**.

Torricelli-kísérlet

A levegő súlyából adódó légnyomás meghatározásához Torricelli egy 1 m hosszú kémcsövet megtöltött higannyal és higgannyal telt edénybe helyezte a cső nyitott végét. A csőben a higany szintje az edényben levő higanyhoz képest 76 cm-re esett (függetlenül az üvegcső dőlésszögétől). Ezzel a magasságú higannyal tud a levegő nyomása egyensúlyt tartani (közlekedő edények elve).

További példák: befőttes üveg behorpadt celofánnal, magdeburgi féltekék....

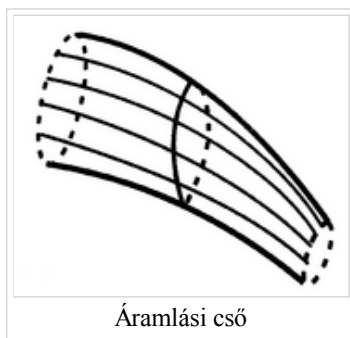
Áramlások

Lagrange-féle leírás

Folyadékot a szilárd testekhez hasonlóan kezeljük, és részekre bontjuk. Majd minden részelemnek külön megadjuk a helykoordinátáját és a pályavonalát. De ez a felírás nagyobb időre túl kusza pályákat eredményez.

Euler-féle leírás

Nem a közeg egyes pontjait, hanem az áramlási teret nézzük a következőképp: minden pontban megadjuk a sebességet (v), a nyomást (p) és a sűrűséget (ρ) időtől függően. Ekkor nem számít, hogy egy adott részecske éppen hol tartózkodik. A szemléltetéshez használjuk az *áramvonalakat*, melynek deriváltja megadja az adott pontban a sebességvektor egyenesét.



Áramlási cső: az áramlási térben egy elméleti zárt görbe pontjain ármelő áramvonalak összessége.

Áramlások osztályozása:

- Súrlódásos/súrlódás mentes: súrlódásos, ha a folyadékrészek relatív mozgásából származó nyíróerők nem elhanyagolhatók.
- Örvényes/örvény mentes: örvényes, ha a folyadékrészek forgómozgást is végeznek.
- Stacionárius/nem stacionárius: stacionárius, ha v, p és ρ nem függnek az időtől.

Tökéletes folyadék áramlása

Vegyünk egy ΔV térfogatú folyadék részecskét egy $r(x,y,z)$ helyen. A rá ható erők x komponense az X -tengelyre merőleges lapjaira ható nyomásból származik. Így:

$$F_x = [p(x, y, z, t) - p(x + \Delta x, y, z, t)] \Delta y \Delta z = -\frac{\partial p}{\partial x} \Delta x \Delta y \Delta z$$

Felhasználva, hogy $\Delta m = \rho \Delta V = \rho \Delta x \Delta y \Delta z$, a részecske mozgásegyenletének x komponense:

$$\rho \frac{dv_x}{dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} \text{ ugyanez felírható az y komponensre is.}$$

$$\text{A z komponensnél viszont figyelembe kell venni a nehézségi erőt: } \rho \frac{dv_z}{dt} = -\frac{\partial p}{\partial z} - \rho g$$

Vektoriálisan megkapjuk az **ideális folyadékokra vonatkozó dinamikai alapegyenletet (Euler-egyenlet)**:

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla p - \rho \mathbf{g}$$

Ahol a teljes időderivált kifejtésénél figyelembe kell venni azt, hogy mire kis idő múlva odanézek, a részecske már nem ott lesz, ahol eddig volt, így a deriváltat a láncszabály szerint írhatjuk le:

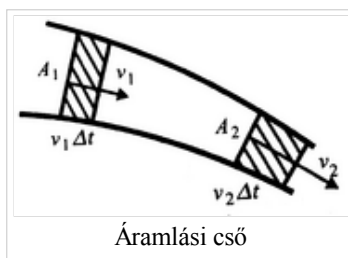
$$\frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \text{grad}) \vec{v}$$

Ez az egyenlet még nem elég az áramlás problémájának megoldásához, hiszen ez csak 3 egyenlet míg az ismeretlenjeink száma: 3(sebességek)+1(nyomás)+1(sűrűség) Kell még a kontinuitási egyenlet és egy állapotegyenlet.

A peremfeltételek nem sűrűlő folyadék esetén azt mondják, hogy a sebesség a falakra merőleges komponense 0.

Kontinuitási egyenlet:

Az összenyomhatatlanság miatt az áramlási cső két tetszőleges keresztmetszetén egyenlő térfogatú folyadék halad keresztül.



$$A_1 v_1 \Delta t = A_2 v_2 \Delta t, \text{ ahonnan: } \frac{v_1}{v_2} = \frac{A_2}{A_1} \text{ adódik, ami a stacionárius áramlásra vonatkozó kontinuitási egyenlet.}$$

Szűkületben tehát nagyobb sebességgel áramlik a folyadék.

Általános esetben a kontinuitási egyenlet a következőképpen írható fel:

- Egy térfogatot kiválasztva a folyadékon belül, a térfogaton belüli tömeg megváltozása:

$$\frac{d}{dt} \int \rho(\vec{r}) dV$$

- Ennek egyenlőnek kell lennie a térfogat szélein(felületén) kiáramlott tömeggel:

$$- \int \rho(\vec{r}) \vec{v} dF$$

A felületi integrálra Gauss-Oszrogradszkij tételt alkalmazva, majd kihasználva, hogy ez minden térfogatra igaz, kapjuk a szokásos alakú kontinuitási egyenletet:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{v}) = 0$$

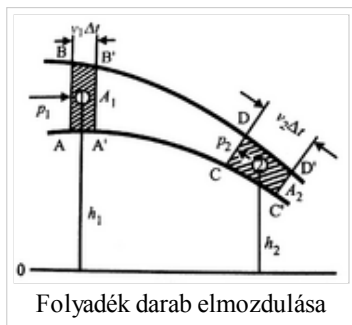
A leggyrabban választott állapotegyenlet $\rho = \text{konst.}$ vagyis az összenyomhatatlan folyadék esete. Ekkor az előző

58/209

egyenlet így egyszerűsödik:

$$\operatorname{div} \vec{v} = 0$$

A Bernoulli-egyenlet



Vizsgáljuk meg az ABCD folyadék rész elmozdulását (A'B'C'D'-be megy át Δt idő múlva). Mivel az ábrán fehérén hagyott rész nem változik az áramlás szempontjából, ezért úgy tekintjük, mintha ABA'B' folyadék CDC'D'-be jutott volna át. A munkatétel szerint a folyadék mozgásenergiája megegyezik a ráható erők munkájának összegével. Súrlódásmentes esetben csak a nehézségi erő és a p_1 , p_2 nyomásokból származó erőt kell figyelembe venni. A nehézségi erő munkája:

$$W_1 = A_1 v_1 \Delta t \rho g (h_1 - h_2)$$

A nyomóerőé pedig:

$$W_2 = p_1 A_1 v_1 \Delta t - p_2 A_2 v_2 \Delta t$$

Felhasználva a kontinuitási egyenletet: $V = A_1 v_1 \Delta t = A_2 v_2 \Delta t$, és a munkatételt:

$$\frac{1}{2} V \rho v_2^2 - \frac{1}{2} V \rho v_1^2 = V \rho g (h_1 - h_2) + V (p_1 - p_2), \text{ melyet átrendezve a következő összefüggést kapjuk:}$$

$$p_1 + \rho g h_1 + \frac{1}{2} \rho v_1^2 = p_2 + \rho g h_2 + \frac{1}{2} \rho v_2^2$$

Ezt az összefüggést hívjuk **Bernoulli-egyenletnek**. Ez alapján ez az összeg bármely áramfonal esetén állandó - összenyomhatatlan folyadék súrlódásmentes, stacionárius áramlása esetén:

$$p + \rho g h + \frac{1}{2} \rho v^2 = C$$

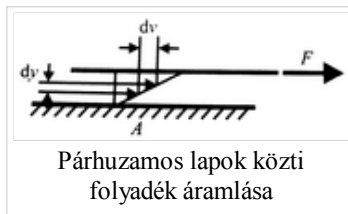
Viszkózus folyadék áramlása

Amikor a folyadékrészek relatív sebességük nem 0, akkor a részek közötti belső súrlódási erő már nem hanyagolható el általában.

Tapasztalat: egymásra rétegzett színes és színtelen glicerinből kihúzzunk egy üveglapot. Az üveglapon lévő folyadékok sebessége a legnagyobb, a távolabbiaké kisebb. A relatív sebesség és belső súrlódás miatt a lassabb rétegek lassítják a gyorsabbakat és fordítva.

Mégjobban vizsgálható, ha két párhuzamos lap közötti folyadék áramlását vizsgáljuk, úgy hogy csak a felső lapot mozdítjuk el.

59/209



Párhuzamos lapok közötti folyadék áramlása

Ekkor legfelül a leggyorsabb a folyadék, míg legalul 0 a sebessége. Ekkor a folyadék sebességének az áramlásra merőlegesen gradiense van. Eredményül azt kapjuk, hogy a belső súrlódási erő egyenesen arányos az egymáson csúszó folyadékrétegek felületének nagyságával és a keresztmetszetben vett egységnyi távolságra eső sebességváltozással:

$$F = \eta A \frac{dv}{dy}$$

Ezt az összefüggést **Newton belső súrlódási törvényének** nevezzük. (Ahol η a dinamikai viszkozitás.)

Stokes törvénye:

Áramlási térbe helyezett közelében réteges áramlás alakulhat ki. A belső súrlódással a közeg erőt fejt ki a golyóra, ami arányos a golyó relatív sebességével, a golyó sugarával, és a közeg dinamikai viszkozitásával:

$$F = 6\pi\eta r v$$

Ezt a törvényt használta fel Millikan is a kísérlete során, amikor megmérte az elemi elektromos töltést....

További pl.: Brown-mozgáskor felhasznált mozgásegyenlet: $m \frac{d^2 x}{dt^2} = -6\pi\eta a \frac{dx}{dt} + F_{veletlen}$

Turbulencia

Azt tapasztaljuk, hogy ha egy áramlási csőben lamináris (stacionárius) áramlás sebességét növeljük, akkor egy adott sebességnél az áramlás kavargó, turbulens áramlásba csap át. Ugyanezt tapasztaljuk, ha a sebességet nem változtatjuk, de az áramlási cső méretét növeljük. Egyes vizsgálatok alapján a turbulenssé válás függ az áramlási sebességtől (v), az áramlási cső harántmértétől (r), a közeg sűrűségétől (ρ) és a dinamikai viszkozitástól (η). Az átmenet akkor történik meg, ha

$$R = \frac{\rho r v}{\eta}, \text{ ahol } R \text{ a Reynolds-szám.}$$

Ez a számérték hozzárendelhető az adott testekhez is, melyeket az áramlási csatornába helyezünk. Két test körüli áramlások pedig akkor lesznek hasonlóak, ha $R_1 = R_2$. (Tehát pl egy 10x kisebb repülőgép modellhez 10x nagyobb szél kell...)

Áramlások hasonlósága

Az előző pontban említett Reynolds-szám csak egy a hidrodinamika rengeteg dimenziótlan száma közül. Általánosan elmondható, hogy két áramlás akkor hasonló, ha az adott probléma szempontjából jelentős dimenziótlan számai egyenlők. Két áramlás hasonlósága alatt itt azt értjük, ha dimenziótlanított formában megegyező függvények írják le a sebesség és nyomáseloszlásukat (ha más lényeges változóink is vannak, pl.: hőmérséklet, akkor azokat is). Ennek óriási jelentősége van, mivel a hidrodinamika egyenletei nemlineárisak, és sokszor megfelelő közelítő megoldás sem található rájuk, így a mérnökök/kutatók kénytelenek modellkísérleteket alkalmazni, pl. a vizsgálandó hajótest kicsinyített másán.

Örvények

Két, nem azonos sebességű lamináris áramlás határfelületén a nyíróerők vékony sávban forgásba hozzák a folyadékot, örvények jönnek létre.

59/209



Ha egy testet (pl. hengert) helyezünk lamináris áramlásba, akkor a testtől távolabb az áramlás nem változik, de a test közelében a folyadéknak nagy lesz az áramlásra merőleges sebesség-gradiense. (Ez a Prandtl-féle határréteg.) Ez amiatt van, mert a test felületén a folyadékreszek sebessége nulla, a határréteg másik szélén pedig maximális. A belső súrlódás miatt nem tudnak elhaladni a test mellett, hogy mögé jussanak (a magas nyomású részhez), hanem már hamarabb lefékeződnek és visszakanyarodnak a kisebb nyomású rész felé. Viszont itt a nagysebességű áramlás elkapja a visszaáramló folyadékot és így forgásba jön. Ez a kialakuló örvény egyre nagyobb lesz, majd leválik a testről. Ez a jelenség periódikusan ismétlődik, és ellentétesen forgó örvénypárok szakadnak le egymás után. Ezt nevezzük **Kármán-féle örvénysornak**.



Kármán-féle örvénysor

A Navier-Stokes-egyenlet(*)

Összenyomhatatlan folyadékok esetén:

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{f}.$$

Az Euler-egyenlethez képesti egyetlen új tag a viszkozitás hatását írja le. μ a kineztikai viszkozitás

$$\mu = \frac{\eta}{\rho}$$

[4] A peremfeltételek viszkózus folyadékokra azt mondják, hogy a falak mentén a víz áramlási sebessége nulla.

Hivatkozások: Forrás: Tasnádi-Skrapits-Bércs - Általános fizika I.2.

1. ↑ könyv: 151.§ 1. (50-51. oldal)
2. ↑ Tasnádi-Skrapits-Bércs: Általános fizika I.2. IV. C) Hullámtan
3. ↑ 171.§ 1. (110. o)
4. ↑ <http://en.wikipedia.org/wiki/Navier-Stokes>

Zárvizsga tematika

A klasszikus mechanika alapjai | A klasszikus mechanika elméleti tárgyalása | A relativitás elmélet alapjai | Egzaktn megoldható fizika problémák | **Folytonos közegek mechanikája** | Fenomenologikus termodinamika | Elektro- és magnetostatika, áramkörök | Elektrodinamika | Hullámegyenlet és hullámoptika | Geometriai optika és alkalmazásai | A kvantumelmélet alapvető kísérletei | A kvantummechanika elméleti háttere | Atom- és molekulaszervezet | A magfizika alapjai | A termodinamika statisztikus alapozása | Kvantumstatisztikák | Kölcsonható rendszerek, mágneses anyagok | Kristályos anyagok fizikája | Nemegyensúlyi folyamatok leírása | Az asztrofizika alapjai

Tételek

A lap eredeti címe: „http://mafihe.hu/~wiki/wiki/index.php/Folytonos_k%C3%B6zegek_mechanik%C3%A1ja”

- A lap utolsó módosítása: 2009. augusztus 19., 17:05

Fenomenologikus termodinamika

A TételWiki wikiből

Tartalomjegyzék

- 1 Az egyensúly állapota, nulladik főtétel, hőmérséklet
 - 1.1 Nulladik főtétel
 - 1.2 Empirikus hőmérsékleti skálák
 - 1.3 Hőmennyiség
- 2 Első főtétel
- 3 Entalpia, reakcióhő
- 4 Különböző anyagok hőkapacitása
 - 4.1 Egyatomos gázok
 - 4.2 Kéttatomos gázok
 - 4.3 Többatomos gázok
 - 4.4 Szilárd anyagok
- 5 Állapotegyenletek
 - 5.1 Ideális gáz
 - 5.2 Van der Waals gáz/reális gáz
 - 5.3 Fotongáz
- 6 Speciális folyamatok ideális gázzal
 - 6.1 Izoterm folyamat
 - 6.2 Izochor folyamat
 - 6.3 Izobár folyamat
 - 6.4 Adiabatikus folyamat
 - 6.5 Politróp folyamat
 - 6.6 Joule-kísérlet
- 7 Reális gázok
 - 7.1 Gay-Lussac kísérlet
 - 7.2 Joule-Thomson kísérlet
- 8 Carnot-körfolyamat
- 9 Az entrópia fogalma, második főtétel
 - 9.1 Clausius féle megfogalmazás
 - 9.2 Kelvin féle megfogalmazás
 - 9.3 A két megfogalmazás ekvivalenciája
 - 9.4 Következmény reverzibilis Carnot-folyamatra nézve
 - 9.5 A termodinamikai hőmérsékleti skála
 - 9.6 Irreverzibilis Carnot-körfolyamat
 - 9.7 Clausius-egyenlőtlenség
 - 9.8 Az entrópia termodinamikai fogalma
- 10 A fundamentális egyenlet
- 11 Legendre-transzformáció, termodinamikai potenciálok
- 12 Szabadenergia
- 13 Maxwell-relációk
- 14 Szabadentalpia, kémiai affinitás
 - 14.1 Izoterm-izobár egyensúly, kémiai reakciók
- 15 Az Euler-féle összefüggés, Gibbs-Duhem reláció
- 16 Hőerőgépek
 - 16.1 Gázturbina
 - 16.2 Otto-motor
 - 16.3 Dízelmotor
- 17 Harmadik főtétel
- 18 Alacsony hőmérsékletek előállítás

- 19 Fázisátalakulások termodinamikai tárgyalása
 - 19.1 Általánosan
 - 19.2 A folyadék-gáz átalakulás a VdW egyenlet alapján
- 20 Fázisegyensúlyok
 - 20.1 Gibbs féle fázisszabály
 - 20.2 Fázisdiagramok
 - 20.3 Clausius-Clapeyron egyenlet

Az egyensúly állapota, nulladik főtétel, hőmérséklet

Nulladik főtétel

A tapasztalat azt mutatja, hogy minden egyes termodinamikai kölcsönhatáshoz tartozik egy jellemző tulajdonság, amelynek a két testre vonatkozó egyenlősége az egyensúly szükséges és elegendő feltétele. Az ilyen tulajdonságokat **empirikus intenzitásparaméterek**nek nevezzük. Ez a termodinamika **nulladik főtétele**.

Jellemző intenzitásparaméterek:

Közelhatás	Intenzitásparaméter
Mechanikai	Nyomás
Anyagi	Kémiai potenciál
Elektrosztatikus	Elektrosztatikus potenciál
Hőhatás	Hőmérséklet

Empirikus hőmérsékleti skálák

Egy ilyen intenzitásparaméter a **hőmérséklet** is. Ha két test termikus kapcsolatban van, akkor energia áramolhat közöttük. Az **empirikus hőmérséklet** fogalom tehát:

- Termikus kapcsolatban lévő A és B testek energiát adhatnak át egymásnak. Ha az A ugyanannyi energiát ad át B-nek, mint B az A-nak, akkor azt mondjuk, hogy egyensúlyban vannak és hőmérsékletük egyenlő.
- Ha nincsenek egyensúlyban, akkor annak a testnek nagyobb a hőmérséklete, amely több energiát ad át a másiknak, mint amit a másik egyidejűleg visszaad neki. A nagyobb hőmérsékletű test ekkor tehát energiát veszít.

Ezzel még csak a kisebb-nagyobb kapcsolatot és az egyenlőséget állapítottuk meg, a tulajdonképpeni metrikánk hiányzik. Ezt önkényes választással lehet megválasztani. A legelterjedtebb empirikus skálák:

Celsius-skála: 101,325kPa légköri nyomáson a víz forráspontja 100°C, a jég olvadáspontja pedig 0°C, a beosztás a két hőmérséklet különbségének századrésze.

Kelvin-skála: Más néven ideálisgáz-skála. Az ideális gáz nyomása és hőmérséklete között $T=Cp$ lineáris kapcsolatot feltételezve a nullapont természetesen adódik $0K=-273,15^{\circ}C$ -nak, szükség van még egy pontra a skála meghatározásához, ez az az igen jól reprodukálható hőmérséklet lett, amikor 610,5Pa hármasponti nyomáson a víz, a vízgőz és a jég egyensúlyban van, $0,01^{\circ}C$ hőmérsékleten. A Kelvin fok egyenlő a víz hármaspontjához tartozó hőmérséklet 273,16-od részével. Így a Celsius és a Kelvin skála beosztása azonos. Az átváltás: $T_K = 273,15 + T_C$

Hőmennyiség

A tapasztalat szerint a makroszkopikus testek melegítéskor/hűtéskor bekövetkező energiaváltozás egyenesen arányos a hőmérsékletváltozással:

$$\Delta E = C\Delta T$$

Ahol a **C hőkapacitás**. Az itt szereplő $\Delta E = Q$ munkavégzés nélküli belső energia változást pedig **hőmennyiségnek**

nevezzük. Magát a folyamatot, vagyis a munkavégzés és mozgásmennyiség átadás nélküli energiaátadást pedig **hőközlésnek**.

Első főtétel

Az első főtétel az energiamegmaradást fejezi ki. Egy termodinamikai rendszer belsőenergiáját kétféleképpen lehet megváltoztatni, hőközléssel és munkavégzéssel. Differenciális változás esetén:

$$dE = \delta Q + \delta W$$

Itt $\delta Q > 0$ ha a rendszer hőt vesz fel, $\delta W > 0$ ha a környezet munkát végez a rendszeren.

A főtétel kifejezésében a belső energia független állapotváltozók függvénye, megváltozásának értéke csak a kezdeti és a végponttól függ, azt mondjuk, hogy a belső energia **állapotfüggvény**, vagy **teljes differenciál**. Ezzel szemben a munka és a hőátadás **útfüggvények**, értékük függ a folyamat pontos lezajlásától. A munka lehet térfogati munka $-p dV$, de lehet egyéb munka is, mint például az elektromos áram munkája. Állandó térfogaton a belsőenergia változása egyéb munkavégzés nélkül egyenlő a hőátadással:

$$dE = \delta Q_V$$

Entalpia, reakcióhő

Az entalpia definíció szerint:

$$H = E + pV$$

Az entalpia megváltozása:

$$dH = dE + d(pV) = \delta Q - pdV + \delta W_{\text{egyeb}} + pdV + V dp = \delta Q + \delta W_{\text{egyeb}} + V dp$$

Vagyis ha nincs egyéb munka, akkor állandó nyomáson az entalpia megváltozása egyenlő a hőátadással:

$$dH = \delta Q_p$$

Ez az entalpiát különösen alkalmassá teszi kémiai reakciók tanulmányozására, hiszen ezek általában állandó nyomáson (légköri nyomáson) mennek végbe.

Az **elektrokémia főtétele** kimondja, hogy az entalpiaváltozás csak a reakcióban lévő anyagok kezdő és végállapotától függ, a reakció lefolyásától nem. Ez nyilvánvalóan következménye az első főtételnek, de történetileg előbb mondták ki. Ez azt jelenti, hogy ha ugyanahhoz a végállapothoz a kezdeti állapotból több különböző reakción keresztül is el lehet jutni, akkor az entalpiaváltozás szempontjából mindegy, hogy melyik ment végbe.

Különböző anyagok hőkapacitása

Általában kétféle hőkapacitásról szokás beszélni, az állandó nyomáson és az állandó térfogaton mérhetőről. A különböző anyagok hőkapacitásának becslése legegyszerűbben az ekvipartíció tétele segítségével tehető meg. Ez viszont már nem a fenomenologikus termodinamika tárgya, hanem a kinetikus elméleté és a statisztikus fizikáé. Ezért ezt itt nem vezetjük be külön, csak alkalmazzuk.

$$C_V = \frac{\partial E}{\partial T} \text{ és } C_p = \frac{\partial H}{\partial T}$$

Egyatomos gázok

Az ekvipartíció tételből:

$$C_V = \frac{3}{2}Nk \text{ és } C_P = \frac{5}{2}Nk$$

A kettő különbsége (**Robert-Mayer egyenlet**):

$$C_P - C_V = Nk$$

Kéttomos gázok

A kéttomos gázok esetében valamivel bonyolultabb a helyzet. Alacsony hőmérsékleten (100K alatt) a moláris hőkapacitásuk $3R/2$, vagyis mintha csak translációs mozgást végeznének, szobahőmérséklet környékén a moláris hőkapacitásuk $5R/2$, mert ekkor már a forgási szabadsági fokaik is megjelennek, magas hőmérsékleten (1000K felett) pedig $7R/2$, ekkor már ugyanis a rezgési szabadsági fokok is megjelennek. Ez a tapasztalat a klasszikus ekvipartíció tételnek ellentmond, értelmezése a kvantummechanika segítségével lehetséges. Lásd a Kvantumstatistikák-nál.

Többatomos gázok

Szobahőmérsékleten moláris hőkapacitásuk közelíthető $3R$ -ként. Általában a helyzet bonyolultabb, akár csak az előző esetben.

Szilárd anyagok

Szilárd anyagokat független 3D-s oszcillátorokként elképzelve a moláris hőkapacításra $3R$ adódik. Ez már az ekvipartíció előtt ismert tapasztalati törvény, a **Dulong-Petit szabály**. Azonban ez sem lesz mindig igaz, alacsony hőmérsékleten a kvantumos effektusok miatt a hőkapacitás csökken, 0K hőmérséklethez tartva 0-hoz tart.

Állapotegyenletek

Valamilyen összefüggés a makroszkopikus paraméterek között.

Ideális gáz

A gáz ideális, ha pontszerűek a részecskéi, és nem hatnak kölcsön egymással. Ebből kifolyólag a gáz annál ideálisabb, minél melegebb és ritkább.

$$pV = NkT = nRT$$

Van der Waals gáz/reális gáz

$(p + \frac{an^2}{V^2})(V - nb) = nRT$ ahol a, b anyagi állandók, melyek rendre a gáz kölcsönhatásait, illetve a gázcseppmérték méretét jellemzik.

Fotongáz

$$p = \frac{1}{3}aT^4$$

Speciális folyamatok ideális gázzal

Izoterm folyamat

$$dT = 0$$

$$pV = konst.$$

66/209

$$Q = -W = \int \frac{nRT}{V} dV = nrT \ln \left(\frac{p_1}{p_2} \right)$$

Izochor folyamat

$$dV = 0$$

$$\frac{p}{T} = konst.$$

$$Q = C_V(T_2 - T_1)$$

Izobár folyamat

$$dp = 0$$

$$\frac{V}{T} = konst.$$

$$W = -p(V_2 - V_1)$$

$$Q = C_p(T_2 - T_1)$$

Adiabatikus folyamat

$$\delta Q = 0$$

$$TV^{\frac{C_p}{C_V}-1} = TV^{\gamma-1} = konst.$$

$$W = \frac{p_2 V_2 - p_1 V_1}{\gamma - 1}$$

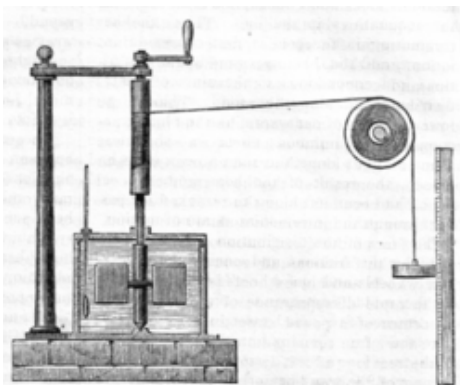
Politróp folyamat

$$pV^n = konst.$$

az előzők ennek spec. esetei

Joule-kísérlet

- Ez nem jó helyen van!



Joule egy higannyal töltött edényt lyukas falakkal részekre osztott. Az egyes térrészekben lapátok forogtak, a tengelyre helyezett tárcsa peremén ható forgatónyomaték hatására. A lapátok forgásba hozták a folyadékot, amely belső súrlódás folytán felmelegedett. Joule azt tapasztalta, hogy adiabatikus változás esetén ugyanakkora külső

66/209

munka mindig ugyanakkora T_2 hőmérsékletre melegítette fel a folyadékot T_1 -ről.

Reális gázok

Gay-Lussac kísérlet

A Gay-Lussac kísérletben egy adiabatikusan elzárt edényben lévő gázt egy elválasztó fal hirtelen kivételével hagyjuk szabadon tágulni. Ideális gáz hőmérséklete ekkor nem változna. A reális gázok viszont hűlnek.

Joule-Thomson kísérlet

A Joule-Thomson berendezés egy hőszigetelő henger, melynek két végén két mozgatható dugattyú van, középen pedig egy válaszfal. Kezdetben az egyik dugattyú a válaszfalnál van, a másik dugattyú és a válaszfal között pedig gáz van. Ezek után a gázt átprésszük a válaszfalon, a vége az a dugattyú lesz a válaszfalnál, amelyik az előbb messze volt tőle, amelyik eredetileg közel volt, az pedig távol lesz. A hőszigetelő edény miatt hőátadás nincs:

$$E_2 - E_1 = p_1V_1 - p_2V_2$$

vagyis

$$H = konst.$$

az entalpia megváltozása:

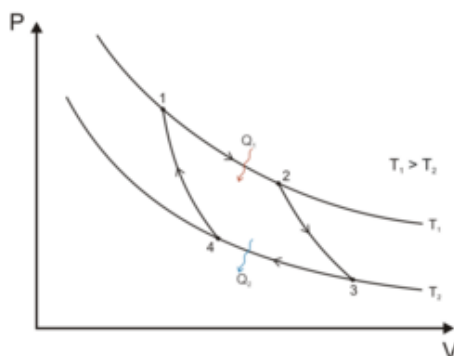
$$0 = dH = \frac{\partial H}{\partial V}dV + \frac{\partial H}{\partial T}dT$$

Innen

$$dT = -dV \frac{\frac{\partial H}{\partial V}}{\frac{\partial H}{\partial T}}$$

ez ideális gázra 0 lenne, ha viszont a gájrészecskék kölcsönhatásait is figyelembe vesszük (mint a VdW egyenlet), akkor a jelenség megérthető (a gáz melegedhet és hűlhet is).

Carnot-körfolyamat



A folyamat szakaszai:

- 1-2 izoterm
- 2-3 adiabatikus
- 3-4 izoterm
- 4-1 adiabatikus

"Elméleti" megvalósítás: 1-es hőtartály T_1 hőmérsékletű, innen vesz fel a hőerőgép Q_1 -et 2-es hőtartály $T_2 < T_1$ hőmérsékletű, ide ad le a hőerőgép Q_2 -t

A Carnot-folyamat hatásfoka:

$$\eta = \frac{-W}{Q_1} = \frac{Q_1 + Q_2}{Q_1} = \frac{Q_1 - |Q_2|}{Q_1} = \frac{T_1 - T_2}{T_1}$$

az utolsó egyenlőség ideális gázra érvényes.

Reverzibilis Carnot-folyamat: ellenkező irányba is végbemehet (hűtőgép, hőszivattyú modellje)

Az entrópia fogalma, második főtétel

A tapasztalat szerint a legtöbb termodinamikai folyamat nem megfordítható, vagyis **irreverzibilis**, ezen alapul a második főtétel.

Clausius féle megfogalmazás

Nem hozható létre olyan hőerőgép, amelyben a hő külső munkavégzés nélkül a hidegebb test felől a melegebb felé áramolna.

Kelvin féle megfogalmazás

Nem hozható semmilyen géppel sem olyan folyamat, amely során egy test hőt veszít és ez a hő 100%-os hatásfokkal munkává alakul.

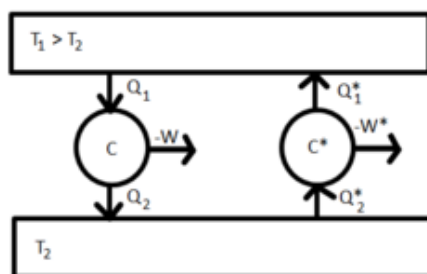
A két megfogalmazás ekvivalenciája

fordított Carnot-gép + Kelvin-gép = Clausius-gép

direkt Carnot-gép + Clausius-gép = Kelvin-gép

Következmény reverzibilis Carnot-folyamatra nézve

A második főtétel egyik fontos következménye, hogy a reverzibilis Carnot-folyamat hatásfoka anyagi minőségtől független.



Biz.: Tekintsünk egy C direkt Carnot-gépet η hatásfokkal és egy vele azonos hőtartályokból dolgozó C^* fordított Carnot-gépet $\eta^* < \eta$ hatásfokkal. A C gép a T_1 hőmérsékletű tartályból Q_1 hőt von el, $-W = \eta Q_1$ munkát végez, és $Q_2 = -(1 - \eta)Q_1$ hőt ad le a $T_2 < T_1$ hőmérsékletű tartálynak. A C^* gép beállításait válasszuk meg úgy, hogy a T_1 hőmérsékletű tartálynak éppen $Q_1^* = -Q_1$ hőt adjon le. Ekkor C^* gép $-W^* = \eta^* Q_1^* = -\eta^* Q_1$ munkát végez, és a T_2 hőmérsékletű tartályból $Q_2^* = -(1 - \eta^*)Q_1^* = (1 - \eta^*)Q_1$ hőt vesz fel. A két gép együttes munkája ekkor $-W - W^* = (\eta - \eta^*)Q_1 > 0$. Ellentmondásra jutottunk a második főtétellel, mert ez a végzett munka egyenlő e teljes hőfelvétellel. Hasonlóan beáltható, hogy $\eta^* > \eta$ sem lehetséges. Az oldhatja fel az ellentmondást, ha $\eta = \eta^*$ anyagi minőségtől függetlenül, így a korábban ideális gázokra írt hatásfok általánosan is helyes. Ezek szerint a

reverzibilis Carnot-féle körfolyamatra a **redukált hő** összege nulla:

$$\frac{Q_1}{T_1} + \frac{Q_2}{T_2} = 0$$

A termodinamikai hőmérsékleti skála

A reverzibilis Carnot-folyamat hatásfokának anyagi minőségtől való függetlensége lehetővé teszi egy anyagi minőségtől független termodinamikai hőmérsékleti skála definiálását. Két alappont(a víz forráspontja T_2 és a jég olvadáspontja T_1) ismeretében készíthetünk egy Carnot-gépet, ennek hatásfoka megmérhető Q_1 és Q_2 megméréssel. A két hőmérséklet különbségét Kelvin nyoimán 100 részre osztjuk. Ekkor:

$$\frac{T_1 - T_2}{T_1} = 0,26799$$

$$T_1 - T_2 = 100K$$

Ezek ismeretében T_2 és ismeretlen T között a Q -k megméréssel meghatározott hatásfokból meghatározható a hőmérséklet:

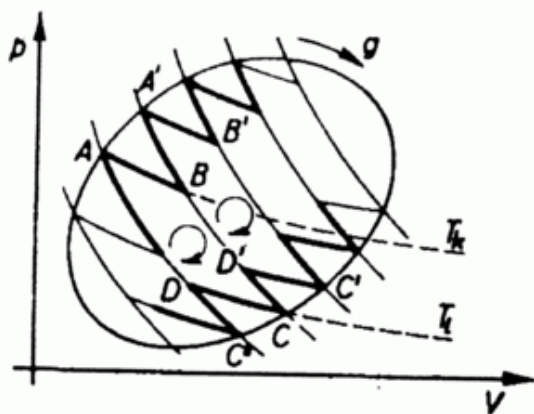
$$T = \frac{T_2}{1 - \eta}$$

Irreverzibilis Carnot-körfolyamat

Természetesen az irreverzibilis Carnot-körfolyamat hatásfoka a reverzibilisnél kisebb, következésképpen irreverzibilis Carnot-folyamatra:

$$\frac{Q_{1,irr}}{T_1} + \frac{Q_{2,irr}}{T_2} < 0$$

Clausius-egyenlőtlenség



Tetszőleges körfolyamat sok kicsi Carnot-folyamatra bontható, hiszen az ellentétes irányba mutató részek kiejtik egymást. Ebből következik, hogy tetszőleges folyamatra:

$$\oint \frac{\delta Q}{T} \leq 0$$

ahol az egyenlőség reverzibilis folyamat esetén áll fenn.

Az entrópia termodinamikai fogalma

70/209

Az, hogy $\frac{\delta Q}{T}$ mennyiség körintegrálja reverzibilis folyamatra nulla, lehetővé teszi egy új, potenciál jellegű mennyiség bevezetését. Ez az entrópia:

$$S_B = S_A + \int_A^B \frac{\delta Q_{rev}}{T}$$

vagy differenciálisan:

$$dS = \frac{\delta Q_{rev}}{T}$$

Ez a definíció csak egy additív konstans erejéig definiálja az entrópiát, az entrópiakonstans a kvantummechanika és a statisztikus fizika segítségével lesz majd kiszámítható. Ha tekintünk egy rendszert, amely A-ből B pontba irreverzibilis úton jut, illetve képzeletben jusson vissza A-ba reverzibilisen, ekkor a teljes körfolyamat is irreverzibilis:

$$\oint \frac{\delta Q_{irr}}{T} = \int_A^B \frac{\delta Q_{irr}}{T} + \int_B^A \frac{\delta Q_{rev}}{T} < 0$$

vagyis

$$S_B - S_A > \int_A^B \frac{\delta Q_{irr}}{T}$$

zárt rendszer esetén $\delta Q_{irr} = 0$ ekkor **irreverzibilis folyamatban a rendszer entrópiája csak nőhet**, az egyensúly feltétele az entrópia maximuma.

A főtétel megfogalmazása az entrópia segítségével tehát:

$$S_B - S_A \geq \int_A^B \frac{\delta Q_{irr}}{T}$$

ahol az egyenlőség reverzibilis folyamatra teljesül.

A fundamentális egyenlet

Az első főtétel:

$$dE = \delta Q + \delta W$$

A második főtétel szerint

$$\delta Q \leq TdS$$

térfogati munka esetén:

$$\delta W_V = -pdV$$

anyagtranszportoz tartozó munka:

$$\delta W_V = -\mu dN$$

A fundamentális egyenlet:

$$dE \leq TdS - pdV + \sum_i \mu_i dN_i$$

Legendre-transzformáció, termodinamikai potenciálok

Ahogy korábban az entalpia esetében láttuk, bizonyos problémákat érdemes a (belső) energia helyett más reprezentációban tárgyalni. Ez a termodinamika statisztikus alapozása szempontjából azt jelenti, hogy az egyes problémákhoz más-más sokaságot érdemes választani. A különböző reprezentációknak megfelelő termodinamikai potenciálok között matematikailag a Legendre-transzformáció teremt kapcsolatot.

Energia	E
Entalpia	H=E+pV
Szabadenergia	F=E-TS
Szabadentalpia(Gibbs-potenciál)	G=E-TS+pV

A megfelelő fundamentális egyenletek:

$$dE \leq TdS - pdV + \sum_i \mu_i dN_i$$

$$dH \leq TdS + Vdp + \sum_i \mu_i dN_i$$

$$dF \leq -SdT - pdV + \sum_i \mu_i dN_i$$

$$dG \leq -SdT + Vdp + \sum_i \mu_i dN_i$$

Szabadenergia

Izoterm-izochor egyensúlyba a szabadenergia minimális, ahogy az előző pont megfelelő egyenlőségéről leolvasható.

Izoterm esetben:

$$dF \leq \delta W$$

ahol W a rendszeren végzett munka. Így a szabadenergia a rendszerből kinyerhető maximális munkát méri. Reverzibilis izoterm folyamat esetén pedig a szabadenergia-változás jelentkezik munkaként.

Maxwell-relációk

A fundamentális egyenletek reverzibilis esetét véve(vagyis amikor egyenletek és nem egyenlőségek), a Young-tételt alkalmazva, felírható pl.:

$$\frac{\partial^2 H}{\partial p \partial S} = \frac{\partial^2 H}{\partial S \partial p}$$

vagyis:

$$\frac{\partial T}{\partial p} = \frac{\partial V}{\partial S}$$

az ilyen alakú összefüggéseket Maxwell-relációknak nevezzük. Könnyen leolvashatók a potenciálok

differenciáljaiból.

Szabadentalpia, kémiai affinitás

Izoterm-izobár egyensúlyban a rendszer szabadentalpiája minimális.

Izoterm-izobár folyamatokban a rendszeren végzett kémiai munka

$$dG \leq \sum_i \mu_i dN_i$$

Izoterm-izobár reverzibilis folyamatban a szabadentalpia-változás alakul át munkává.

Izoterm-izobár egyensúly, kémiai reakciók

Legyenek a,b különböző fázisok, az anyagmegmaradás szerint:

$$dN_i^a = -dN_i^b$$

Ekkor a $dG=0$ egyensúlyi feltétel a következőt adja:

$$\mu_i^a = \mu_i^b$$

Önként végbemenő folyamatok szabadentalpia csökkenéssel járnak $dG < 0$, eszerint a fázisból b fázisba akkor lesz átmenet, ha

$$\mu_i^a > \mu_i^b$$

Hasonló módon, az, hogy egy kémiai reakció lejátszódik-e spontán, a szabadentalpia csökkenés előjelétől függ, nem a reakcióhőtől(entalpiaváltozástól) ahogy ezt régen tévesen hitték.

Az Euler-féle összefüggés, Gibbs-Duhem reláció

A homogén függvényekre érvényes Euler-tétel szerint:

$$E = \frac{\partial E}{\partial S} S + \frac{\partial E}{\partial V} V + \sum_i \frac{\partial E}{\partial N_i} N_i$$

Innen:

$$E = TS - pV + \sum_i \mu_i N_i$$

Ezt nevezik **Euler-féle összefüggésnek**. Ennek teljes differenciálja:

$$dE = TdS + SdT - pdV - Vdp + \sum_i d\mu_i N_i + \sum_i \mu_i dN_i$$

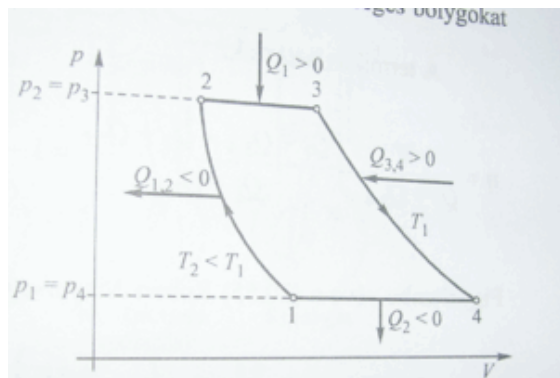
Ezt összevetve a fundamentális egyenlettel kapjuk a

$$SdT - Vdp + \sum_i d\mu_i N_i = 0$$

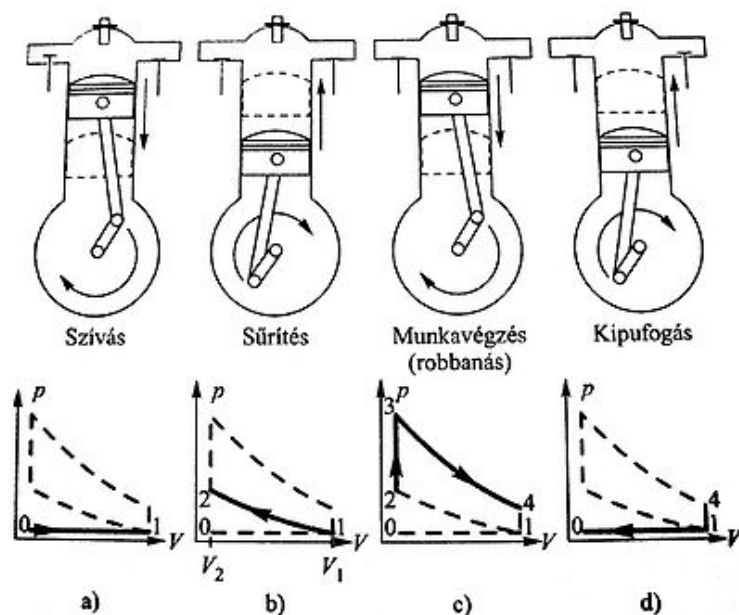
Gibbs-Duhem relációt.

Hőerőgépek

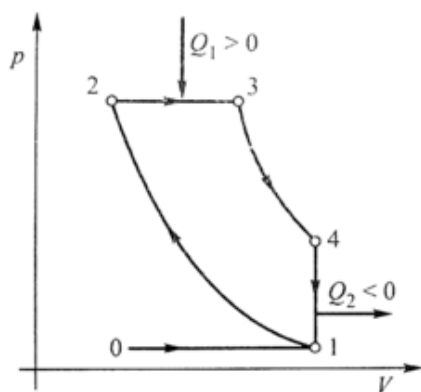
Gázturbína



Otto-motor



Dízelmotor



Harmadik főtétel

A harmadik főtétel, vagy Nernst tétel kimondja, hogy 0K-en az anyagok entrópiája 0. Nernst alacsony hőmérsékleten és állandó nyomáson mért különböző galvánelem által termelt ΔH reakcióhőt, és ΔG maximális hasznos munkát. Azt tapasztalta, hogy ezek 0K felé haladva egyre inkább megegyeznek. Planck erre támaszkodva kimutatta, hogy nemcsak ΔH és ΔG , de H és G is ugyanazon értékhez tartanak, még hozzá úgy, hogy 0K-en érintik egymást. Ezért:

74/209

$$\lim_{T \rightarrow 0} S = \lim_{T \rightarrow 0} \left(\frac{H - G}{T} \right) = \lim_{T \rightarrow 0} \left(\frac{\partial H}{\partial T} - \frac{\partial G}{\partial T} \right) = 0$$

ahol a 0/0 típusú határértékre a L'Hospital szabályt alkalmaztuk.

A harmadik főtétel két fontos **következménye**:

- 0K-en az anyagok hőkapacitása 0

$$S(T) = S(T_0 = 0K) + \int_{T_0}^T \frac{\delta Q}{T} = \int_{T_0}^T \frac{C_V dT}{T}$$

- A 0K hőmérséklet nem érhető el a gyakorlatban

C_V nagyon kicsi, ezért nagyon kis hőközlés is nagyon nagy felmelegedést okoz

Alacsony hőmérsékletek előállítása

Hűtési módszerek:

- Hűtőkeverék alkalmazása
- Párolgás
- Indirekt Carnot-gép
- Gázok lehűtése tágulással
- Adiabatus lemágnesezés

Lényeg: A külső mágneses tér eltávolításakor a termikus entrópia mágneses entrópiává válik (a mágneses momentumok rendezetlenségévé).

Fázisátalakulások termodinamikai tárgyalása

Általánosan

Először azt látjuk be, hogy egyensúly esetén a G szabadentalpia konkáv függvénye T -nek és p -nek, az F szabadenergia pedig konvex függvénye V -nek és konkáv függvénye T -nek. Az első deriváltak:

$$\frac{\partial G}{\partial T} = -S < 0$$

$$\frac{\partial F}{\partial T} = -S < 0$$

$$\frac{\partial G}{\partial p} = V > 0$$

$$\frac{\partial F}{\partial V} = -p < 0$$

A második deriváltak:

$$\frac{\partial^2 G}{\partial T^2} = -\frac{C_p}{T} < 0$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} = -\frac{C_V}{T} < 0$$

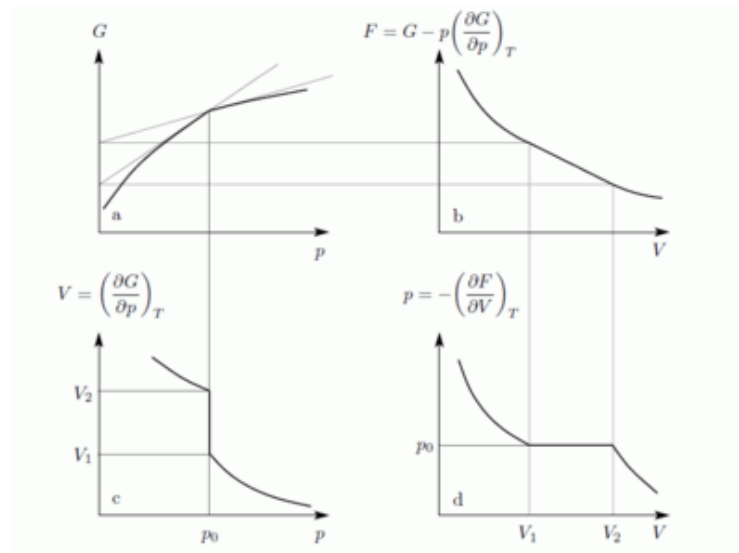
74/209

$$\frac{\partial^2 G}{\partial p^2} = V > -V\kappa_T < 0$$

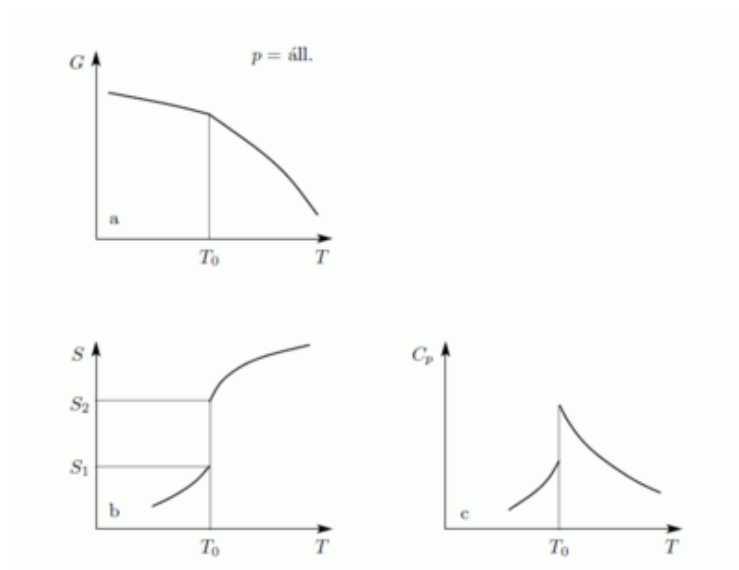
$$\frac{\partial^2 F}{\partial V^2} = \frac{1}{V\kappa_T} > 0$$

Amit be akartunk látni. G-ről és F-ről tudjuk, hogy folytonosak, de a deriváltjaik rendelkezhetnek szingularitásokkal. Először nézzük azt az esetet, amikor az első deriváltak szakadása van, vagyis a térfogat V_1 -ről V_2 -re ugrik. Tegyük fel, hogy állandó hőmérsékleten G szakadással rendelkezik p_0 -ban. G ismeretében F már megkapható, hiszen:

$$F = G - pV = G - p \left(\frac{G}{p} \right)_T$$

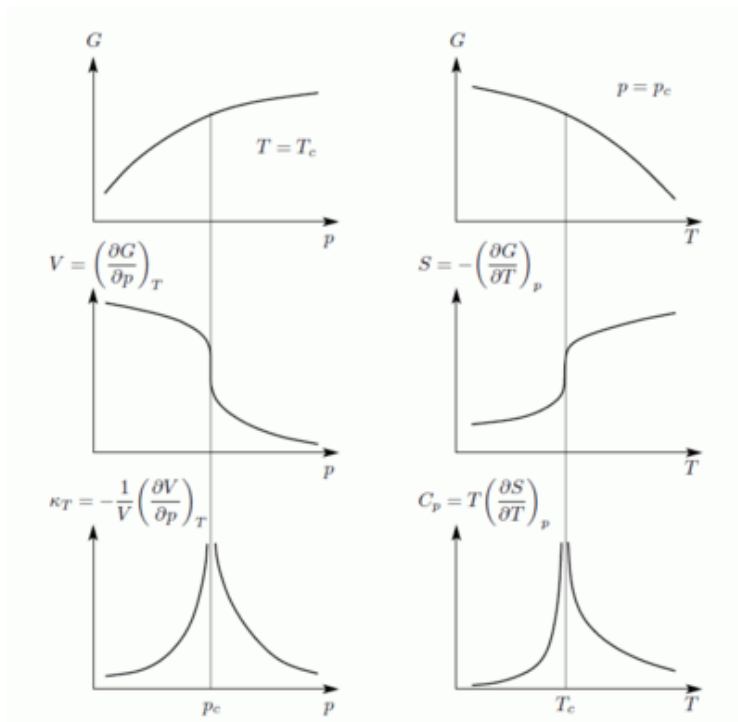


Az így kapott görbék konzisztensek az egyensúlyi feltételekkel. Ekkor a p_0 pontban a rendszer adott paraméterekkel rendelkező állapotából egy erősen különböző állapotba kerül. Általában **fázisátalakulásról** beszélünk, ha a termodinamikai potenciálok nem analitikus függvények. Ha az első derivált nem folytonos, akkor **elsőrendű fázisátalakulásról**, ha a második derivált nem folytonos, akkor **másodrendű fázisátalakulásról** beszélünk. Az előző ábrán szemléltetett fázisátalakulás elsőrendű. Általában rögzített p esetén is van olyan T_0 , ahol G-nek törése van, azaz az első derivált ugrászerűen változik. Az első derivált az entrópia, ezért T_0 hőmérsékleten $T_0(S_2 - S_1)$ **látens hő** szabadul fel/nyelődik el. Ez az elsőrendű fázisátalakulások jellemző tulajdonsága. Elsőrendű fázisátmenet a forrás, a fagyás, és a szilárd testek szerkezetváltozásainak nagyrésze.



Másodrendű fázisátalakulás esetén előfordul, hogy az első deriváltaknak törése van, vagyis a második derivált

ugrik(pl. szupravezető anyagok fajhőjében), de sokkal gyakoribb, hogy az első deriváltak függőleges érintőjű inflexió pontja van, így a második deriváltak divergálnak. Másodrendű átalakulás esetén az átalakulási pontot kritikus pontnak(illetve λ -pontnak) szokták nevezni. A már említetten kívül másodrendű fázisátalakulás például a hélium folyadék-szuperfolyadék átmenete.

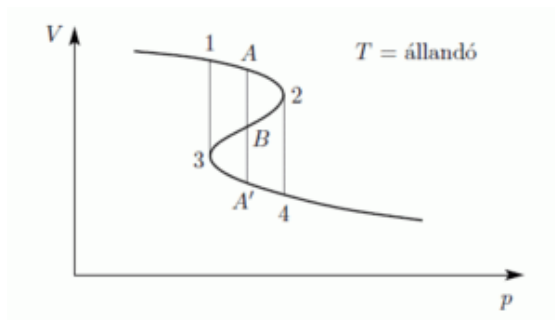


A folyadék-gáz átalakulás a VdW egyenlet alapján

A VdW egyenlet egy mol anyagra:

$$\left(p + \frac{a}{V^2}\right)(V - nb) = RT$$

Először tegyük fel, hogy az egyenlet alacsony hőmérsékleten is homogén rendszert ír le. Ekkor a V-p diagram:

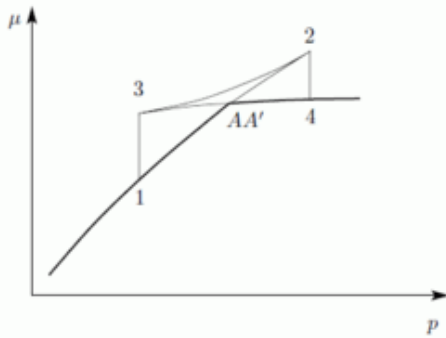


AA' szakaszt úgy definiáljuk, hogy A2B és B3A' területek megegyezzenek. A Gibbs-Duhem relációból állandó hőmérséklet esetén

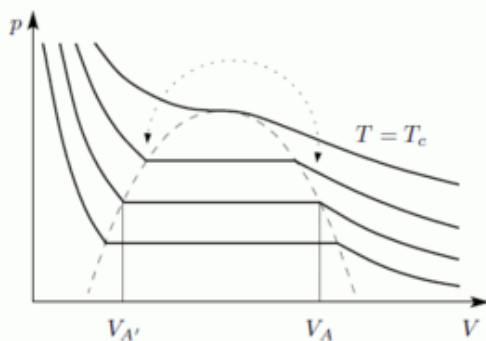
$$d\mu = vdp$$

$$\mu = \int vdp + \phi(T)$$

Az integrál vázlatosan így néz ki a felső határa függvényében:



Az egyensúly feltétele G minimuma, ezért $A23A'$ nem valósul meg, csak a vastagon húzott rész. A rendszer tehát AA' szakaszon marad egészen addig amíg A' -ig nem ér. Ekkor a rendszer nem lehet homogén, és nem is a VdW egyenlet írja le, hanem az, hogy G minimális. Ez a Maxwell-konstrukció:



Az egyenes vonalaknál tehát a rendszer nem lehet homogén, itt elsőrendű fázisátalakulás van. Megmutatható továbbá, hogy a T_C pontban a fázisátalakulás másodrendű.

Fázisegyensúlyok

Gibbs féle fázisszabály

K - kémiai egységes anyagok/komponensek száma

Sz - szabadsági fokok száma(pl.: a víz hármaspontjánál a szabadsági fokok száma 0, a vízgőz szabadsági fokainak száma 2, mert a nyomást és a hőmérsékletet lehet valamennyire változtatni anélkül, hogy új fázis keletkezne)

F - fázisok száma

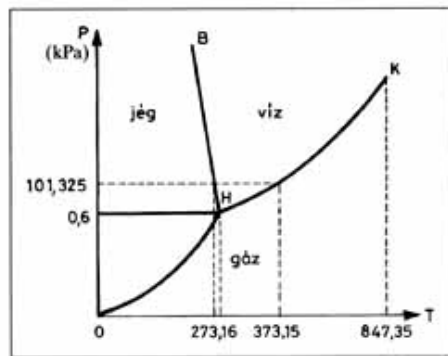
N - külső állapotjelzők száma

A Gibbs-féle fázisszabály kimondja, hogy

$$Sz + F = K + N$$

Biz.: Az egyensúlyi állapot jellemzéséhez ismernünk kell az N külső állapotjelzőt(pl. nyomás, hőmérséklet), illetve a fázisok n_i összetételét(hiszen a külső paraméterek és a kémiai potenciálok egyensúlyban egyenlőek a fázisokra). Egy fázis összetételét $K-1$ adattal(pl. $K-1$ móltörttel) adhatjuk meg. Az összetételt jellemző változók száma tehát $F(K-1)$. Az összes független intenzív változók száma $F(K-1)+N$. A kémiai potenciálok között felírható $K(F-1)$ független összefüggés. Innen $Sz=F(k-1)+N-K(F-1)=K-F+N$.

Fázisdiagramok



A képen a víz fázisdiagramja látható. Ez annyiból nem szokványos, hogy a szilárd-folyadék fázisegyensúlyt jelző görbe deriváltja negatív. Megfigyelhető a kritikus pont (**K**), amely felett nincs fázisátalakulás a folyadék és a gáz között, nem alkotnak külön fázist, ez a superkritikus folyadék tartomány.

Clausius-Clapeyron egyenlet

A Clausius Clapeyron egyenlet írja le kétfázisú rendszerek egyensúlyának feltételét. A szabadentalpia:

$$G = \mu_1(T, p)N_1 + \mu_2(T, p)N_2$$

A részecskeszám megmaradás miatt $dN_1 = -dN_2$, akkor az egyensúly $DG=0$ feltételéből visszkapjuk a korábban is említett $\mu_1 = \mu_2$ feltételt. Ebből az egy mólnyi mennyiségre vonatkozó $d\mu_i = -s_i dT + v_i dp$ Gibbs-Duhem reláció adja a Clausius-Clapeyron egyenletet:

$$(s_2 - s_1)dT = (v_2 - v_1)dp$$

$$\frac{dp}{dT} = \frac{s_2 - s_1}{v_2 - v_1} = \frac{l_{12}}{T(v_2 - v_1)}$$

ahol v moláris térfogat, s moláris entrópia, l_{12} moláris látens hő.

Záróvizsga tematika

Tételek

A klasszikus mechanika alapjai | A klasszikus mechanika elméleti tárgyalása | A relativitás elmélet alapjai
 | Egzaktnál megoldható fizika problémák | Folytonos közegek mechanikája | **Fenomenologikus termodinamika** | Elektro- és magnetosztatika, áramkörök | Elektrodinamika | Hullámegyenlet és hullámoptika | Geometriai optika és alkalmazásai | A kvantumelmélet alapvető kísérletei | A kvantummechanika elméleti háttere | Atom- és molekulaszervezet | A magfizika alapjai | A termodinamika statisztikus alapozása | Kvantumstatisztikák | Kölcsonható rendszerek, mágneses anyagok | Kristályos anyagok fizikája | Nemegyensúlyi folyamatok leírása | Az asztrofizika alapjai

A lap eredeti címe: „http://mafihe.hu/~wiki/wiki/index.php/Fenomenologikus_termodinamika”

- A lap utolsó módosítása: 2009. augusztus 19., 17:43

Elektro- és magnetosztatika, áramkörök

A TételWiki wikiből

Tartalomjegyzék

- 1 Coulomb- és Gauss-törvény, superpozíció elve, stacionárius áram.^[1]
- 2 Vezetők, szigetelők, dielektrikumok, elektromos polarizáció, magnetosztatika.
 - 2.1 Vezetők^[3]
 - 2.2 Dielektrikumok^[4]
 - 2.3 Magnetosztatika [2]
- 3 Stacionárius áram, áramköri törvények: Kirchhoff-törvények, Ohm-törvény
 - 3.1 Kirchhoff törvények
 - 3.2 Ohm-törvény
 - 3.3 Mágneses hatások
 - 3.3.1 Tekersek

Coulomb- és Gauss-törvény, superpozíció elve, stacionárius áram.^[1]

Sztatika esetén nincsen időbeli változás, tehát a Maxwell-egyenletekben ^[2] szereplő, időderiváltakat tartalmazó tagok 0-t adnak járuláskul. Így a Maxwell-egyenletek: (ahol E az elektromos térerősség, B a mágneses indukció, j az áramsűrűség, ρ az elektromos töltéssűrűség, ϵ_0 a vákuum dielektromos állandója)

$$\operatorname{div} E = \frac{\rho}{\epsilon_0}$$

$$\operatorname{rot} E = 0$$

$$\operatorname{rot} B = \frac{j}{\epsilon_0 c^2}$$

$$\operatorname{div} B = 0$$

Látható, hogy E és B nincsenek csatolva, tehát stacionárius esetben ezek függetlenek egymástól. Továbbá az elektrosztatikus tér olyan vektortér, melyben nincs rotáció, a magnetosztatikus pedig olyan, amiben nincs divergencia. Elektrosztatikában fontos, hogy E rotációja nulla, mert ekkor felírható úgy, mint egy skalármező gradiense:

$$\mathbf{E} = -\operatorname{grad} \Phi$$

Mindkét oldal divergenciáját véve, és kihasználva a másik E térre vonatkozó egyenletet, Laplace-egyenletet kapunk:

$$\Delta \Phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0}$$

Az ilyen alakú egyenletek megoldására ki van dolgozva a matematikai apparátus (Green-függvények stb.), az általános megoldás:

$$\Phi(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(r')}{|r - r'|} d^3 r'$$

80/209

A potenciál szokásos fizikai jelentése: munkavégző képesség, ahol a munka itt most az egységtöltésen értendő. Ponttöltés potenciálja a következő alakú:

$$\Phi(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q}{r}$$

Ha két ellentétes ponttöltést helyezünk egymás közelébe, azt dipólusnak nevezzük, és a dipólerősséggel jellemezzük:

$$\mathbf{p} = ed$$

itt \mathbf{d} vektor az egyik töltésből a másikba mutat. A dipólus potenciálja a következő alakú:

$$\Phi(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{p}\mathbf{r}}{r^3}$$

Az egyre több ponttöltés egymás közelébe rakásához hasonlóan meghatározható a potenciál. Ez azért jó, mert ha van egy lokalizált töltéeloszlásunk, akkor azt távolról szemlélve annak eredő potenciálja előállítható egy sorfejtésként, amely tagjai sorra egy monopólus + egy dipólus + egy kvadrupólus + ..., ami lényegesen könnyebben kezelhető, mint sok sok töltés tere. Ez az eljárás a multipól-sorfejtés.

Coulomb-törvény:

Két nyugvó töltés között fellépő erő: $\mathbf{F}_1 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1q_2}{r_{12}^2} \mathbf{e}_{12} = -\mathbf{F}_2$, ahol

\mathbf{F}_1 a q_1 töltésre ható erő, \mathbf{e}_{12} a q_2 -ből a q_1 -be mutató egységvektor, r_{12} a két töltés távolsága, és \mathbf{F}_2 a q_2 -re ható erő.

Ha több töltésünk is van, akkor bármely töltésre ható erő egyelő az összes többi töltésekből származó Coulomb-erők vektorösszegével. Ez a **szuperpozíció elve**.

A fenti Coulomb-törvényből megadható az elektromos térerősség: $E_1 = \frac{F_1}{q_1} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_2}{r_{12}^2} \mathbf{e}_{12}$

Egy tetszőleges A felülete a fluxus: $\int E_n dA = \frac{q}{\epsilon_0}$ (ha a töltés a felületen belül van)

A **Gauss-törvény** szerint pedig, ha több töltésünk van és egy adott zárt felületet nézünk, akkor az összes bent lévő töltés összegét kell figyelembe vennünk: $\int E_n dA = \frac{Q_{belső}}{\epsilon_0} = \frac{\sum_i q_i}{\epsilon_0}$

Ha a töltéseket a ρ töltéssűrűséggel írjuk le, akkor minden kis dV térfogategység ρdV töltést tartalmaz. Ezekből is megadható Q : $Q_{belső} = \int \rho dV$

Egy ilyen kis térfogatelemen a fluxus: $\text{div } E \cdot dV = \frac{\rho dV}{\epsilon_0}$, azaz $\text{div } E = \frac{\rho}{\epsilon_0}$, tehát a Gauss-tétel nem más, mint az elektrosztatika első alaptétele (az egyik Maxwell-egyenlet).

Vezetők, szigetelők, dielektrikumok, elektromos polarizáció, magnetosztatika.

Vezetők^[3]

Az elektromos vezetők - általában fémek - belsejében a delokalizált elektronok áramlása hozza létre a vezetési jelenséget. Ezt okozhatja például külső elektromos erőtér. Az így létrehozott áramot vagy mozgásban kell tartani egy

80/209

külső energiaforrással, különben amint az elektronok kisütik a kezdeti teret létrehozó forrásokat, megállnak. Tehát az elektronok addig mozognak, amíg úgy nem rendeződnek, hogy a belső elektromos tér nulla legyen. Mivel a tér belül zérus, így annak divergenciája is nulla, és a Gauss-törvény értelmében akkor a töltéssűrűségnek is 0-nak kell lennie. Tehát a töltéseknek a vezető felületén kell lenniük.

Továbbá a vezető felülete ekvipotenciális felület, a térerősségnek itt merőlegesnek kell lennie mindenhol. Ha lenne érintőleges tag, akkor az elektronok elmozdulnának a felület mentén.

Végül bebizonyítható, hogy a vezető belsejében levő (üres) üregben a térerősség szintén zérus.

Dielektrikumok^[4]

A dielektrikumok (vagy szigetelők) nem vezetnek az áramot, viszont van elektromos tulajdonságuk (pl kondenzátor kapacitása megnő, ha szigetelőt teszünk a fegyverzetek közé). Ezen anyagok tulajdonságát jellemzi - relatív dielektromos állandó (permittivitás). A vákuumnak egységnyi ez az értéke.

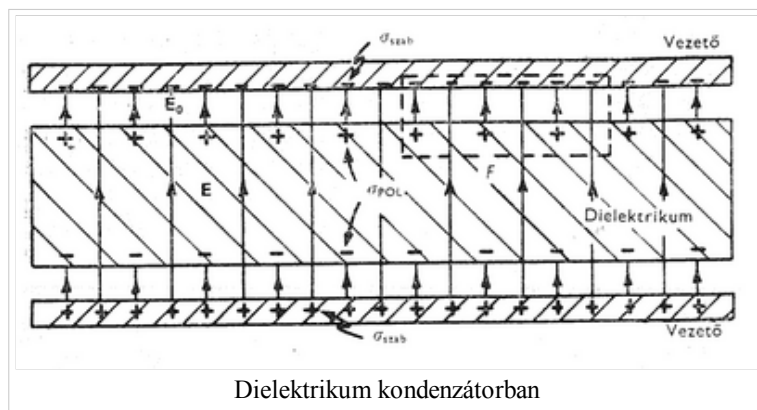
Dielektrikumok kondenzátorban:

A kondenzátor kapacitása: $C = \frac{\epsilon_0 A}{d} = \frac{Q}{U}$ (ahol A a lemezek területe, d azok távolsága)

Kísérleti tapasztalat alapján, ha dielektrikumot teszünk a kondenzátorba, akkor megnő a kapacitás.

$C = \frac{\epsilon_0 \epsilon_r A}{d}$, ahol ϵ_r a dielektrikum relatív permittivitása.

Mivel a töltések nem változnak, ezért a feszültségnek kell csökkennie. Viszont ez a potenciálkülönbség nem más, mint a fegyverzetek közötti térerősség vonalintegrálja. Ebből az következik, hogy a kondenzátoron belül csökkennie kellett a térerősségnek.



Ha alkalmazzuk a Gauss-tételt, és az ábrán látható (bekeretezett "dielektrikum") felületre integrálunk, akkor a leutóbbi következtetésünk alapján arra jutunk, hogy kisebb lesz a töltéssűrűség. (Olyan, mintha két kis kondenzátort kötnénk sorba.) Ez csak akkor lehet, ha a szigetelő egyik felén pozitív, másik felén negatív töltés indukálódik. (Vezető esetén tényleg ezt is várnánk...)

A szigetelő semleges részecskékből áll, melyek külső tér hatására indukált dipólmomentumok lesznek. (Egy elég jól használható magyarázat: az elektronokra és a protonokra más irányú erők hatnak, így tozódik a részecske, és az elektronok súlypontja nem esik egybe a protonéval egy részecskén belül. Így kialakul egy dipólus.) Ha egy dipólusban a két töltés távolsága δ (ami a **polarizációs vektor**), akkor egy atom dipólusnyomatéka: $q\delta$. Így bevezethető az egységnyi térfogatra eső *dipólmomentum sűrűség*: $\mathbf{P} = Nq\delta$ (ha a térrészben N részecske van)

Ez az érték egyenesen arányos a térerősséggel: $\mathbf{P} = \chi\epsilon_0\mathbf{E}$ ahol χ az anyagra jellemző elektromos szuszceptibilitás.

Az elektromos indukció felírása:

$$\mathbf{D} = \epsilon\mathbf{E} = \epsilon_0\epsilon_r\mathbf{E} = \epsilon_0(1 + \chi)\mathbf{E} = \epsilon_0\mathbf{E} + \chi\epsilon_0\mathbf{E} = \epsilon_0\mathbf{E} + \mathbf{P} \quad [1] \quad (\text{http://en.wikipedia.org})$$

/wiki/Electric_displacement_field)

Fontos tudni, hogy a polarizáció **NEM** azonos a megosztás jelenségével. Ez utóbbiban valódi töltések keletkeznek, és vándorolnak el a vezetőben, ezzel szemben a polarizációban csak atomi méretű töltésszétválás történik!

Számos anyag van amelyre a fenti lineáris összefüggés nem igaz, a legérdekesebbek talán az elektrétek, amelyek állandó elektromos teret tartanak fenn, hasonlóan az állandó mágnesek mágneses teréhez.

Magnetosztatika [2] (<http://en.wikipedia.org/wiki/Magnetization>)

A Magnetosztatikát leíró Maxwell-egyenletek:

$$\operatorname{rot} \mathbf{B} = \frac{\mathbf{j}}{\epsilon_0 c^2}; \quad \operatorname{div} \mathbf{B} = 0$$

\mathbf{B} a mágneses indukció vektora. Ezt a térerősséggel (\mathbf{H}) a permeabilitás μ kapcsolja össze:

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H} = \mu_0 \mu_r \mathbf{H} = \mu_0 (1 + \chi_m) \mathbf{H}$$

Az utolsó lépésben definiáltuk a mágneses szuszceptibilitást (χ_m) is, ez az adott anyag hatására megjelenő térnövekedést jellemzi. Bevezetjük továbbá \mathbf{M} -et, ez a mágneszettség, a térfogategység mágneses momentuma. Összefüggése \mathbf{H} -val:

$$\mathbf{M} = \chi_m \mathbf{H}$$

További összefüggések:

$$\mathbf{H} \equiv \epsilon_0 c^2 \mathbf{B} - \mathbf{M}$$

Jól látható az analógia \mathbf{D} és \mathbf{B} között.

- Mágneses térben mozgó töltésre erő hat: Lorentz-erő - $\mathbf{F} = q(\mathbf{v} \times \mathbf{B})$

- Nyugalmi indukció (Fluxus-szabály) [3] ([http://csega.homeip.net/wiki/index.php/Elektrodinamika#Nyugalmiindukci.C3.B3](http://csega.homeip.net/wiki/index.php/Elektrodinamika#Nyugalmiindukci%C3%B3)) :

$$U_i = \oint E ds = - \int \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} d\mathbf{f} = - \frac{\partial}{\partial t} \int \mathbf{B} d\mathbf{f} = - \frac{\partial \phi}{\partial t}, \text{ ahol } \phi \text{ a mágneses tér fluxusa.}$$

Mozgási indukciónál a Lorentz-erő alapján kell integrálnunk, de szintén visszakapjuk a Fluxus-szabályt.

Stacionárius áram, áramköri törvények: Kirchhoff-törvények, Ohm-törvény

A stacionárius áram kifejezés arra utal, hogy nincsen időbeli változása az áramnak. Ez állandó mágneses teret hoz létre maga körül. Gyakran használjuk a lineáris vezető kifejezést. Ez hasonló absztrakció, mint a ponttöltés bevezetése sztatikában. Itt arra kell gondolni, hogy adott egy görbe a térben, és ennek a görbének minden pontjában egy j áramsűrűség van, amely párhuzamos a görbe irányvektorával. Az áramot valamilyen potenciálkülönbség hajtja körben az áramkörben. Ezt valamilyen hatással (kémiai, mechanikai, stb.) létre kell hozni, és fenn kell tartani. Erre bevezetjük az elektromotoros erőt: ez azzal a térerősséggel egyenlő, amely a töltésszétválás során létrejött teret kompenzálja, ha nem folyik áram.

Kirchhoff törvények

Kirchhoff I.-II. törvénye eldől: [itt](http://csega.homeip.net/wiki/index.php/Elektrodinamika#RLC_elemek.2C_C3.A1ramk.C3.B6r.C3.B6k) (http://csega.homeip.net/wiki/index.php/Elektrodinamika#RLC_elemek.2C_C3.A1ramk.C3.B6r.C3.B6k)

83/209

- Huroktörvény: Egy zárt áramköri hurokban a feszültségek előjeles összege zérus (feltéve, hogy nincs külső mágneses tér).
- Csomópont-törvény: Az egy áramköri csomópontban összefutó áramok előjeles összege zérus.

Ohm-törvény

$$\text{Általában: } R = \frac{U}{I}$$

A lokális Ohm-törvény:

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$$

ahol \mathbf{j} az áramsűrűség, \mathbf{E} az elektromos térerősség, $\frac{1}{\rho} = \sigma$ a fajlagos vezetőképesség és ρ a fajlagos ellenállás.

Fontos megjegyezni, hogy ezt sem tartalmazzák a Maxwell-egyenletek, tulajdonképpen ez is anyagi egyenlet. Lásd a keresztteffektusoknál található levezetést.

Érdemes megjegyezni, hogy a kontinuitási egyenlet miatt az áramsűrűség normális komponense a határfelületeken egyenlő, azonban ha két olyan anyag van a két oldalon, amelyek vezetőképessége (ellenállása) más, akkor a térerősség is különböző kell, hogy legyen, és az eredmény az, hogy a felületen töltésfelhalmozódás alakul ki.

Mágneses hatások

Az egyenárammal átjárt lineáris vezető egy infinitezimális darabja által létrehozott mágneses teret a Biot-Savart-törvény adja meg. Ez egyszerűen levezethető a stacionárius állapotot leíró Maxwell-egyenletekből. Az eredmény:

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{\mathbf{j}(r') \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} d^3r'$$

Ennek egy speciális alkalmazása, amit igen sokszor használ a fizika, az egyetlen kis áramhurok által létrehozott mágneses tér. Ha a hurokban I áram folyik, akkor bevezetjük a mágneses momentumot (hasonló az elektromos dipólhoz):

$$\mathbf{m} = I \int d\mathbf{f}$$

ahol az áramot a hurok által behatárolt felület nagyságával szoroztuk meg, az irányt a jobbkéz szabály adja. Ennek segítségével a kis hurok mágneses tere:

$$\mathbf{B} = \frac{\mu}{4\pi} \left(\frac{3(\mathbf{m}\mathbf{r})\mathbf{r}}{r^5} \right) - \frac{\mathbf{m}}{r^3}$$

Az így létrehozott térben a töltésekre természetesen hat a Lorentz-erő. Ennek következménye az is, hogy két párhuzamos lineáris vezető között erőhatás ébred, ha bennük áram folyik. Ennek mértéke:

$$\mathbf{F} = I\mathbf{L} \times \mathbf{B}$$

Ha egy irányba folyik az áram a két vezetőben, akkor vonzzák egymást, ha ellentétesen, akkor taszítják egymást.

Tekercsek

Ha feltekerünk spirálba egy vezetőt, és áramot folytatunk át rajta, akkor az egyes hurkok mágneses tere összeadódik, továbbá jó közelítéssel a tekercsen belül homogén terünk lesz, ami a szélek felé egyre jobban leromlik. A létrehozott \mathbf{B} tér egyenesen arányos az áramerősséggel, és a menetszámmal (n).

Hivatkozások:

1. ↑ Feynman - Mai Fizika 5: 56. Elektrosztatika
2. ↑ Teljes Maxwell-egyenletek: itt
3. ↑ Feynman - Mai Fizika 5: 57.9 Elektrosztatika
4. ↑ Feynman - Mai Fizika 5: 62. Dielektrikumok

Záróvizsga tematika

A klasszikus mechanika alapjai | A klasszikus mechanika elméleti tárgyalása | A relativitás elmélet alapjai | Egzaktnál megoldható fizika problémák | Folytonos közegek mechanikája | Fenomenologikus termodinamika | **Elektro- és magnetosztatika, áramkörök** | Elektrodinamika | Hullámegyenlet és hullámoptika | Geometriai optika és alkalmazásai | A kvantumelmélet alapvető kísérletei | A kvantummechanika elméleti háttere | Atom- és molekulaszervezet | A magfizika alapjai | A termodinamika statisztikus alapozása | Kvantumstatisztikák | Kölcsönható rendszerek, mágneses anyagok | Kristályos anyagok fizikája | Nemegyensúlyi folyamatok leírása | Az asztrofizika alapjai

Tételek

A lap eredeti címe: „[http://mafihe.hu/~wiki/wiki/index.php/Elektro-_ %C3%A9s_magnetosztatika,_ %C3%A1ramk %C3%B6r%C3%B6k](http://mafihe.hu/~wiki/wiki/index.php/Elektro-_%C3%A9s_magnetosztatika,_%C3%A1ramk%C3%B6r%C3%B6k)”

- A lap utolsó módosítása: 2009. augusztus 19., 17:58

Elektrodinamika

A TételWiki wikiből

Tartalomjegyzék

- 1 A Maxwell-egyenletek
- 2 Indukció
 - 2.1 Nyugalmiindukció
 - 2.2 Mozgásiindukció
 - 2.3 Kölcsonős- és önindukció
- 3 Az elektromágneses tér makroszkópikus mennyiségei
 - 3.1 Energia
 - 3.2 Impulzus
 - 3.3 Impulzusmomentum
- 4 RLC elemek, áramkörök
 - 4.1 Rezgőkör
 - 4.2 Transzformátor
- 5 Váltakozóáram
- 6 Elektromos áram a mindennapokban
 - 6.1 Előállítás
 - 6.2 Szállítás
 - 6.3 Felhasználás
 - 6.4 Motorok

A Maxwell-egyenletek

A teljes Maxwell-egyenletek differenciális alakban a következők:

$$\begin{aligned} c^2 \operatorname{rot} B &= \partial_t E + \frac{j}{\epsilon_0} \\ \operatorname{div} E &= \frac{\rho}{\epsilon_0} \\ \operatorname{rot} E &= -\partial_t B \\ \operatorname{div} B &= 0 \end{aligned}$$

Az első egyenlet az áram mágneses hatását fejezi ki: azaz mágneses hatást a változó elektromos tér, illetve a folyó áram kelt. Az második egyenlet azt fejezi ki, hogy az elektromos tér forrásai a töltések. A harmadik egyenlet szerint a változó mágneses tér elektromos teret kelt. A negyedik egyenlet szerint a mágneses térnek nincs töltése (nincs mágneses monopólus). Az egyenletek kissé variálhatóak kihasználva, hogy:

$$c^2 = \frac{1}{\epsilon\mu}$$

Ezek az egyenletek térrészenként érvényesek. Megfogalmazhatóak a fenti egyenletek integrális alakban is, azok a határokon is leírják a térmennyiségeket, míg a differenciálisokhoz ezeket külön hozzá kell kapcsolni. Továbbá a Maxwell-egyenletek nem tartalmazzák az anyagi hatásokat, azokat külön egyenletekkel kell csatolni, amelyek **E** és **D** továbbá **B** és **H** közötti kapcsolatokat írják le. Ezen felül a Lorentz-erő sem vezethető le klasszikusan a fentiekből:

$$F = q(E + v \times B)$$

Az egyenletek implicite tartalmazzák a töltésekre vonatkozó kontinuitási egyenletet, amit például az első egyenlet

divergenciájából vezethetünk le:

$$\partial_t \rho + \operatorname{div} j = 0$$

Indukció

Stacionárius áram közelítés: feltesszük, hogy nincs jelen változó elektromos tér, így az ennek megfelelő tag hiányzik a harmadik Maxwell-egyenletből.

Nyugalmiindukció

Az időben változó mágneses tér elektromos teret kelt. A harmadik Maxwell-törvény integrális alakját használva:

$$U_i = \oint E ds = - \int \frac{\partial B}{\partial t} df = - \frac{\partial}{\partial t} \int B df = - \frac{\partial}{\partial t} \Phi$$

Ahol U az indukált feszültség, Φ a mágneses fluxus.

Mozgásiindukció

A mágneses térben mozgó vezetőben áram indukálódik a Lorentz-erő miatt.

Ha veszünk egy mágneses térben levő téglalap alakú áramkört, amelynek egyik éle L hosszúságú, és ezt a részét mozgatjuk v sebességgel, így a másik él hossza $x(t)$ szerint változik. Ekkor ez áramot tud hajtani az áramkörben:

$$U_i = \oint (v \times B) ds = vBL = B \frac{d}{dt} x(t)L$$

Itt felismerhetjük az áramkör keresztmetszetét, így voltaképpen ismét a fluxusváltozás jelenik meg:

$$U_i = - \frac{\partial}{\partial t} \Phi$$

Kölcsönös- és önindukció

Vegyünk egy áramkörnek egy hurkát (k -dikát) hurkot, és integráljuk körbe az elektromos térerősséget. Kirchhoff huroktörvénye miatt az összes feszültség nulla lenne, ha nem lenne változó mágneses tér. Azonban ha ez mégis jelen van, akkor az megjelenik a jobboldalon:

$$\oint E ds = - \int \partial_t B df$$

A baloldalra beírjuk az Ohm-törvényt, és az elektromotoros erőt, a jobboldalra a vektorpotenciált:

$$\oint \frac{j}{\sigma} ds - \oint E' ds = - \partial_t \int \operatorname{rot} A df$$

Mivel a teljes körre integrálunk, az Ohm-törvényt beírhatjuk a klasszikus formában az áramerősséggel kifejezve, az elektromotoros erőt pedig az összes potenciáljával helyettesítjük. A jobboldalon alkalmazzuk a Stokes-tételt, így a felületi integrált vonalintegrálra írjuk át:

$$I_k \cdot R_k - E = - \partial_t \oint A ds$$

A jobboldalra beírhatjuk a lineáris vezető vektorpotenciáljának képletét:

87/209

$$A(r) = \frac{\mu_0}{4\pi} \cdot I \cdot \int \frac{ds'}{|r - r'|}$$

Visszaírva:

$$I_k \cdot R_k - E_k = -\frac{\mu_0}{4\pi} \partial_t \sum_{i=1}^n I_i \int \int \frac{ds_k ds'_i}{|r_k - r'_i|}$$

Az integrálokra a konstansokkla egybeolvasztva bevezetjük az indukciós együtthatót, L-et:

$$I_k \cdot R_k - E_k = -\sum_{i=1}^n \dot{I}_i L_{ik}$$

Amennyiben L-nek a két indexe azonos, akkor az áramkörben folyó áram által keltett mágnesestérnek az áramkörre való visszahatásának együtthatójáról, azaz az önindukciós együtthatóról beszélünk. Ellenkező esetben kölcsönös indukcióról van szó, azaz egy másik áramkör részben folyó változó áram kelt ebben az áramkörben feszültséget a mágneses hatása révén.

Az elektromágneses tér makroszkópikus mennyiségei

Energia

Tekintsük első és a harmadik Maxwell-egyenlet. Az elsőt szorozzuk meg $-\epsilon_0 E$ -vel, a harmadikat $\epsilon_0 c^2 B$ -vel, adjuk össze, és integráljuk ki térfogatra:

$$-\frac{d}{dt} \int \left[\frac{\epsilon_0}{2} E^2 + \frac{\epsilon_0 c^2}{2} B^2 \right] dV = \int E j dV - \epsilon_0 c^2 \int \operatorname{div}(B \times E) dV$$

Itt kihasználtuk a jobboldalon, hogy $\operatorname{div}(B \times E) = B \operatorname{rot} E + E \operatorname{rot} B$. A baloldali integrandus az energiasűrűség (jel.: u). A jobboldali első tag tartalmazza a konvektív töltéseken végzett munkát, a Joule-hőt, a telep által szolgáltatott energiát. A második tag a tekintett térfogat felületén átáramlott elektromágneses energiát jelenti, például hullámok formájában. Ez alapján definiáljuk a Poynting-vektort, másnéven energiasűrűség-vektort:

$$S = \epsilon_0 c^2 E \times B$$

Impulzus

Definiálhatjuk az impulzussűrűséget is:

$$g = \epsilon_0 (E \times B)$$

Ha az impulzus megmaradást is fel akarjuk írni:

$$\frac{d}{dt} (P_{mechanikai} + P_{mezo}) = \oint_S \mathbf{T} n df$$

Itt S egy felület, amely egy V térfogatot határol, n a felület kifelé mutató normálvektora, a jobboldalon felületi integrál van az S felületre, az integrandusban a Maxwell-féle feszültségtenzor jelent meg (részletesebben lásd itt (http://en.wikipedia.org/wiki/Electromagnetic_stress-energy_tensor)). A $\mathbf{T}n$ szorzat az S felület egységnyi részén egységnyi idő alatt a V térfogatba áramló impulzus. Az így definiált impulzus segítségével értelmezhető egyszerűen például Lebegyev fénynyomásos kísérlete.

Impulzusmomentum

Definiálhatjuk az elektromágneses mező impulzusmomentum-sűrűségét is:

87/209

88/209

$$\mathbf{m} = \epsilon_0 \mathbf{r} \times (\mathbf{E} \times \mathbf{B})$$

Az impulzuszórántó fluxusa megint a Maxwell-feszültségtenzorról fejezhető ki:

$$\mathbf{M} = \mathbf{T} \times \mathbf{x}$$

Vigyázat: \mathbf{M} már harmadrendű tenzor! Komponensenként kiírva:

$$M_{ijk} = T_{ij}x_k - T_{ik}x_j$$

RLC elemek, áramkörök

RLC körnek nevezzük az olyan áramkört, amelyben ellenállás, induktivitás, és kapacitás is található. Az induktivitásban az áramerősség nem változhat ugrásszerűen, a kondenzátoron a feszültség. Általánosan a következő differenciál egyenletet írhatjuk fel:

$$L \frac{d^2 Q}{dt^2} + R \frac{dQ}{dt} + \frac{Q}{C} = \epsilon$$

A jobboldalon 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 áramkörökre fontosak továbbá a Kirchoff-törvények, amelyek nem önállóak, levezethetőek a Maxwell-egyenletekből.

- Huroktörvény: Egy zárt áramköri hurokban a feszültségek előjeles összege zérus (feltéve, hogy nincs külső mágneses tér).
- Csomópont-törvény: Az egy áramköri csomópontban összefutó áramok előjeles összege zérus.

Rezgőkör

Tekintsünk egy RL-kört, amelyet egy periodikus feszültségforrás táplál. Mivel most nincs kapacitás, az előző pontban felírt differenciálegyenletből elhagyható a kapacitások tag, és átírható az egyenlet áramerősségre, így csupán egy elsőrendű egyenletet kell megoldanunk. A megoldásra egy transziens lecsengő, és egy stacionárius tagot kapunk. Mivel az áramkörökben gyakorlati szempontból igen gyorsan beáll az egyensúly, elég ha a stacionárius vizsgálgjuk. Ebből látható, hogy a megoldás áramerősség frekvenciája ugyanakkora, mint a feszültségforrásé, azonban ahhoz képest késik:

$$I(t) = I_0 \cos(\omega t - \delta)$$

$$I_0 = \frac{\epsilon_0}{\sqrt{R^2 + \omega^2 L^2}}$$

$$\delta = \arctg \frac{\omega L}{R}$$

Érdemes megjegyezni, hogy a Joule-hő összefügg a rezgőkör paramétereivel:

$$\bar{\epsilon} I = \frac{\epsilon_0 I_0}{2} \cos \delta$$

Általános RLC körben azt érdemes tudni, hogy az áramkörbe tett kapacitás hatására az áramerősség sietni, induktivitás hatására késni fog az elektromotoros erőhöz képest. Az általános formula:

$$\delta = \arctg \frac{\omega L - \frac{1}{\omega C}}{R}$$

Transzformátor

88/209

A transzformátor feltalálását Nikola Tesla nevéhez kötik. A transzformátorban két induktíven csatolt tekercs van, azaz a bármelyik tekercs mágneses fluxusa átmegy mindkét tekercsen. Az eredmény az, hogy ha váltakozó feszültséggel tápláljuk meg az egyik tekercset, akkor az változó mágnesesteret kelt, az pedig a másik tekercsben változó áramot indukál. A váltakozás frekvenciája **ugyanaz** mindkét áramkörben! Egyedül az áramerősségek értékeiben lesz különbség. A szekunder és primer körök közötti amplitúdó aránya:

$$\frac{I_2}{I_1} = \frac{\omega L_{12}}{\sqrt{R_2^2 + \omega^2 L_{22}^2}}$$

Ahol L_{12} a két áramkör kölcsönös indukciós együtthatója, L_{22} a szekunder tekercs önindukciós együtthatója, R_2 a szekunder oldal ohmikus ellenállása, azaz a nevezőben a második kör impedanciája szerepel. Tehát az átfolyó áramot a kölcsönös indukció erőssége és a kör impedanciájának mértéke szabja meg. Fellép egy fáziskésés is a két tekercs között, ennek mértéke:

$$\operatorname{tg}(\delta_2 - \delta_1) = -\frac{R_2}{\omega L_{22}}$$

Váltakozóáram

Mivel a Joule-hő veszteség az áramnak négyzetes függvénye, ezért az elektromos áram szállítását célszerű minél kisebb áramerősséggel tenni, ez az állandó ellenállás mellett nagy feszültséget jelent. Azonban a felhasználás során általában kisméretűre és nagy áramra van szükség. Ezért az elektromos távvezetékek két végén transzformátorok vannak, amelyek a feszültséget (áramot) konvertálják. Az egész rendszer tradicionálisan a XIX. század végén alakult ki. Az egész eljárás csak aránylag nagy távolságokon éri meg, kis távolságokra, és speciális helyeken (például tengeri kábelekben) nagyfeszültségű egyenáramot használnak szállításra.

Elektromos áram a mindennapokban

Előállítás

Az elektromos áramot a kisszámú félvezető elven működő naperőműtől eltekintve valamilyen forgómozgásból nyerik, ahol ezt a mozgást periodikusan változó mágnesestérrel elektromos áram indukálására használják fel. A kezdeti forgómozgást például a széllel meghajtott lapátkerék, vízzel meghajtott turbina, vagy gőzzel meghajtott turbina szolgáltathatja. Az első két esetben a mozgó közeg természetesen rendelkezésre áll. A gőzzel hajtott esetben a gőz előállításához valamilyen hőforrás szükséges, ez vagy valamilyen éghető anyag felhasználásával (tőzeg, lignit, kőszén, olaj, gáz), vagy atomenergiával történik. A felsorolt tüzelőanyagok korlátossága miatt egyre nagyobb figyelem fordítódik ezek kiváltására megújuló vagy alternatív (fúziós erőmű) energiatermelési eljárások alkalmazásával.

Szállítás

Lásd feljebb.

Felhasználás

Igen sokrétű, mivel mind mágneses, kémiai, biológiai hatása van, ezenfelül könnyen és egyszerűen szabályozható, és sok nagyságrenden keresztül megbízhatóan alkalmazható.

Motorok

A motorok az áram mágneses hatását alkalmazzák forítva, mint a generátorok, itt a bejövő áram hatására a mágneses forgórész kerül mozgásba. Megkülönböztetünk egyenáramú és váltóáramú motorokat, valamint léptető motorokat. Különböző alkalmazásokra és különböző árra különböző típusú motorokat alkalmaznak. lásd: itt (http://en.wikipedia.org/wiki/Electric_motor#Comparison_of_motor_types) .

90/209

Tételek A klasszikus mechanika alapjai | A klasszikus mechanika elméleti tárgyalása | A relativitás elmélet alapjai | Egzaktul megoldható fizika problémák | Folytonos közegek mechanikája | Fenomenologikus termodinamika | Elektro- és magnetosztatika, áramkörök | **Elektrodinamika** | Hullámegyenlet és hullámoptika | Geometriai optika és alkalmazásai | A kvantumelmélet alapvető kísérletei | A kvantummechanika elméleti háttere | Atom- és molekulaszervezet | A magfizika alapjai | A termodinamika statisztikus alapozása | Kvantumstatisztikák | Kölcsonható rendszerek, mágneses anyagok | Kristályos anyagok fizikája | Nemegyensúlyi folyamatok leírása | Az asztrofizika alapjai

A lap eredeti címe: „<http://mafihe.hu/~wiki/wiki/index.php/Elektrodinamika>”

- A lap utolsó módosítása: 2009. augusztus 19., 17:59

Hullámegyenlet és hullámoptika

A TételWiki wikiből

Tartalomjegyzék

- 1 Az elektromágneses hullámegyenletek
 - 1.1 Származtatás a Maxwell-egyenletekből
 - 1.2 A hullámegyenlet megoldásai
 - 1.2.1 A síkhullám megoldás
 - 1.2.2 A gömbhullám megoldás
- 2 Elektromágneses hullámok előállítása, a Hertz-kísérlet
- 3 Hullámok terjedése, Doppler-effektus
- 4 Hullámok jellemzői
- 5 Retardált és avanszált potenciálok
- 6 Hullámvezetők, és üregrezonátorok
- 7 Antennák, dipólsugárzás
- 8 Szóródás
 - 8.1 Szóródás szabad töltésen
 - 8.2 Szóródás töltött gömbön, avagy miért kék az ég
- 9 Hullámoptika, polarizáció
 - 9.1 Kristályoptika
 - 9.2 Törés és visszaverődés
 - 9.3 Fresnel-formulák
 - 9.4 Interferencia
- 10 Difrakció
 - 10.1 Huygens-Fresnel-elv
- 11 Fourier-optika
- 12 Nemlineáris optika alapjai
 - 12.1 Nemlineáris, elektrooptika

Az elektromágneses hullámegyenletek

A változó elektromos tér, mint tudjuk, mágneses teret kelt, a változó mágneses tér elektromos teret kelt. Ebből érezhető, hogy ez egy önmagát fenntartó folyamat tud lenni, amelyet az időben tovaterjedő változás jellemez.

Származtatás a Maxwell-egyenletekből

Ismertek a teljes Maxwell-egyenletek:

$$\begin{aligned} c^2 \operatorname{rot} B &= \partial_t E + \frac{j}{\epsilon_0} \\ \operatorname{div} E &= \frac{\rho}{\epsilon_0} \\ \operatorname{rot} E &= -\partial_t B \\ \operatorname{div} B &= 0 \end{aligned}$$

Vegyünk egy töltés és árammentes térrészt. Ekkor az első egyenlet jobboldalának második tagja, és a második egyenlet jobboldala nulla lesz. Osszuk le az átalakított első egyenletet c^2 -el, és vegyük a rotációját. A baloldal ekkor:

$$\operatorname{rot} \operatorname{rot} B = \operatorname{grad} \operatorname{div} B - \operatorname{div} \operatorname{grad} B = -\Delta B$$

92/209

Itt kihasználtuk a negyedik Maxwell egyenletet, valamint egy vektoranalitikai azonosságot. A rotációt a jobboldalon is elvégezve a következő egyenletet kapjuk (figyelem, a rot helyszerinti deriválást tartalmaz, az időderiválással felcserélhető!):

$$-\Delta B = \frac{1}{c^2} \partial_t \text{rot} E$$

Itt behelyettesíthetjük a harmadik Maxwell-egyenletet, és ekkor homogén hullámegyenletet kapunk B-re:

$$\Delta B - \frac{1}{c^2} \partial_t^2 B = 0$$

Teljesen analóg módon levezethető E-re is:

$$\Delta E - \frac{1}{c^2} \partial_t^2 E = 0$$

A hullámegyenlet megoldásai

Két alapvetően különböző megoldása van a hullámegyenleteknek: **síkhullám** és **gömbhullám**.

A síkhullám megoldás

Ez a megoldás azért síkhullám megoldás, mert a hullámhoz tartozó térmennyiség egy sík mentén veszi fel adott pillanatban az azonos értékeit. Tehát ezeken a helyeken a térmennyiség argumentuma ugyan az. Tehát az általános alakú hullámegyenlet és síkhullám megoldása a következő:

$$\Delta f - \frac{1}{c^2} \partial_t^2 f = 0$$

$$f(\mathbf{r}, t) = f\left(t \pm \frac{\mathbf{n}\mathbf{r}}{c}\right)$$

Természetesen a megoldás egy konstans amplitúdával megszorozható tetszés szerint. Belátható, hogy az időszerinti második derivált megegyezik f argumentum szerinti második deriváltjával (itt kihasználjuk, hogy n egységnyi hosszú), továbbá ez valóban kielégíti a hullámegyenletet. Ha a megoldást, a térmennyiségekre felírva a Maxwell-egyenletekbe visszaírjuk, akkor kiderül, hogy **n**, **E**, **B**, páronként merőleges, azaz az elektromágneses hullám transzverzális.

A gömbhullám megoldás

$$\Delta f - \frac{1}{c^2} \partial_t^2 f = 0$$

$$f(\mathbf{r}, t) = f\left(t \pm \frac{r}{c}\right) \cdot \frac{1}{r}$$

Ekkor a megoldást polárkoordinátákban érdemes felírni, ennek megfelelően a Laplace-operátort is polárkoordinátás alakban kell tekinteni (bár abból csak a sugárfüggő részre van szükségünk).

Elektromágneses hullámok előállítása, a Hertz-kísérlet

Maxwell csak elméletileg jósolta meg az elektromágneses hullámok létezését, azonban Hertz-nek sikerült kísérletileg is kimutatnia őket. A kísérletekben Hertz dipólantennákat használt adóként, vevőként, illetve szikraközökkel láthatóvá is tudta tenni a hullámok által a forrástól távolabb okozott változásokat.

A dipólantenna azóta is alapvető eleme a hullámtechnikának. Ez tulajdonképpen egy váltóárammal táplált szétnyitott kondenzátor. A benne oda-vissza mozgó töltések keltik az elektromágneses hullámokat.

92/209

Hullámok terjedése, Doppler-effektus

Mint láttuk a gömbhullám megoldásban $1/r$ -es lecsengés van jelen, ebből kifolyólag a szállított energia (amit a Poynting-vektor ad meg: $S = E \times B$) $1/r^2$ -es lecsengést mutat.

A klasszikus hullámjelenségekhez hasonlóan az elektromágneses hullámoknál is frekvenciaeltolódás lép fel ha a forrás és az észlelő egymáshoz képest mozognak. Ha közelednek egymás felé, akkor az észlelt frekvencia nagyobb, ha távolodnak, akkor kisebb a kibocsájtottnál.

Hullámok jellemzői

A hullámokat két fontos jellemző fizikai mennyiség jellemzi a fázis és a csoportsebesség. A definíciók:

$$v_f = \frac{\omega}{k}$$

$$v_{cs} = \frac{\partial \omega}{\partial k}$$

Az elektromágneses hullámok **csoportsebességére** kell teljesülnie annak, hogy az adott közegbeli fénysebességgel terjednek. A fázissebesség ettől igen eltérő is lehet, akár több is, mint a csoportsebesség. Igen szemléletes az ábra itt (http://en.wikipedia.org/wiki/File:Wave_group.gif) !

A fenti jellemzők csak kevés információt adnak a hullámok terjedéséről. A közeg törésmutatója függhet a frekvenciától, így a terjedési sebességek is változhatnak attól függően, hogy milyen frekvenciájú hullámot vizsgálunk. A hullám terjedését homogén közegben legjobban az $\omega - k$ összefüggés, másnéven a diszperziós függvény jellemzi. Ez határozza meg, hogy adott hullámszámú hullám milyen frekvenciájú. Ha az anyag nem homogén (anizotrop), akkor a diszperzió lehet irányfüggő is.

Fontos továbbá, hogyha a részecskéket is hullámként kezeljük de Broglie hipotézise értelmében akkor a diszperziós-reláció az energia és az impulzus kapcsolataként jelenik meg.

Retardált és avanszált potenciálok

Tekintsük a negyedik Maxwell-egyenletet. Ha egy térmennyiség divergenciája nulla, akkor az valamilyen másik térmennyiség rotációjaként írható fel (legalábbis gömbbel topológiailag izomorf struktúrán, R^3 -ban). Ezért bevezetjük az \mathbf{A} vektorpotenciált:

$$\mathbf{B} = \text{rot} \mathbf{A}$$

Ha ezt visszairjuk a harmadik Maxwell-egyenletbe, akkor abban két rotáció fog szerepelni, melyeket összevonhatunk, így:

$$\text{rot} \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) = 0$$

Ha egy vektormező rotációja nulla, akkor az a mező felírható egy skalártér negatív gradienseként, ezért bevezetünk egy skalárpotenciált is:

$$\mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -\text{grad} \Phi$$

Ez átrendezve:

$$\mathbf{E} = -\text{grad} \Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

A két potenciált együtt elektromágneses potenciáloknak nevezzük. Megjegyzendő, hogy ezekben van egy mértékszabadság a következő transzformációra:

$$\begin{aligned} A' &= A + \text{grad}\chi \\ \Phi' &= \Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t} \end{aligned}$$

Azaz, ugyanahhoz az elektromágneses B és E térerősségekhez tetszőleges χ tartozhat, másképp fogalmazva a Maxwell-egyenletek a fenti mértéktranszformációra invariánsak. A bevezetett potenciálokat a töltés és áramelrendezés meghatározza. Mivel a fenti mértékválasztás tetszőleges, ezért célszerű olyan mértéket választani, ahol a potenciálokat meghatározó egyenletek a legegyszerűbbek. Erre a Lorentz-feltétel alkalmas (ennek nincs fizikai jelentése, csak a számolást teszi egyszerűbbé):

$$\text{div} A + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \Phi}{\partial t} = 0$$

Ekkor a következő differenciálegyenletek vezethetők le a Maxwell-egyenletekből:

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} &= -\frac{\mathbf{j}}{\epsilon_0 c^2} \\ \Delta \Phi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} &= -\frac{\rho}{\epsilon_0} \end{aligned}$$

Itt \mathbf{i} az áramsűrűség, ρ a töltéssűrűség. Az ilyen típusú differenciálegyenleteket d'Alembert típusúaknak nevezzük, belátható, hogy megoldásuk:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(r, t) &= \int \frac{\mathbf{i}\left(r', t - \frac{|r-r'|}{v}\right)}{4\pi\epsilon_0 c^2 |r-r'|} dV' \\ \Phi(r, t) &= \int \frac{\rho\left(r', t - \frac{|r-r'|}{v}\right)}{4\pi\epsilon_0 |r-r'|} dV' \\ v &= \frac{c}{\sqrt{\epsilon\mu}} \end{aligned}$$

Ezek a formulák úgy értelmezhetőek, hogy egy adott \mathbf{r} pontban mérhető potenciálok értékeit a tér többi pontjában található töltés- és áramelrendezés határozza meg, DE nem az ugyanazon pillanatbeli, hanem a közegbeli fénysebesség szerinti idővel korábbi állapot által létrehozott. Másképp megfogalmazva, ha egy töltést valahol megmozdítunk, akkor annak hatása, csupán a közegbeli fénysebességgel terjed, ezért a változás késve észlelhető csak távolabbról. Az itt felírt, ilyen tulajdonságú potenciálokat **retardált potenciáloknak** nevezzük. A d'Alembert egyenleteknek egy másik formális megoldását kapjuk akkor is, ha a fenti egyenletekben az időfüggésben megfordítjuk a pozitív előjelet negatívra. Ezek az **avanzsált potenciálok**. Ebben az esetben az adott pillanatbeli potenciálokat a *későbbi* töltés és áramelrendezés határozná meg, ez fizikailag azonban általában nem releváns megoldás.

Hullámvezetők, és üregrezonátorok

Mint tudjuk a vezetők belsejében az elektromos és mágneses térerősség nulla, továbbá a térerősség a felületen merőlegesen fog mutatni (feltettük, hogy a határ másik felén szigetelő van). Ha valamilyen változás van, és azt a töltések követni tudják, akkor úgy tekinthetjük őket, hogy olyan áramokat és töltéselrendezést hoznak létre, hogy a fentiek továbbra is teljesüljenek. Az ismert térerősségek a felületekben exponenciális lecsengést mutatnak. Az erre jellemző karakterisztikus hossz a behatolási mélység, ez függ a változás frekvenciájától, és a vezetőképességtől is. Az időben változó terek azonban kicsi, de véges érintő irányú teret is adnak az elektromos térnek, ez felelős a Joule-hővesztésért.

Hullámvezetőnek nevezzük az olyan üreges elektromosan vezető anyagból készült csövet, ami két végén nyitott, így a

hullámok tudnak benne haladni. Ha le van zárva a két vége is, akkor üregrezonátorról beszélünk. Ezeknek megfelelően a megoldásokat a hosszanti szimmetria tengely (z) mentén haladó, vagy álló síkhullámok alakjában kereshetjük. A határfeltételeken az előzőekben ismertetett effektusokra is figyelni kell, de a hővesztéstől most eltekintünk. A hullámegyenlet összefoglalva a következő alakú lesz:

$$\left(\Delta - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \mu\epsilon\omega^2 - k^2 \right) [\mathbf{E}, \mathbf{B}] = 0$$

Figyelembe véve a határfeltételeket (Az \mathbf{E} z komponense a felületen 0, a \mathbf{B} z komponensének normális irányú deriváltja szintén 0) sajátértékegyenletet kapunk. Azt mondhatjuk, hogy a felület teljes hosszára kirótt határfeltétel megkvanálja a megoldásokat, azaz adott frekvenciához csak diszkrét hullámszámok megengedettek. Mivel eltérőek a határfeltételek a két térre, ezért általában különböznek a sajátértékek is a két térre, ez két féle kategóriát jelent a megoldásoknak: Transzverzális Mágneses hullámokról, illetve Transzverzális Elektromos hullámokról beszélhetünk. A megoldásoknál az vehető észre, hogy a megengedett frekvenciánál kisebb frekvenciájú hullámok lecsengenek, és csak a megengedett és annál nagyobb frekvenciájú, hullámok tudnak benne terjedni, ezekből azonban véges sok van, az előző kvantálási okokból kifolyólag. Ez a jelenség igen fontos a telekommunikációban.

Hasonlóan egy megfelelően elkészített üregrezonátort, ha elkezdünk rezgetni, akkor az is csak diszkrét frekvenciákat tart meg, a többi lecseng, így kiválóan alkalmas frekvenciák kiválasztására és erősítésére. Egy igen fontos üregrezonátort alkot a Föld az ionoszférával. Ezt a rezonátort például a villámlások gerjesztik, és ezek hatása igen éles csúcsok jelentkeznek a zajspektrumban, amelyek jól leírhatóak elméleti alapon. Továbbá ezek a frekvenciák érzékenyek bizonyos globális változásokra, így például az éghajlatváltozásra.

Antennák, dipólsugárzás

Vegyünk egy időben periódikusan változó dipólt, amely például a Hertz-féle dipólantenna is lehet. Kíváncsiak vagyunk arra, hogy a térerősség hogyan változik időben, különböző távolságokra az antennától. A töltéssűrűséget és az áramsűrűséget egyszerűenszármaztathatjuk a dipólsűrűségből:

$$\begin{aligned} \rho &= -\operatorname{div} \mathbf{P} \\ \mathbf{i} &= \partial_t \mathbf{P} \end{aligned}$$

Ezekután a fentieket behelyettesítjük a retardált potenciálokba, és a korábban kifejezett elektromos és mágneses térerősséget deriválásokkal kiszámítjuk belőlük. Az eredményből a nagyságrendek érdekesekek, ha a rezgő dipól fekvenciája ω :

$$\begin{aligned} E &\propto \frac{p_0}{r^3} + \frac{p_0\omega}{cr^2} + \frac{p_0\omega^2}{c^2r} \\ B &\propto 0 + \frac{p_0\omega}{c^2r^2} + \frac{p_0\omega^2}{c^3r} \end{aligned}$$

Az elektromos térerősség tagjai: sztatikus dipól tere + polarizációs áram tere + sugárzási (kifutó gömbhullám) tér. A mágneses indukció tagjai: áram mágneses tere + kifutó gömbhullám.

Ha felírjuk \mathbf{E} és \mathbf{B} komponenseit, látható, hogy mindkettő szögfüggő, azonban a Poynting vektor, amely a kettőre merőleges, radiális lesz, azaz a kisugárzott energia radiálisan terjed tova, továbbá \mathbf{S} abszolút értéke r^2 szerint cseng le, azonban még ez a mennyiség is szögfüggő: a dipól irányában minimális (0), attól 90 fokban oldalt maximális a kisugárzott energia mértéke.

Szóródás

Elektromágneses szóródás akkor jön létre, amikor egy töltésrendszerre elektromágneses hullám érkezik, és az megrezgeti a töltéseket (\mathbf{p} elektromos, és \mathbf{m} mágneses dipólusokat indukál). Ekkor a mozgó töltések rezgésbe jönnek, és maguk is sugározni kezdenek (dipólsugárzás ez is). Ennek eredményeként a bejövő sugárzás energiájának egy része a beeséstől különböző irányban kerül kisugárzásra. Az összes energia azonban megmarad, így rugalmas szórásról beszélhetünk. Ha ezek a szórócentrumok a hullámhosszhoz képest kis méretűek, akkor Rayleigh-féle

szórásról beszélünk. Tetszőleges méretre a Mie-féle szóráselmélet ad leírást, ennek speciális esete a Rayleigh-féle leírás.

Szóródás szabad töltésen

Itt is a dipólsűrűséget írjuk be a retardált potenciálokba, és kiszámoljuk az elektromos térerősséget, és a mágneses indukciót, majd ezekből a Poynting-vektort. Az eredmény:

$$S \propto \frac{1}{r^2} \frac{e^4}{m^2} |E_{be}|^2 \sin^2 \theta$$

Szóródás töltött gömbön, avagy miért kék az ég

Ahogy láttuk a dipólsugárzásnál, a kifutógömbhullám **E**-je és **B**-je is a frekvencia négyzetével arányos, ez azt jelenti, hogy a kisugárzott **S** a frekvencia negyedik hatványával arányos. Egy adott térrészben kisugárzott energia és az elnyelt energia hányadosából kiszámítható a hatáskeresztmetszet. Ezt felintegrálva a teljes hatáskeresztmetszet megkapható, ebben változatlanul a negyedik hatványon fog szerepelni a frekvencia. Ez azt jelenti, hogyha kétszer nagyobb frekvenciájú (fele akkora hullámhosszú) hullámot szórunk, akkor az eltérés valószínűsége 16-szor lesz nagyobb. A látható spektrumban a kék hullámhossza közel fele a vörös hullámhosszának (kb 380 és 750 nm), tehát a kék fény lényegesen jobban szóródik, míg a vörös gyakorlatilag megtartja korábbi irányát. Ezért dominál a kék szín az égbolton, és ezért vörös a naplemente (hátha még a városi szmog is odakerül).

Hullámoptika, polarizáció

Tekintsük a szabad hullámegyenletet dielektrikumban:

$$\Delta E - \frac{\mu_r \epsilon_r}{c} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = 0$$

Ennek megoldása egy periodikus síkhullám:

$$E(t) = E_0 \cdot e^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}$$

Legyen **k** z irányú, és jelölje $\tau = \omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{z}$. Ekkor **E** vetülete az x-y síkban egy másodrendű görbét definiál:

$$E = (a_1 \cos \tau, a_2 \cos(\tau + \alpha), 0)$$

$$\frac{E_x^2}{a_1^2} + \frac{E_y^2}{a_2^2} - \frac{E_x E_y}{a_1 a_2} \cos \alpha = \sin^2 \alpha$$

Ez egy kúpszelet egyenlete, hogy milyen azt a következő formula adja meg:

$$\frac{1}{a_1 a_2} (1 - \cos^2 \alpha) \geq 0$$

Ha a szög π egész számú többszöröse, akkor a görbe egy egyenes párt alkot, ekkor beszélünk lineáris polarizációról. Ha a szög 90-foknak páratlan többszöröse, és a két méreorszorzó egyezik, akkor cirkuláris a polarizáció. Egyéb esetben általános, elliptikus polarizációról beszélünk. Az elektromágneses hullám polarizációja befolyásolja a kölcsönhatását a határfelületekkel, és az optikailag aktív közegekkel. A közegben terjedő változásokat a közegebeli Maxwell-egyenletekből számolhatjuk, a határfelületeken a határfelületi törvényeket kell alkalmazni (ezek is levezethetőek a Maxwell-egyenletek inegrális alakjaiból határátmenetekkel), nevezetesen:

- Az elektromos térerősség érintő irányú komponense változatlanul megy át a határfelületen,
- A mágneses indukció normális irányú komponense változatlanul megy át a határon, továbbá
- **H** érintő irányú komponense és
- **D** normális komponense is.

A polarizációs jelenségekről röviden illik tudni, hogy különböző anyagok rendelkezhetnek optikai aktivitással, ezáltal befolyásolhatják a polarizáció szögét, esetleg a különböző polarizációkra eltérő törésmutatókat mutatnak, stb.

Érdemes még megjegyezni a Faraday-effektust, ahol mágneses tér által lehet az anyag optikai aktivitását befolyásolni.

Kristályoptika

Amint látható a hullámoptika igen alapvető kapcsolatban van az anyagi egyenletekkel, azonban ezek az összefüggések csak első közelítésben tekinthetők lineárisnak. Az anyagi egyenletek második közelítésben 3x3-as szimmetrikus tenzorokkal jellemezhető összefüggést tartalmaznak, amelyek jelentősen megváltoztatják a diszperziós relációt: irányfüggővé teszik azt, azáltal anizotróp anyagokhoz jutunk, amelyekben a terjedési sebesség függ az iránytól. Ezek a mindennapokban például a kettőtörő anyagokban figyelhetőek meg.

Törés és visszaverődés

A fentiekből levezethető a jólismert Snellius-Descartes törvény, amely a különböző törésmutatójú közegek határán bekövetkező törést és visszaverődést írja le. A fenti határfeltételeket rójuk ki a felület teljes részére minden időpillanatban. Ha a beérkező hullám n_1 törésmutatójú közegből, a normálishoz mért θ_1 szöggel érkezik, és a megtört sugár közegében n_2 a törésmutató, akkor a θ_2 az ellentett normálishoz mért szögre fennáll:

$$\frac{\sin\theta_1}{\sin\theta_2} = \frac{n_2}{n_1}$$

A visszavert hullám szöge teljesen szokásos módon megegyezik a visszaverttel.

Fresnel-formulák

A fenti egyenletek csak a terjedési irányokat adják meg. Ha az amplitúdókra is kíváncsiak vagyunk, akkor szükségünk van a Fresnel-formulákra, továbbá a beérkező síkhullámot fel kell bontani a kétirányú transzverz polarizációkra. Ezekből meghatározhatók a visszavert és a megtört amplitúdók, amelyek összege ki kell hogy adja a beérkező hullámét. A formulákat lásd itt (http://en.wikipedia.org/wiki/Fresnel_equations).

Interferencia

Két síkhullám találkozásakor a térmennyiségek tekintetében semmi különleges nem történik, hiszen a Maxwell-egyenletek lineárisak, így mindkét hullám létrehozza saját hatását, és ezek összegződnek. Azonban a megfigyelhető intenzitások (és energiák) az amplitúdók négyzetével arányosak, és a **négyzetek nem adódnak össze**. A hullámok összegének négyzetemelésekor marad egy vegyes tag, ami a síkhullámok fáziskülönbségtől függ. Attól függően, hogy a hullámok milyen fázisban találkoznak, erősíthetik, vagy gyengíthetik egymást, azaz a megfigyelt intenzitás nagyban változhat. Ezt a jelenséget nevezzük interferenciának. Ahhoz hogy tartós interferenciát tudjunk megfigyelni, a következő feltételeknek kell teljesülniük:

- Azonos frekvenciájú legyen a két hullám. Másképp a vegyes tag időátlagos (két koszinusz szorzatának időintegrálja) közel nulla lesz.
- Ne legyen merőleges a polarizáció, azaz minnél hasonlóbb polarizációjú hullámokat ejtsünk egybe.
- A fényforrásokból kibocsájtott hullámfrontok fáziskülönbsége időben állandó kell legyen. Random fázistényező esetén az interferenciális hatások kiátlagolódnak, és nem látunk interferenciát.

Ez utóbbi feltételt koherencia feltételnek is nevezhetjük. Vagy lézerekkel, vagy egy koherens hullámvonulat kettéosztásával, majd egyesítésével teljesíthető.

Diffrakció

A Maxwell-egyenletek megoldásával elvileg tetszőleges elrendezésben kitudjuk számolni a hullámok terjedését, azonban ez már igen egyszerű helyzetekben is elbonyolodik. A diffrakció a fény akadályokkal való kölcsönhatását írja le, azonban itt már közelítésekkel élünk.

Huygens-Fresnel-elv

A kísérleti eredmények igen jól leírhatóak a következő állítás segítségével:

- A fény akadályval való találkozása során a hullám az akadály helyén zérus amplitúdót vesz fel, a határfelület minden pontja pedig gömbforrásként tekintendő. A tovahaladó hullám a sok gömbhullám szuperpozíciója.

Az akadályokról tovahaldó hullámfrontot így az egyes gömbforrások integráljaként lehet kezelni, az ezt leíró skaláris elmélet alakképlete:

$$U(p) = \frac{-i}{\lambda} \int_S d^2\mathbf{r} U(\mathbf{r}) \frac{e^{ikr}}{r} \cos\theta$$

Itt $U(p)$ a p -pontbeli amplitúdó, $U(r)$ a bejövő hullám a résnél.

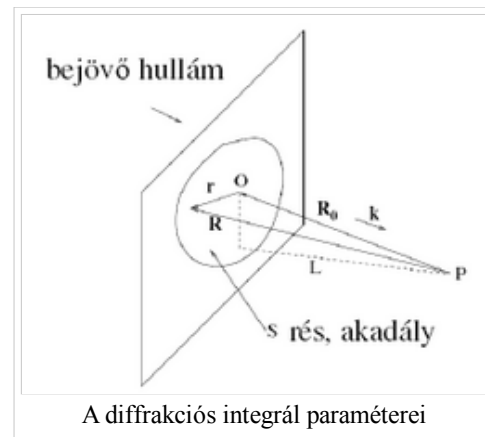
ennek bizonyos gyakori közelítéseit érdemes ismerni:

- A réshez közel, vagy tetszőleges távolságban de szemből nézve Fresnel közelítést kell használni:

$$U(p) \propto \int d^2r U(r) e^{\frac{ikr^2}{2R}}$$

- A réstől távol, és ferdén nézve Fraunhofer közelítést kell használni:

$$U(p) \propto \int d^2r U(r) e^{-ikr}$$



Érdemes tudni a féltér elhajlási képét, és a kerek rés képét, az itt fellépő Poisson foltot (kör alakú kitakarás mögött fényes folt) az elsőhöz, a másodikhoz a vékony rés, és a körnél fellépő Airy-korongot. Képek az optika jegyzet 3-as pdf-jében.

Fourier-optika

Belátható, hogy amikor elhajlási képeket számolunk, akkor a fellépő integrál a síkhullámból örökölt exponenciálissal együtt voltaképpen a diffraktív felület Fourier-transzformációját írja le. Ezek után lényegileg a kétdimenziós Fourier transzformáció apparátusával tárgyalható tetszőleges elrendezés elhajlási képe, ami nagyban megkönnyíti és egységesíti a tárgyalásmódot, különösen szabályos, illetve rácyszerkezetű diffraktív felületek esetén.

Nemlineáris optika alapjai

Nemlineáris, elektrooptika

A közeg polarizációja továbbá nem csak az irányfüggésben lehet bonyolult, hanem a dielektromos állandó, és ezen keresztül a törésmutató térerősségfüggésében. Ez azt jelenti, hogy kellően nagy energiájú sugár (lézerefény) megváltoztatja a közeget maga körül, és ez utána visszahat a saját terjedésére. Ezt a terjedést és visszahatást a nemlineáris optika tárgyalja, itt a szuszceptibilitáshoz magasabb rendű korrekciókat is figyelembe kell venni.

Ha a sugár energiája kicsi, de mi kapcsolunk külső erős sztatikus teret a közegre, akkor ugyanígy befolyásolhatjuk a terjedést, ez az elektrooptika. A térerősség első hatványával történő megváltozás a Pockels effektus, a négyzetével arányos a Kerr-effektus.

További effektusok a Cserti József Optika 10. jegyzetében találhatóak.

Záróvizsga tematika

99/209

A klasszikus mechanika alapjai | A klasszikus mechanika elméleti tárgyalása | A relativitás elmélet alapjai | Egzaktul megoldható fizika problémák | Folytonos közegek mechanikája | Fenomenologikus termodinamika | Elektro- és magnetosztatika, áramkörök | Elektrodinamika | **Hullámegyenlet és hullámoptika** | Geometriai optika és alkalmazásai | A kvantumelmélet alapvető kísérletei | A kvantummechanika elméleti háttere | Atom- és molekulaszervezet | A magfizika alapjai | A termodinamika statisztikus alapozása | Kvantumstatisztikák | Kölcsonható rendszerek, mágneses anyagok | Kristályos anyagok fizikája | Nemegyensúlyi folyamatok leírása | Az asztrofizika alapjai

A lap eredeti címe: „http://mafihe.hu/~wiki/wiki/index.php/Hull%C3%A1megyenlet_%C3%A9s_hull%C3%A1moptika”

- A lap utolsó módosítása: 2009. augusztus 19., 20:16

Geometriai optika és alkalmazásai

A TételWiki wikiből

Tartalomjegyzék

- 1 Bevezető, fény, fénysugár
- 2 A Fermat-elv
- 3 Az eikonál közelítés
 - 3.1 Az eikonál közelítés korlátai
- 4 Analógia a klasszikus mechanikával
 - 4.1 Ami az analógiából hiányzik
- 5 Paraxiális közelítés
- 6 Mátrix reprezentáció, leképezési törvények
 - 6.1 A leképezés fogalmai
 - 6.2 A gömbtükör fókusza
 - 6.3 A gömbtükör leképezési törvénye
 - 6.4 Vékony lencse fókusza
 - 6.5 Vékony lencse leképezése
 - 6.6 Összetett optikai rendszerek
 - 6.7 Általános leképezés
- 7 Optikai eszközök (távcső, mikroszkóp), felbontóképesség
 - 7.1 Vetítő, fényképező, nagyítólencse, szemüveg
 - 7.2 Mikroszkóp és felbontóképesség
 - 7.2.1 Felbontóképesség
 - 7.3 Távcső
- 8 Optikai jelenségek a természetben, kausztikák

Bevezető, fény, fénysugár

A geometriai optika nem foglalkozik a fény hullám, vagy részecske tulajdonságával. Pusztán a fény viselkedését írja le olyan távolság- és időértékeknél, melyek jóval nagyobbak, mint a fény néhány mennyiségi jellemzője.

Alapfeltevései ^[1]:

- a fény egyenes vonalban terjed, ha homogén közegben halad és semmi sincs az útjában
- közeghatárokon megtörik és/vagy visszaverődik
- visszaverődésnél a beesési és visszaverődési szög megegyezik
- törésnél a beesési és törési szög közötti összefüggést a Snellius-Descartes törvény adja meg:

$\sin\vartheta_b = n\sin\vartheta_t$, ahol ϑ_b a beesési, ϑ_t a törési (transzmissziós szög), n egy arányszám, az adott közeg (vákuumhoz viszonyított) törésmutatója.

- a fénysugarak közt egymásra hatás nem mutatkozik

A Fermat-elv

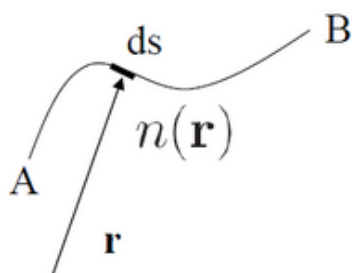
A Fermat-elv, vagy legrövidebb idő elve azt mondja ki, hogy két pont között a fény az összes lehetséges út közül azt választja, aminek megtételéhez a legrövidebb időtartam szükséges. ^[2]

Közegben a fény sebessége: $\frac{c_0}{n}$, ahol n a fent említett törésmutató (mely függhet anyagtól, helytől, vagy a fény

színétől), c_0 pedig a vákuumbeli fénysebesség, értéke a Maxwell-egyenletek alapján: $c_0 = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}}$, ahol

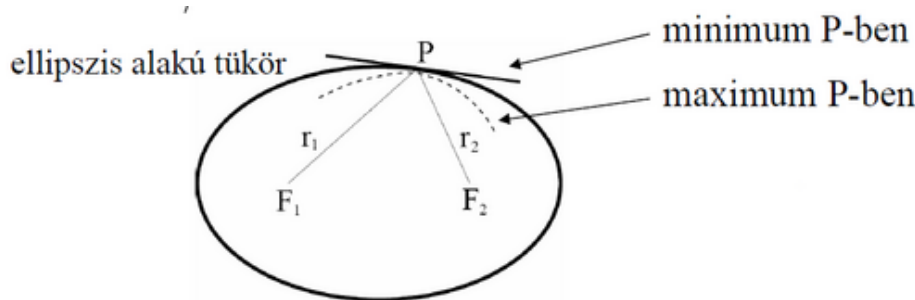
$\epsilon_0 = 8.8510^{-12} \frac{C^2}{Nm^2}$ a vákuum dielektromos állandója. $\mu_0 = 4\pi 10^{-7} \frac{Vs}{Am}$ a vákuum permeabilitása. A fentiek alapján: $c_0 = 299792458 \frac{m}{s}$.

A Fermat-elv tehát azt mondja ki, hogy a fény két pont között a legrövidebb idő alatt megtehető utat teszi meg. Kicsit pontosabban a fénysugár pályáját sok más szomszédos, csaknem azonos időt igénylő terjedési út közül választja.^[3] Ennek kiszámítása a következőképpen történik:



A fenti pályára vett integrálnak (ahol $n(\mathbf{r})$ helyfüggő változó) szélsőértéket kell adnia.

$$\int_A^B n(\mathbf{r}) ds = \text{extremum}, \text{ ahol } \mathbf{r} \text{ a helyvektor}^{[4]}. \text{ Pl.:}$$



Az eikonál közelítés

	Homogén eset	Inhomogén eset
Hullámgörvénlet	$\frac{\partial^2 \phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} = c^2 \Delta \phi$	$\frac{\partial^2 \phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} = c^2(\mathbf{r}) \Delta \phi$
Megoldása	$\phi(\mathbf{r}, t) = A e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}$	$\phi(\mathbf{r}, t) = A(\mathbf{r}, t) e^{i\varphi(\mathbf{r}, t)}$

Az inhomogén esetben felírt megoldás csak a lassan változó amplitúdójú (A), és gyorsan változó fázisú ($\varphi - \lambda$ távolságon 2π -t változik) síkhullámokra vonatkozik. Lassan változó alatt azt értem, hogy a karakterisztikus hossz ($L \sim \frac{1}{\nabla n}$) jóval nagyobb, mint a hullámhossz (λ). Tehát inhomogén esetben, lassan változó amplitúdó és gyorsan változó fázis esetén $\varphi(\mathbf{r}, t)$ hordozza az információt, ez a geometriai optika.^[5]

A fenti inhomogén megoldást beírva a hullámgörvénletbe a következőt kapjuk:

$$\frac{\partial^2 \phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} = -A \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \right)^2 e^{i\varphi(\mathbf{r}, t)}$$

$$c^2(\mathbf{r}) \Delta \phi = A c^2(\mathbf{r}) (\text{grad} \varphi)^2 e^{i\varphi(\mathbf{r}, t)}$$

A fentiek alapján tehát:

$$\boxed{\left(\frac{\partial\varphi}{\partial t}\right)^2 = c^2(\mathbf{r})(grad\varphi)^2 \quad \text{Ez az eikonál-egyenlet.}}$$

Ahol $c(\mathbf{r}) = \frac{c_0}{n(\mathbf{r})}$, $n(\mathbf{r})$ pedig a lokális (helyfüggő) törésmutató.

Fejtsük sorba a fázist: $\varphi(\mathbf{r}, t) = \varphi_0 + \frac{\partial\varphi}{\partial\mathbf{r}}\mathbf{r} + \frac{\partial\varphi}{\partial t}t + \dots$

Majd írjuk be $\phi(\mathbf{r}, t)$ helyére: $\phi(\mathbf{r}, t) = Ae^{i\varphi} = Ae^{i\varphi_0}e^{i(\nabla\varphi\mathbf{r} + \frac{\partial\varphi}{\partial t}t)} \sim Ae^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}$

A fentiek fényében:

$$\mathbf{k}(\mathbf{r}, t) = grad\varphi(\mathbf{r}, t)$$

$$\omega(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial\varphi}{\partial t}$$

- Az eikonál-egyenlet egyszerűsödik, ha ω állandó, ekkor: $\varphi(\mathbf{r}, t) = -\omega t + \psi(\mathbf{r})$. Az jobb oldal utolsó tagjának neve "rövidített eikonál".

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} = -\omega(\mathbf{r}, t)$$

$$\} \Rightarrow \quad \omega^2 = \left(\frac{c_0}{n\mathbf{r}}\right)^2 (grad\psi)^2$$

$$grad\varphi = grad\psi$$

Az eikonál közelítés korlátai

A levezetés során a következő közelítéseket használtuk ki:

- Az amplitudó változása a hullámhosszal szorozva kisebb az amplitudónál,
- A hullámfelület görbületi sugara sokkal nagyobb a hullámhossznál,
- Az amplitudófelület görbületi sugara és a hullámhossz aránya sokkal nagyobb a hullámhossz és az amplitudó arányánál,
- A hullámfront lineáris méretei sokkal nagyobbak a hullámhossznál.

Ezek fényében az eikonál közelítés nem használható például fényforrások illetve fókuszpontok közelében, fény-árnyék határán. Továbbá mindezen feltételek erősen függenek a tekintett hullám hullámhosszától.

Analógia a klasszikus mechanikával

A fentiek fényében itt csak egy rövid táblázatban foglalnám össze a legfontosabbakat^[6]:

	Pontmechanika	Geometriai optika
Hatásintegrál	$S(\mathbf{r}, t) = \int_{P_0}^P L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) dt$	$\varphi(\mathbf{r}, t)$
	$\mathbf{p} = gradS$	$\mathbf{k} = grad\varphi$
		$\mathbf{p} \sim \mathbf{k}$
		$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$

$$E = -\frac{\partial S}{\partial t} \qquad \omega = -\frac{\partial \phi}{\partial t}$$

$$\frac{E}{\hbar} \sim \omega$$

$$E = \hbar\omega$$

Hamilton-Jacobi egyenlet

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = H(\mathbf{r}, \mathbf{p} = \text{grad}S) \qquad -\frac{\partial \phi}{\partial t} = \Omega(\mathbf{r}, \mathbf{k} = \text{grad}\phi)$$

$$E = H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \qquad \omega = \Omega(\mathbf{r}, \mathbf{k})$$

E mozgásállandó

$$S(\mathbf{r}, t) = -Et + S_0(\mathbf{r}) \qquad \varphi(\mathbf{r}, t) = -\omega t + \psi(\mathbf{r})$$

Rövidített

Hamilton-Jacobi egyenlet

$$E = H(\mathbf{r}, \mathbf{p} = \text{grad}S) \qquad \omega = \Omega(\mathbf{r}, \mathbf{k} = \text{grad}\varphi)$$

Hamilton-féle kanonikus egyenletek

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{\partial H(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \qquad \dot{\mathbf{r}} = \frac{\partial \Omega(\mathbf{r}, \mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}$$

Hamilton-féle kanonikus egyenletek

$$\dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial H(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{r}} \qquad \dot{\mathbf{k}} = -\frac{\partial \Omega(\mathbf{r}, \mathbf{k})}{\partial \mathbf{r}}$$

Maupertius-elv $\delta \int \mathbf{p} d\mathbf{r} = 0$

$$\delta \int \mathbf{k} d\mathbf{r} = 0 = \frac{\omega}{c_0} \delta \int n(\mathbf{r}) dl \sim \delta \int n(\mathbf{r}) dl =$$

A Hamilton-féle sugáregyenletekből paraxiális közelítésben levezethető a lencsetörvény.

Ami az analógiából hiányzik

Pontmechanikában a Lagrange-függvény:

$$L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) = \mathbf{p}\dot{\mathbf{r}} - H, \text{ ahol } \mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}} \text{ és } H = \mathbf{p}\dot{\mathbf{r}} - L = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}} \dot{\mathbf{r}} - L$$

Keressük meg ugyanezt az optikában:

$$L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) = \mathbf{k}\dot{\mathbf{r}} - \Omega, \text{ ahol } \Omega = c(\mathbf{r}) |k| \text{ és } \dot{\mathbf{r}} = \frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{k}} = c(\mathbf{k}) \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|}$$

A fentiek alapján a Lagrange-függvény az optikában:

$$L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) = \left(c(\mathbf{r}) \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|} \right) \mathbf{k} - c(\mathbf{r}) |\mathbf{k}| \equiv 0 \text{ A Lagrange-függvény az optikában azonosan nulla.}$$

A mechanikai törésmutató meghatározásánál figyelni kell arra, hogy az analógiát ne a Fermat-elvből levezetett

$$\omega \delta \int \frac{1}{c(\mathbf{r})} dl \text{ és ennek mintájára felírt } \delta \int \frac{1}{v(\mathbf{r})} dl \text{ egyenlet között vegyük, mert } c(\mathbf{r}) \text{ a fázissebesség, a}$$

mechanikai analógiában látott $\frac{1}{v(\mathbf{r})}$ -ben a $v(\mathbf{r})$ a csoportsebességnek feleltethető meg, melynek értéke az optikában:

$$\mathbf{v}_g = \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{k}}. \text{ A helyes analógia a Fermat-elv és a Maupertius-elv közötti megfeleltetés. Ezt végigszámolva a}$$

mechanikában a törésmutató értékére a következőt kapjuk:

$$0 = \delta \int \mathbf{p}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \delta \int |p| dl = \delta \int \sqrt{2m(E - V(\mathbf{r}))} dl, \text{ mivel } E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - V(\mathbf{r}). \text{ Ennek nyomán a}$$

törésmutató analogonja a mechanikában: $n(\mathbf{r}) = \sqrt{E - V(\mathbf{r})}$. $V(\mathbf{r}) = eU(\mathbf{r})$ alkalmas megválasztásával

elektrosztatikus lencsék/tükrök készíthetőek.

Részecske

$n(\mathbf{E}, \mathbf{r})$ függ a részecske energiájától, diszperzív közeg $n(\omega, \mathbf{r})$ diszperzió

Éles képhez monoenergetikus nyaláb kell.

$n(\mathbf{r})$ -re nincs korlát

Optika

$n(\omega, \mathbf{r})$ diszperzió

Éles képhez monokromatikus fény kell.

$n > 1$, mert $c < c_0$

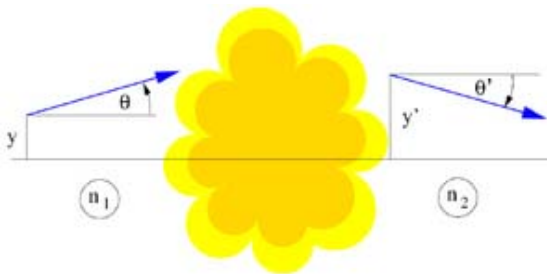
Paraxiális közelítés

Paraxiális közelítésben hengersizmetrikus, tengelyközeli rendszereket vizsgálunk^[7].

- A tengelytől való távolság kisebb, mint bármilyen releváns fókustávolság, vagy rendszerméret.
- A sugarak szögei kicsik a tengelyhez képest. ($\vartheta \ll 1$)

Ebben a közelítésben: $\sin\vartheta \approx \tan\vartheta \approx \vartheta$

A fénysugarakat az optikai tengelytől mért (előjeles!) y távolsággal, és szintén az optikai tengellyel bezárt (előjeles!^[8]) szöggel jellemezzük.



Mátrix reprezentáció, leképezési törvények

Tetszőleges paraxiális rendszerben a fény terjedése leírható mátrix-, és vektorműveletekkel^[9]:

$$\begin{pmatrix} y \\ n_1\vartheta \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} y' \\ n_2\vartheta' \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} y' \\ n_2\vartheta' \end{pmatrix} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} y \\ n_1\vartheta \end{pmatrix}$$

Három alapesetre vonatkozó terjedési mátrix:

Szabad terjedés Törés gömbfelületen Visszaverődés gömbfelületről

$$\begin{matrix} 1 & \frac{d}{n} & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & \frac{n_1-n_2}{R} & 1 & -\frac{2n}{R} & -1 \end{matrix}$$

A mátrix reprezentációnál a fénysugarat követve a mátrixokat balról jobbra szorozzuk össze, így megkapjuk a teljes rendszert leíró optikai mátrixot. (Fontos, hogy a fénysugarat kövessük, mert menet közben pl. meg is fordulhat.)

Tetszőleges paraxiális optikai rendszerre igaz, hogy $\det M = \pm 1$.

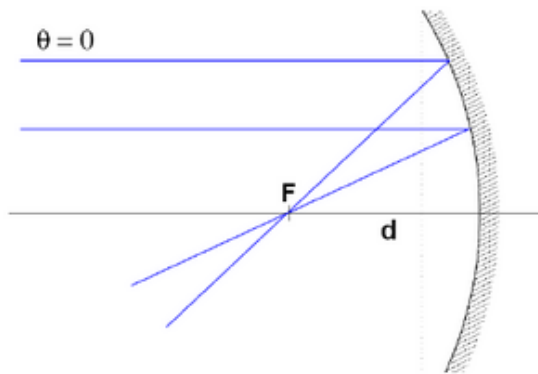
A leképezés fogalmai

- **Fókuszpont:** minden párhuzamos fénysugarat egy pontba gyűjtünk össze, y' -től függetlenül valahol nulla lesz.
- **Leképezés:** egy pont leképezése során a pontból kiinduló fénysugarat ϑ -tól függetlenül egy másik pontba gyűjtjük össze.

A gömbtükör fókusza

A rendszer leképezési mátrixa egy szabad terjedési mátrixból és egy visszaverődési mátrix szorzatából áll, balról

jobbra összeszorozva: $\begin{pmatrix} y' \\ \vartheta' \end{pmatrix} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} y \\ 0 \end{pmatrix}$, $\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 + \frac{2d}{R} & \frac{d}{n} \\ -\frac{2n}{R} & -1 \end{pmatrix}$ (Theta azért nulla, mert a tengellyel párhuzamosan érkeznek a sugarak:



$$\begin{pmatrix} y' \\ \vartheta' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (1 + \frac{2d}{R})y \\ -\frac{2n}{R}y \end{pmatrix} \rightarrow y' = \left(1 + \frac{2d}{R}\right)y$$

És mivel a fókuszpontban $y' = 0$, ezért $d \equiv f = -\frac{R}{2}$

A gömbtükör leképezési törvénye

A rendszer leképezési mátrixa most egy tárgytól a tükörig tartó szabad terjedésből, egy visszaverődésből, és egy tükörtől a leképezésig tartó szabad terjedésből áll. A terjedési mátrix e három szorzata:

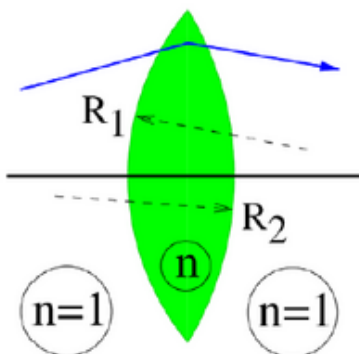
$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 + \frac{2k}{R} & k + \left(1 + \frac{2k}{R}\right)t \\ -\frac{2}{R} & -1 - \frac{2t}{R} \end{pmatrix}$$

Mivel y' a leképezésnél független ϑ' -tól, ezért a mátrix első sorának második eleme nullát ad, így (a gömbtükör fókuszára voantkozó összefüggés felhasználásával) megkapjuk a már ismert leképezési törvényt:

$$k + \left(1 + \frac{2k}{R}\right)t = k + \left(1 - \frac{k}{f}\right)t = 0 \rightarrow \frac{1}{f} = \frac{1}{k} + \frac{1}{t}$$

Vékony lencse fókusza

Egy vékony lencsénél két törőfelületről beszélhetünk, melyek két, R_1 és R_2 sugarú gömbfelületből állnak. A lencse anyagának törésmutatója n , a lencsét körülvevő közegé 1. A bal oldali törőfelület mátrixa M_L , a jobb oldalié M_R :



$$M_L = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{n-1}{R_2} & 1 \end{pmatrix} M_R = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{1-n}{R_1} & 1 \end{pmatrix}$$

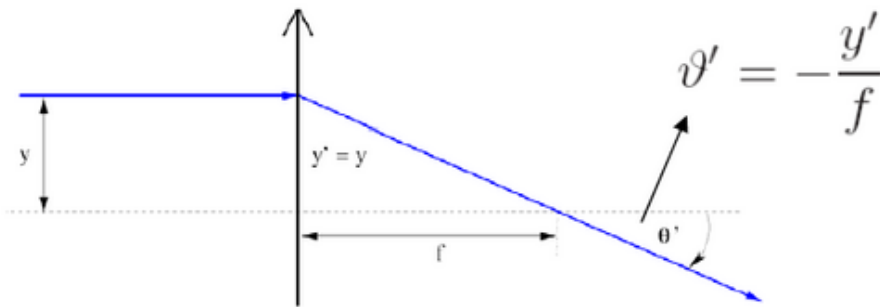
Ezek szorzata a rendszert leíró mátrix ezek szorzata (balról jobbra haladva, előjelesen):

$$M = M_R M_L = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ (n-1)\left(\frac{1}{R_2} - \frac{1}{R_1}\right) & 1 \end{pmatrix}$$

Az optikai tengellyel párhuzamosan beérkező fénysugár változása a rendszeren való áthaladás után:

$$\begin{pmatrix} y' \\ \vartheta' \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} y \\ \vartheta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y \\ yM_{21} \end{pmatrix}$$

És mivel:



Így $M_{21} = -\frac{1}{f}$, tehát a fókusz távolság: $\frac{1}{f} = M_{21} = (n-1) \left(\frac{1}{R_1} - \frac{1}{R_2} \right)$.

Vékony lencse leképezése

A vékony lencse leképezésének leírásához három mátrixot kell figyelembe vennünk, egyszer a képtávolságnyi szabad terjedés mátrixát, egyszer a törés mátrixát (a fent megismert összefüggés alapján), egyszer pedig a lencsétől a képtávolsáig terjedő szabad terjedés mátrixát. Ezeket összeszorozva kapjuk meg a teljes optikai rendszer mátrixát, ami a következőképpen néz ki:

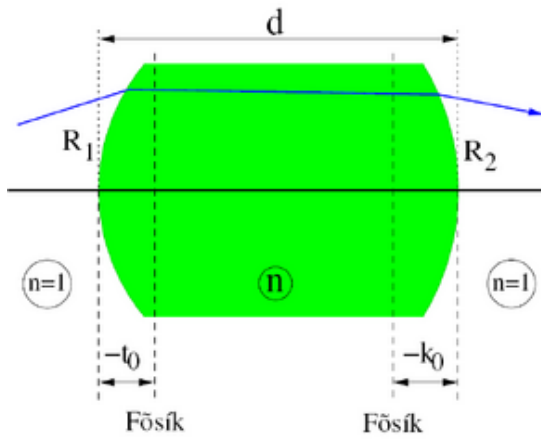
$$M = \begin{pmatrix} 1 & k \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\frac{1}{f} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & t \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - \frac{k}{f} & k + t - \frac{kt}{f} \\ -\frac{1}{f} & 1 - \frac{t}{f} \end{pmatrix}$$

Mivel leképezésnél y' független ϑ -tól, ezért $M_{12} = 0 \rightarrow k + t - \frac{kt}{f} = 0 \rightarrow \frac{1}{f} = \frac{1}{k} + \frac{1}{t}$. Azaz itt is igaz a leképezési törvény.

Összetett optikai rendszerek

Összetett optikai rendszereknél nem mindig igaz elsősre a leképezési törvény, de mint látni fogjuk, kis trükkkel újra igazgá tehetjük.

- Sok egymás melletti vékony lencse esetén esetén a dioptriák $\left(D = \frac{1}{f} [1/m] \right)$ összeadódnak.
- Vastag lencsék esetén szükség van az úgynevezett fősíkok bevezetésére. A fősíkok (lásd lejjebb) használatával a leképezési törvény újra igazgá tehető:



A tárgy-, és a képtávolságot a fősíktól mérve a leképezési törvény ismét igaz lesz. A fősíkok kiszámítása a következőképpen történik:

$$t_0 = f \frac{d}{R_2} \frac{n-1}{n}, k_0 = -f \frac{d}{R_1} \frac{n-1}{n}$$

A fókusz-távolságot vastag lencsék esetén a következő összefüggés adja meg (ez a lencsekészítők alapképlete). Egyébként ez három mátrix szorzásából ered: a vékony lencse jobb-, és bal oldali törőmátrixa közé be kell iktatni egy n törésmutatójú közegben történő szabad terjedés mátrixát (ezzel jelezzük, hogy vastag lencséről van szó). E három mátrix szorzatából lehet megkapni a vastag lencse, mint optikai rendszer mátrixát.

A fókusz-távolságot lencsére a rendszermátrix második sorának első eleméből lehet megkapni (mint fentebb

láthattuk):
$$\frac{1}{f} = (1-n) \left(\frac{1}{R_1} - \frac{1}{R_2} + d \frac{n-1}{n R_1 R_2} \right)$$

Általános leképezés

Teljesen általános leképezés esetén a leképezési mátrix: $M = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}$. Ezzel az a probléma, hogy nem lehet tudni, hogy hol a rendszer eleje és vége. Így módosítjuk egy kicsit:

$$M' = \begin{pmatrix} 1 & k_0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & t_0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

k_0 és t_0 alkalmas megválasztásával (és kihasználva azt a

tényt, hogy **tetszőleges paraxiális optikai rendszer leképezési mátrixának determinánsa $\det M = \pm 1$**):

$$t_0 = \frac{1}{M_{21}} (\det M - M_{22}) = \frac{1}{M_{21}} (\pm 1 - M_{22}), k_0 = \frac{1}{M_{21}} (\det M - M_{11}) = \frac{1}{M_{21}} (\pm 1 - M_{11})$$

Így M' a következőképpen egyszerűsödik:

$$M' = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1-\det M}{M_{21}} \\ M_{21} & 1 \end{pmatrix}, \text{ ami - mivel } \det M = \pm 1 - M' \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ M_{21} & 1 \end{pmatrix}.$$

Láttuk, hogy vékony lencsénél a

mátrix éppen így néz ki, így meg tudjuk mondani a fókusz-távolságot: $\frac{1}{f} = -M_{21}$.

Optikai eszközök (távcső, mikroszkóp), felbontóképesség

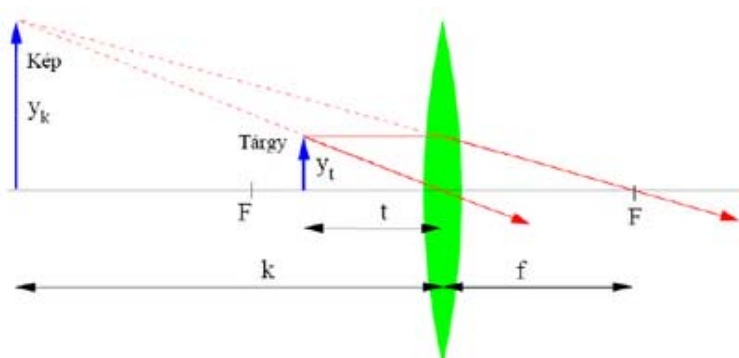
Az optikai eszközök közül néhányról csak említés szintjén, és a címben szereplő távcsőről és mikroszkópról részletesebben fogok írni.

Vetítő, fényképező, nagyítólencse, szemüveg

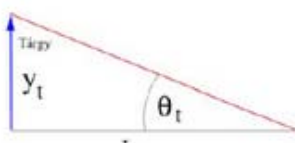
- **Vetítő:** egy egyszerű lencse (és egy tükör) segítségével a tárgyról távoli, nagyított képet állít elő.

108/209

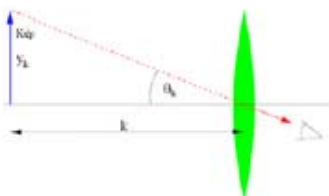
- Fényképező: távoli tárgyról készít kicsinyített, valódi képet tükrök, lencsék és blendék (fényerőszabályzók) használatával. A képek felvétele fényérzékeny anyagra, vagy újabban CCD-chipek segítségével valamilyen digitális tárolóegységre (általában memóriakártya) történik.
- Nagyítólencse (lupe): nagyított, virtuális ($k < 0$) képet készít a fókusz távolságnál *közelebb* lévő tárgyról:



szabadszemmel:



lupével:



A lupe nagyító tulajdonságát két szempontból is érdemes megvizsgálni, az egyik a **laterális nagyítás**

(képméret/tárgyméret): $N = \frac{y_k}{y_t} = \frac{-k}{t} = \frac{f}{f-t}$ A másik a szögnagyítás:

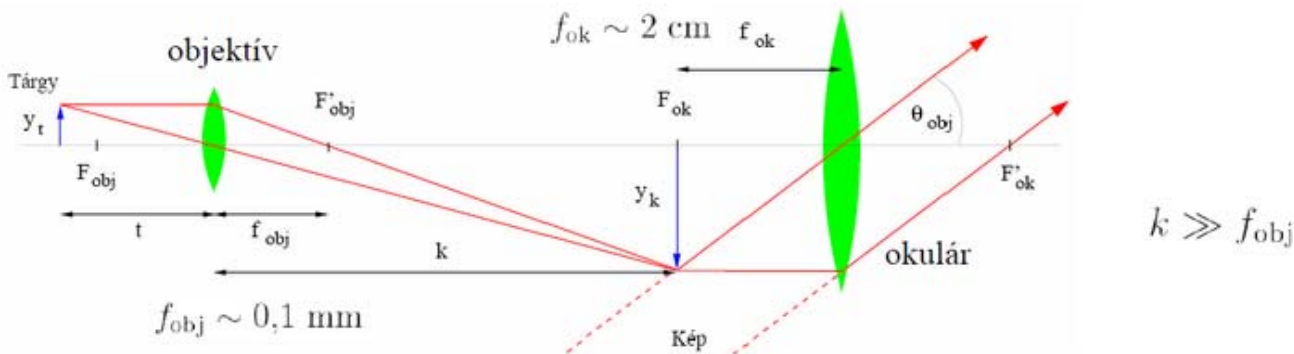
$$N_{szög} = \frac{\theta_k}{\theta_t} \approx \frac{tg\theta_k}{tg\theta_t} = \frac{y_k/(-k)}{y_t/L_0} = \frac{-k}{t} \frac{L_0}{-k} = \frac{L_0}{t} \approx \frac{L_0}{f}, \text{ mivel } k > L_0 \gg f \rightarrow t \approx f$$

A lupe azért hasznos, mert a tisztánlátás távolsága körülbelül $L_0 \sim 25\text{cm}$ (viszonylag szubjektív adat), a lupe segítségével pedig ennél nagyobb távolságú tárgyakat is tisztán láthatóvá tehetünk.

- Szemüveg: korrekciós lencse a szemlencse elé (a szemlencse kb. 60-64 dioptriás). *Rövidlátás* esetén a fénytörés túl erős, a kép a retina előtt fókuszálódik, *szórólencse* kell ($D < 0$). *Távollátás* esetén a fénytörés nem elég erős, a kép a retina mögött fókuszálódik, *gyűjtőlencse* kell ($D > 0$).

Mikroszkóp és felbontóképesség

A lupe - bár sokmindenre jól használható - alapproblémája az, hogy nem tudjuk elég közel helyezni a szemünket. Ennek megoldására használjuk két lencsét, az egyik levetíti a képet (objektív), a másik pedig a lupe (okulár).



Egy mikroszkópban az objektív és az okulár fókusz síkjai egymástól a mikroszkóp felépítése által meghatározott,

108/209

állandó távolságban vannak. Ez az optikai tubushossz ($F_{obj}F_{ok} = \Delta$). Egy mikroszkópban ennek szabványos értéke 160 mm.^[10]

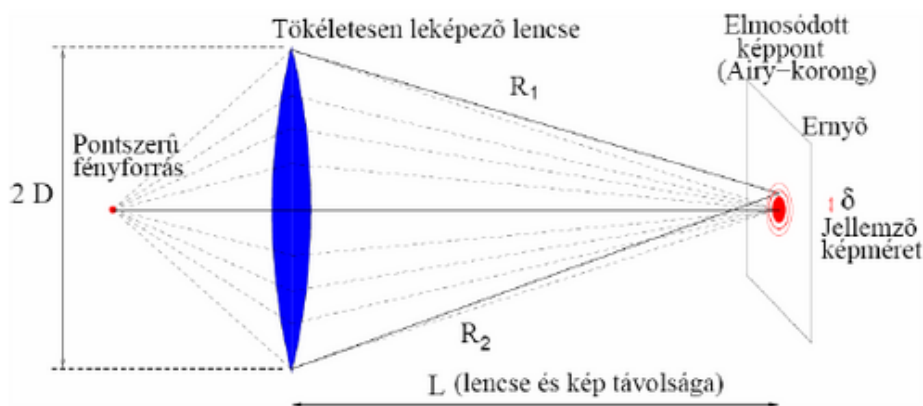
Az objektív laterális nagyítása: $N_{obj} = \frac{y_k}{y_t} = \frac{k}{t} = \frac{k - f_{obj}}{f_{obj}}$. A mikroszkóp szögnyagyítása:

$$N_{szög} = \frac{\theta_{obj}}{\theta_t} \approx \frac{tg\theta_{obj}}{tg\theta_t} = \frac{y_k/f_{ok}}{y_t/L_0} = \frac{y_k}{y_t} \frac{L_0}{f_{ok}} = \frac{\Delta}{f_{obj}} \frac{L_0}{f_{ok}}$$

A tipikus nagyítás nagyságrendileg $1000 * 10$.

Felbontóképeség

Az optikai eszközök felbontóképeségét a hullámoptika közelíthetősége határolja be. Tökéletes leképezést feltételezve a Fermat-elv szerint minden képalkotásban résztvevő fényút optikai úthossza megegyezik. A hullámoptika szerint mindenféle pályán haladhat a fény, de **ott lesz nagy az amplitúdó, ahol körülbelül azonos fázisban érkeznek a hullámok.**



Szögnyagyítás: $\frac{\delta}{L} < \frac{\lambda}{D}$. Azaz minden lencse megfelel egy résznek, amely $\frac{\lambda}{D}$ nagyságú diffrakciót okoz. Ez azt jelenti,

hogy a mikroszkóp maximális felbontása: $f \frac{\lambda}{D}$. A lencsére jellemző $\frac{D}{f}$ hányadost numerikus apertúrának nevezik.

(Vannak más definíciók is a numerikus apertúrára, pl: $nsin\alpha$, ahol $tg\alpha = \frac{D}{f}$. D/f tipikus értéke 0,3 körüli, de a maximálisan elérhető felbontóképeség akár a hullámhossz nagyságrendjébe esik.

Távcső

A távcsövek konfokális (egybeeső fókuszponttal rendelkező) összetett lencserendszerek. A tárgy a végtelenben van, a kép is egy végtelen távoli pontban keletkezik. Laterális nagyításról tehát nincs értelme beszélni, csak szögnyagyításról.

Mátrixoptikával úgy lehet leírni, hogy egy fókuszálás, majd szabad terjedés, majd még egy fókuszálás megy végbe, ez három mátrix szorzataként írható fel. Formálisan a fókusz távolság végtelen, ha a két lencse közötti távolság $d = f_1 + f_2$.

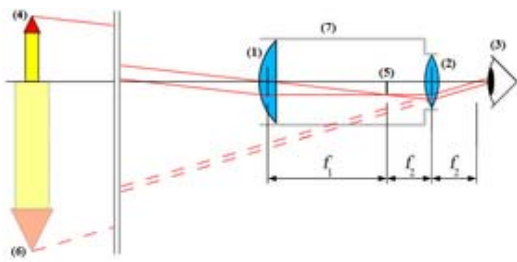
Szögnyagyítás: $|M_{22}| = \frac{f_2}{f_1}$

Távcső felbontása: $\frac{\lambda}{D}$, ahol D a távcső lencsájének átmérője (csillagászati távcsöveknél 10 m nagyságrendű).

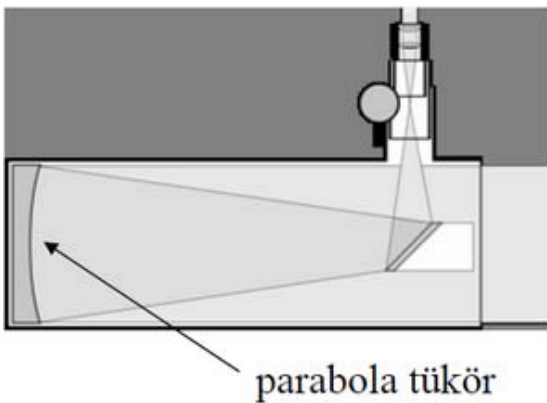
A különböző típusú távcsövekről:

110/209

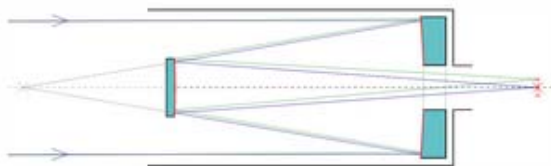
- Kepler távcső (csillagászati távcső): két gyűjtőlencse, $d = f_{obj} + f_{ok}$



- Galilei-féle távcső (színházi távcső): az objektívje gyűjtőlencse, az okulárja szórólencse, és $d = f_{obj} - f_{ok}$, egyébként ugyanaz, mint az előző.
- Newton-távcső: hasonló elvi elrendezése fentiekhez, ám ezúttal tükrökkel megvalósítva.



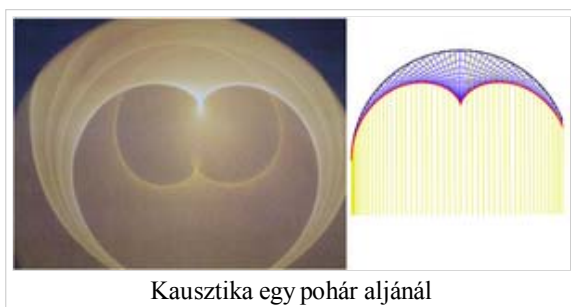
- Cassegrain-távcső: szintén tükrös távcső, az alábbi elrendezéssel.



A tükrös távcsövek előnye a lencsésekkel szemben, hogy olcsóbban, nagyobb átmérőjű tükrök állíthatóak elő, ezáltal jobb felbontást lehet elérni. Valamint ugyanolyan felbontást kisebb méretű távcsővel lehet elérni.

Optikai jelenségek a természetben, kausztikák

Először ejtsünk néhány szót a kausztikákról. A kausztika jelentése: görbesereg burkolója. Az optikában kausztikák akkor alakulnak ki, ha (közel) párhuzamos fénysugarak esnek egy nem sík felületre. Emiatt alakul ki a szivárvány, a tavakon naplementekor látható fényes sávok, valamint a henger alakú üvegalkalmazások alján látható furcsa fényfoltok.



Kausztika egy pohár aljánál

- A szivárvány: feltételezzük, hogy a vízcseppek gömb alakúak (nem teljesen igaz, de a jelenség lényegileg nem változik sokat a gömbtől eltérő cseppalak esetén sem). Ha sok párhuzamos fénynyaláb érkezik rá egy irányból,

110/209

111/209

akkor ezek a csepp határán megtörnek, majd a cseppben haladnak, annak falán (akár többször is) visszaverődnek, ezáltal (mivel a különböző színű (frekvenciájú) fénysugarak egy kicsit eltérően törnek ugyanolyan törésmutatójú közegben is) a különböző színek szétválnak, máshol lépnek ki cseppből néhány visszaverődés után. Ha sok ilyen csepre esnek ugyanolyan irányból érkező párhuzamos fénysugarak, akkor a cseppekből a fény nagy része ugyanolyan irányban jut ki, ezt látjuk szivárványnak.



A szivárvány kialakulásának vázlatos képe és egy látható szivárvány

- Nagyobb tavaknál, például már a Balatonnál is lehet látni naplementekor a következő jelenséget: ha a vízre nézük, fényes csíkot látunk rajta, mintha a Nap ráfolyt volna a vízre egy sávon. Ennek oka, hogy a víz hullámzik, így a fénysugarak különböző irányba verődnek vissza a felületéről, ahogy azt az alábbi ábra is szemlélteti:



A fényes sávot azért látjuk, mert minden hullámnak van olyan része, ami a szemünk irányába veri vissza a fényt, így a sok különböző helyről szemünkbe jutó napfényt egy összefüggő fényes sávnak látjuk.

1. ↑ Feynman: Mai fizika 3., 7-8. old.
2. ↑ Feynman: Mai fizika 3., 10-12. old.
3. ↑ Feynman: Mai fizika 3., 16-17. old.
4. ↑ Optika és relativitáselmélet, 1. előadás, 16. oldal, [1] (http://complex.elte.hu/~cserti/okt/O_SpR-1.pdf)
5. ↑ Optika és relativitáselmélet, 6. előadás, 2. oldal [2] (http://complex.elte.hu/~cserti/okt/O_SpR-6.pdf)
6. ↑ Optika és relativitáselmélet, 6. előadás, 4. oldal [3] (http://complex.elte.hu/~cserti/okt/O_SpR-6.pdf)
7. ↑ Optika és relativitáselmélet, 7. előadás, 5. oldal [4] (http://complex.elte.hu/~cserti/okt/O_SpR-7.pdf)
8. ↑ Negatív: óramutató járásával megegyező, pozitív: óramutató járásával ellentétes.
9. ↑ A teljes fejezet az Optika és relativitáselmélet 7. órájának fóliáiból lett összeálltva
10. ↑ Havancsák Károly: Mérések a klasszikus fizika laboratóriumában, 188. old.

Záróvizsga tematika

A klasszikus mechanika alapjai | A klasszikus mechanika elméleti tárgyalása | A relativitás elmélet alapjai | Egzaktnak megoldható fizika problémák | Folytonos közegek mechanikája | Fenomenologikus termodinamika | Elektro- és magnetosztatika, áramkörök | Elektrodinamika | Hullámegyenlet és hullámoptika | **Geometriai optika és alkalmazásai** | A kvantumelmélet alapvető kísérletei | A kvantummechanika elméleti háttere | Atom- és molekulaszervezet | A magfizika alapjai | A termodinamika statisztikus alapozása | Kvantumstatisztikák | Kölcsönható rendszerek, mágneses anyagok | Kristályos anyagok fizikája | Nemegegyensúlyi folyamatok leírása | Az asztrofizika alapjai

Tételek

A lap eredeti címe: „http://mafihe.hu/~wiki/wiki/index.php/Geometriai_optika_%C3%A9s_alkalmaz%C3%A1sai”

- A lap utolsó módosítása: 2009. augusztus 19., 20:19

A kvantumelmélet alapvető kísérletei

A TételWiki wikiből

Tartalomjegyzék

- 1 Hőmérsékleti sugárzás és a Planck-törvény
- 2 Fotoeffektus
- 3 Compton-effektus
- 4 A Frank-Herz-kísérlet
- 5 A Rutherford-kísérlet
- 6 Atommodellek
- 7 A de Broglie hipotézis és a Davisson-Germer-kísérlet
- 8 A Stern-Gerlach-kísérlet
- 9 Az Einstein-de Haas-kísérlet
- 10 A Zeeman-effektus
- 11 Az elektron adatainak mérése
 - 11.1 Az elektron fajlagos töltésének mérése: a Thompson-kísérlet
 - 11.2 Az elektron töltésének és tömegének mérése: A Millikan-kísérlet

Hőmérsékleti sugárzás és a Planck-törvény

A felmelegített testek sugároznak, mégpedig minél nagyobb hőmérsékletűek, annál jobban. Az már sejthető volt a XIX. század végén is, hogy a hőszugárzás is az elektromágneses sugárzás egy formája, ezáltal rá is a Maxwell-egyenletek érvényesek. Ez alapján próbálta meg Rayleigh és Jeans levezetni a sugárzás energiasűrűségének frekvencia szerinti eloszlását. Ehhez egy zárt dobozban elhelyezett test által kisugárzott elektromágneses állóhullámok egyenleteit írták fel, és kihasználták az ekvipartíció tételét is, mint a különböző frekvenciáknak megfelelő oszcillátorokra jutó energiát leíró formulát. Az eredmények azonban nem voltak fényesek. A mérésekkel csak kis frekvencián egyeztek, továbbá a kapott eloszlás a nagy frekvenciák felé divergált, nem volt normálható. Ez az úgynevezett ultraibolya-katasztrófa.

Max Planck-nak volt azaz ötlete, hogy az oszcillátor energia esetleg nem folytonosan vehet fel értéket, hanem csak diszkrét csomagokban, ezáltal hibás az ekvipartíció kihasználása. A Planck által levezetett frekvenciaeloszlás:

$$u(\nu) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{\beta h\nu} - 1}$$

Ez jól írja le a kísérleti eredményeket, továbbá normálható, és kihozható belőle másik két fontos összefüggés a Stefan-Boltzmann-törvény, amely a teljes kisugárzott teljesítményt írja le:

$$u = \frac{\sigma T^4}{8\pi^5 k^4}$$

$$\sigma = \frac{15h^3 c^3}{15h^3 c^3}$$

Továbbá kihozható belőle a sugárzási görbe maximumának hőmérséklet növekedés hatására bekövetkező eltolódása a nagyobb frekvenciák felé, ez a Wien-törvény:

$$\nu_{max} = \frac{kT}{h} x_{max}$$

Fotoeffektus

113/209

Többek között Lénárd Fülöp is vizsgálta azt a jelenséget, amelyben egyes fémek UV fényel történő megvilágításának hatására elektronok lépnek ki a fémből. A következő megállapításokat sikerült tenni:

- A kirepülő elektronok sebessége nem az intenzitástól, hanem a frekvenciától függ.
- A kirepülő elektronok száma az intenzitástól függ.
- Bizonyos küszöb frekvencia alatt semmilyen effektus nem mutatkozik.

A korabeli klasszikus elmélet szerint a fémben behatoló fény energiáját szedi össze az elektron és ezáltal tud kilépni. Ennek utánaszámolva teljesen használhatatlan eredményeket kapunk. A jelenséget csak úgy sikerült megmagyarázni, ha a fény kvantumokban éri el a fémfelületet, és az által hordozott energiát egyben elnyeli az elektron, és az így nyert energia többlete fedezi a kilépésmunkát és a visszamaradó kinetikus energiát, ha azonban nem tudja fedezni a kilépésmunkát, akkor semmi sem történik. A jelenség energiámérlege:

$$h\nu = W + \frac{1}{2}mv^2$$

A jelenséget Einstein magyarázta meg.

Compton-effektus

Nagyfrekvenciájú elektromágneses sugárzások anyaggal való kölcsönhatását vizsgálva Compton arra a megfigyelésre jutott, hogy a sugárzás frekvenciája megváltozik az anyagon való áthaladásakor. A tárgyat sugárzások energiája olyan nagy, hogy azok a kötési energiát messze felülműlják, ezért a folyamat szabad elektronon való szóródásként tárgyalható, teljesen klasszikus részecske szemléletben is. Felírva az energia és az impulzusmegmaradást, kiszámolható a hullámhosszváltozás:

$$\Delta\lambda = 2\lambda_0\sin^2\frac{\Delta\phi}{2}$$

Ahol $\Delta\phi$ a foton eltérülésszöge, $\lambda_0 = \frac{h}{mc}$ a foton Compton-hullámhossza, amely annak a fotonnak a hullámhossza, amelynek energiája megegyezik az elektron nyugalmi energiájával. A fenti formula a kísérletekkel jó egyezést mutat, és ezzel a fény korpuszkuláris természetét támasztja alá.

A Frank-Herz-kísérlet

Ebben a kísérletben gyorsított elektronokat ütköztettek ritka gázzal. Az ütközés térmentes környezetben történt, az elektronokat repülésük végén galvanométerrel mérték, azaz gyakorlatilag a beérkezett elektronok számát határozták meg. A kísérletben a gyorsító tér nagyságának függvényében vették fel a mért áramerősséget. Az eredmények szerint bizonyos helyeken az áramerősség maximumokat, majd erős visszaeséseket mutatott, és ezek a maximumok szabályos közönként követték egymást. A jelenséget így lehetett magyarázni, ha feltesszük, hogy az energiaátadás csak bizonyos energiáknál történik meg az atomok és az elektronok között. Ha nincs energia átadás, az ütközés rugalmas, ha van akkor rugalmatlan. Ebből az a következtetés vonható le, hogy az atomok elektronjai nem lehetnek tetszőleges energiájú állapotokban, azaz nem nyelhetnek el tetszőleges energiát, tehát a megengedett energiaszintjeik diszkrét.

A Rutherford-kísérlet

Ebben a Rutherford által vezetett kísérletben arany fóliát bombáztak alfarészecskékkel és vizsgálták azok eltérülését kezdeti irányuktól. Egyszer a vizsgálatokat az alfarészecskék érkezésének irányából is megvizsgálták, és arra a meglepő eredményre jutottak, hogy ugyan ritkán, de előfordul, hogy az alfarészecskék visszapattannak a fóliáról. Ismert volt hogy az atom kívülről elektromosan semleges, ugyanakkor tartalmaz elektronokat, amiből az következik, hogy valamilyen pozitív töltésnek is jelen kell lennie a magban, hogy milyen formában, az még vitatott volt. Rutherford eredményei alapján azt lehetett kiszámolni, hogy ez a pozitív töltés az atom méretéhez képest kis helyen, és nagyon sűrűn koncentrálódik az atomban. Egyszerű Coulomb-téren (statisztikus elektromos téren) való szóródási számolásokból értelmezni lehetett a jelenséget.

113/209

Atommodellek

Rutherford kísérlete alapján maga is kidolgozott atommodellt az általa leírt szerkezettel összhangban. A Naprendszer analógiáját használta, úgy képzelte el, hogy az elektronok a pozitív mag körül keringenek, és gravitációs helyett az elektromos erő tartja őket pályán. Ez a feltevés azonban igen rövidéletű volt, hiszen a klasszikus értelmezésben az elektron körpályán haladva sugároz, aminek következtében energiát veszít, és egy idő után beleesik a magba, továbbá az így kisugárzott spektrum folytonos kéne legyen, a valóságban azonban vonalas spektrumokat figyeltek meg.

Ezen vonalas spektrumok leírására tapasztalati törvényt sikerült felírni:

$$\nu = R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

Ezeket a vonalakat nem sikerült megnyugtatóan megmagyarázni, azonban Niels Bohr-nak sikerült ezeket összhangba hoznia a Rutherford-kísérlet eredményeivel és egy atommodellbe egyesítenie a jelenségeket. Feltette a következő posztulátumokat:

- Az atomban mozgó elektronok csak diszkrét pályákon mozoghatnak, a pályákhoz tartozó impulzusmomentum csak diszkrét értékeket vehet fel.
- Ezeket a pályákat tartózkodó elektronok nem sugároznak, sugárzás csak két fentebb definiált pálya közötti átmenetkor történik.
- Az átmenetkor kisugárzott foton energiája a két pálya energiájának különbsége.

Ezeknek a feltételezéseknek Bohr nem tudott hátteret biztosítani, azonban számos jelenséget meg tudott velük magyarázni annak ellenére, hogy a klasszikus gondolkodástól teljesen idegennek hatottak. A vázolt elmélet azonban a Hidrogén, és az ahhoz hasonló alkálifémek spektrumait igen jól leírta. Értelemzini lehetett vele a Frank-Hertz-kísérlet eredményeit is. Azonban az elméletnek igen jelentős korlátai voltak: gyakorlatilag kvantitatíve csak a hidrogénre adott jó leírást a többi atomra nem, és a spektrumvonalak intenzitása sem jött ki. Továbbá a spektrum finomszerkezetét sem magyarázta meg, és az impulzusmomentum függését a kvantumszámoktól is rosszul adja meg. Ennek elelnére alapvető jelentősége volt a mikrovilág kutatásának fellendülésében.

A de Broglie hipotézis és a Davisson-Germer-kísérlet

Planck foton hipotézise alapján de Broglie arra az elméleti feltevésre jutott, hogy nemcsak a fény, de az anyagi alkotók is hullámtulajdonsággal rendelkezhetnek, és a hozzájuk rendelhető hullámhossz:

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

Ezt az elméleti ötletet támasztotta alá Davisson és Germer kísérlete, amelyen a kristályos anyagok vizsgálatánál jól bevált Bragg-féle diffrakciós képletet tudták igazolni elektronokra is:

$$n\lambda = 2d\sin\theta$$

A feltétel alapján n egész értékeire erősítést kell látni az interferenciaképekben. A kísérleteket Nikkel kristályon végezték, amelynek simert volt a d rácsállandója, és de Broglie hullámhossz képletét felhasználva ismert energiájú elektronokra valóban jó egyezés mutatkozott. Ez a kísérlet alapvető fontosságú az anyag hullámtermészetének igazolásában.

A Stern-Gerlach-kísérlet

Ismert volt klasszikus elektrodinamikából, hogy a töltöt részecskék eltérülnek mágneses térben. Ismert volt az is, hogy a áramokhoz mágneses momentum rendelhető, így azok is kölcsönhatnak a mágneses térrel. Stern és Gerlach tulajdonképpen a Bohr-elméletet kívánta tesztelni, ugyanis a jóslat értelmében az elektron pályáihoz tartozó impulzusmomentum csak diszkrét értékeket vehet fel, amiből az is következik, hogy ehez diszkrét mágneses momentum tartozik. A kísérletben ezüst atomokat inhomogén mágneses térben térítették el. Eredményül azt kapták, hogy az atomok a klasszikus folytonos eltérülés helyett diszkrét sávokba rendeződtek, ami a Bohr-féle kvantáltságot

támasztotta alá.

A későbbiekben megvizsgálták a kísérletben, hogy mitörténik ha elektromokkal (vagy hidrogén atomokkal) végzik el a kísérletet. Ekkor is kvantáltság jelentkezett az elhajlási képben, ami arra vezetett, hogy a részecskéknak van valamilyen saját mágneses momentumként viselkedő jellemzője is. Ez vezetett a spin fogalmánka kialakulásához. A későbbiekben megmutatták, hogy az atommagnak is van kvantált mágneses momentuma, ami a magspinből származik.

Az Einstein-de Haas-kísérlet

Ebben a kísérletben egy felfüggesztett ferromágneses hengert vizsgáltak, amely egy tekercsben helyezkedett el, és torziós forgásra volt képes a felfüggesztés körül. Ha a tekercsre elektromos impulzust adtak, a ferromágnes elfordult. Azonban az impulzusmomentum megmaradásának értelmében valaminek el kellett vinnie az impulzusmomentum ellentétes irányú részét. Az eredményeket csak úgy tudták megmagyarázni, ha feltételezték, hogy az elektronok spinje ugyanolyan természetű, mint a klasszikus impulzusmomentum, és a mágneses hatása is van. A kvantitatív elemzésekből kiderült, hogy egy kettes faktor különbség van a klasszikus köráram értelmezés és a mérési eredmények között. Ez egy újabb érv volt a kvantummechanikai tárgyalás sikeressége mellett.

A Zeeman-effektus

A spektrumvonalakat mágnesestérben vizsgálva Zeeman arra a megfigyelésre jutott, hogy azok különböző számú vonalakra hasadnak fel, a térszélkül látható egyes vonalakkól. A jelenséget úgy magyarázták meg, hogy alapesetben a vonalak azonos energiájú elektron konfigurációknak felelnek meg, amelyek ezért nem különböztethetőek meg egymástól. Mágneses térbe helyezve azonban ez a degeneráció (egybeesés) megszűnik, hiszen minden kvantumszámban különbözniük kell az elektronoknak, és a vonalak felhasadnak (általában páratlan számú alvonalra).

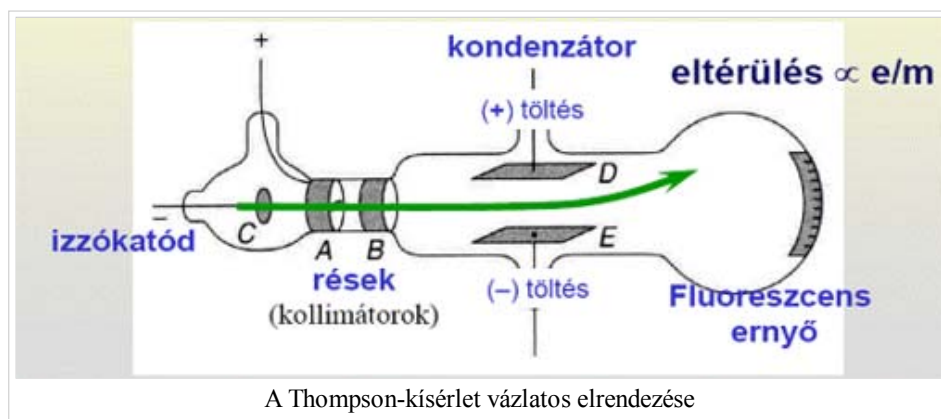
Ha a párosítatlan spinű elektronok átmeneteit vizsgálták, akkor azonban még az előző módszerrel sem lehetett értelmezni a jelenséget, hiszen a kísérletek idején még nem volt ismert a spin, ezért ez utóbbi, páros felhasadásokkla járó effektust anomális-Zeeman effektusnak neveztél el.

Az elektron adatainak mérése

Az elektron fajlagos töltésének mérése: a Thompson-kísérlet

Tegyük fel, hogy a \mathbf{v}_0 kezdősebességű fajlagos töltésű részecske úton a \mathbf{v}_0 sebességre merőleges \mathbf{B} indukcióvektorral jellemzett mágneses térben mozog és az eltérülés kicsi. Ekkor a gyorsulás közelítőleg állandó,

merőleges a \mathbf{v}_0 -ra és nagysága: $\mathbf{a} = \frac{q\mathbf{v}_0\mathbf{B}}{m}$



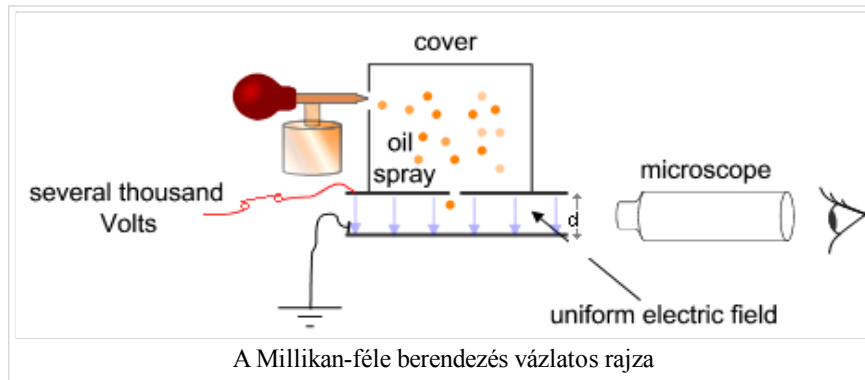
A részecske közelítőleg úgy mozog, mint egy: $\mathbf{E} = \mathbf{v}_0 \times \mathbf{B}$ elektromos térben: Thomson 1897-ben úgy határozta meg az elektron fajlagos töltését, hogy megmérte egy adott sebességű elektronnyaláb eltérülését a sebességre

merőleges elektromos térben: $y = \left(\frac{q}{m}\right) \mathbf{E} \frac{l_1}{v_0^2} \left(\frac{1}{2}l_1 + l_2\right)$ majd $< math > v_0$ -ra és \mathbf{E} -re merőleges \mathbf{B}

116/209

indukciójú térrel visszaállította a nyalábot eredeti helyzetébe. Ekkor a kereszttezett tér sebességszűrőként működik, csak a: $v_0 = \frac{E}{B}$ sebességű részecskék „jutnak át” (pontos v_0 mérés \rightarrow pontos e/m mérés).

Az elektron töltésének és tömegének mérése: A Millikan-kísérlet



Cél: az elektromos tér változtatásával és a nehézségi erő kimérésével meghatározni az elektron töltését. Millikan ehhez két fémlemez közé juttatott olajcseppeket (az olajcseppek porlasztáskor töltéshez jutnak). A lemezek közötti feszültség változtatásával a töltött cseppek töltését a következőképpen mérte meg:

A folyamat kezdetén – mivel ekkor még nem aktiváljuk az elektromos mezőt – az olajcseppek szabadon esnek a lemezek között. A cseppek rövid idő alatt eléri a végsebességüket a kamrában lévő levegőrészecskékkel való ütközés következtében létrejövő sűrűlódás miatt. Ekkor aktiváljuk az elektromos mezőt, és ha az megfelelően nagy, néhány részecske (a töltéssel rendelkezők) emelkedni kezdenek (mivel a rájuk ható F_E elektromos mező által az olajcsepre kifejett, "felfelé" ható erő nagyobb lesz, mint a "lefelé" ható G nehézségi erő). Egy megfelelően tűnő olajcsepp kiválasztása és a mikroszkóp látómezejének közepére mozgatása után a feszültség kikapcsolásával elérjük, hogy a kiválasztott cseppen kívül minden más csepp leessen. A kísérlet további részében tehát már csak ezzel az egy cseppel dolgozunk.

A kiválasztott cseppet hagyjuk, hogy szabadon essen. Kis tömegéből kifolyólag gyorsan eléri a végsebességét, amikor más nem hat rá erő, vagyis a gravitációs erő kiegyenlítődik a közegellenállással, ami meghatározható a Stokes-törvényből:

$$F_K = 6\pi r \eta v_1$$

ahol v_1 a csepp végsebessége, η a levegő viszkozitása, r pedig a csepp sugara. A súlyát a következő képletből számoljuk (beleszámítva a felhajtóerőt):

$$F_G = \frac{4}{3}\pi r^3 g(\rho - \rho_{\text{levegő}})$$

Ezt a két erőt kiegyenlítve a csepp sugarára a következőt kapjuk:

$$r^2 = \frac{9\eta v_1}{2g(\rho - \rho_{\text{levegő}})}$$

Most bekapcsoljuk az elektromos teret, és olyan erőre állítjuk, hogy a csepp egy új v_2 sebességgel emelkedjen. A rá ható erők: gravitáció, a Stokes-erő és az elektromos erő:

$$F_E = qE = q\frac{V}{d}$$

ahol a V a feszültség, a d pedig a két lemez közötti távolság. A három erő kiegyenlíti egymást:

$$F_E = F_G + F_K$$

ha behelyettesítjük az előző mérés eredményét, akkor megkapjuk a csepp töltését:

116/209

117/209

$$q = \frac{6\pi r r \eta}{E} (v_1 + v_2)$$

Millikan azt tapasztalta, hogy a kapott q értékek egy bizonyos érték többszöröse, ez pedig az elektron töltése:

$$q = 1.602 \cdot 10^{-19} C$$

Záróvizsga tematika

Tételek

A klasszikus mechanika alapjai | A klasszikus mechanika elméleti tárgyalása | A relativitás elmélet alapjai | Egzaktul megoldható fizika problémák | Folytonos közegek mechanikája | Fenomenologikus termodinamika | Elektro- és magnetosztatika, áramkörök | Elektrodinamika | Hullámegyenlet és hullámoptika | Geometriai optika és alkalmazásai | **A kvantumelmélet alapvető kísérletei** | A kvantummechanika elméleti háttere | Atom- és molekulaszervezet | A magfizika alapjai | A termodinamika statisztikus alapozása | Kvantumstatisztikák | Kölcsonható rendszerek, mágneses anyagok | Kristályos anyagok fizikája | Nemegyensúlyi folyamatok leírása | Az asztrofizika alapjai

A lap eredeti címe: „http://mafihe.hu/~wiki/wiki/index.php/A_kvantumelm%C3%A9let_alapvet%C5%91_k%C3%ADs%C3%A9rletei”

- A lap utolsó módosítása: 2009. augusztus 19., 20:27

A kvantummechanika elméleti háttere

A TételWiki wikiből

A XIX. és XX. század fordulóján felhalmozódott kísérleti tapasztalatok abba az irányba mutattak, hogy az atomi szinteken mérhető fizikai mennyiségek a klasszikus szemlélettel szemben diszkrét értékeket vesznek fel folytonos helyett. Ez szükségessé tette olyan matematikai formalizmus bevezetését, amelytől nem idegen a diszkrét értékek megjelenése. Heisenberg, Dirac és Schrödinger voltak a formalizmus kialakulásának legnagyobb úttörői.

Tartalomjegyzék

- 1 A kvantummechanika matematikai alapjai
- 2 Analógia a Poisson-zárójel és a kommutátorok között (*)
- 3 Kvantummechanikai reprezentációk
- 4 A hullámfüggvény valószínűségi értelmezése
 - 4.1 Koppenhágai axiómák
 - 4.2 A kvantummechanika mértékinvarianciája
- 5 A Schrödinger-egyenlet
- 6 Heisenberg-kép
- 7 Határozatlansági-elv
- 8 Az energia-idő határozatlansági reláció
- 9 Hullámcsomag
- 10 Az impulzusmomentum operátor
- 11 A Schrödinger-egyenlet szeparálása
- 12 A spin és a Pauli-egyenlet
- 13 Korrespondencia-elv, Ehrenfest-tétel
- 14 EPR-paradoxon, Bell-egyenlőtlenség

A kvantummechanika matematikai alapjai

A kvantummechanikában a fizikai mennyiségekhez operátorokat rendelünk. Az általunk mérhető értékeket a fizikai mennyiség operátorának sajátértékeivel azonosítjuk. Mivel az általunk mért értékek valósak, ez azonnal megköveteli az az operátorokra: azoknak önadjungáltaknak kell lenniük:

$$A = A^\dagger$$

Az adjungált operátorra definíció szerint:

$$\langle A^\dagger u | v \rangle = \langle u | A v \rangle [1] \text{ (http://hu.wikipedia.org/wiki/Braket-jelölés)}$$

a Hilbert-tér bármely u, v elemeire. Ez mátrixreprezentációban a transzponált komplex konjugáltját jelenti.

A klasszikus mechanikában a kanonikus formalizmus igen koherens és logikus tárgyalásmódot jelentett, ezért ezt tovább visszük axióma szerűen a kvantummechanikában, és megköveteljük a klasszikusan fennálló kanonikus relációk teljesülését. Klasszikusan az anyagi rendszer helykoordinátákkal jellemezzük, az impulzust a helykoordinátákhoz konjugált mennyiségként vezetjük be:

$$p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}$$

Axiomatikusan megköveteljük, hogy a hely és az impulzus operátora teljesítse a következő, Heisenberg-féle felcserélési relációkat:

119/209

$$\begin{aligned} [p_k, q_l] &= \frac{\hbar}{i} \mathbf{I} \delta_{kl} \\ [p_k, p_l] &= 0 \\ [q_k, q_l] &= 0 \end{aligned}$$

Itt a $[a, b] = ab - ba$, kommutátor, δ_{kl} pedig a Kronecker-delta.

Analógia a Poisson-zárójelek és a kommutátorok között (*)

A klasszikus mechanikából ismert Poisson-zárójelek szerepe nagyon hasonlít a kvantummechanikai kommutátorokéhoz, hiszen ha visszaemlékszünk:

$$\begin{aligned} \{p_i, p_j\} &= 0 \\ \{q_i, q_j\} &= 0 \\ \{p_i, q_j\} &= \delta_{ij} \end{aligned}$$

A Poisson-zárjelekkel felírva egy mennyiség időfejlődését a következőt kapjuk:

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

ahol a Poisson-zárójel definíciója:

$$\{a, b\} = \frac{\partial a}{\partial q} \frac{\partial b}{\partial p} - \frac{\partial a}{\partial p} \frac{\partial b}{\partial q}$$

ahol a és b az általánosított koordináták és impulzusok függvénye.

Ez kísértetiesen hasonlít a kvantummechanikai Heisenberg-képben az operátorok időfejlődését leíró egyenletre (lásd lejjebb).

Kvantummechanikai reprezentációk

A fenti megkötések többféle reprezentációban ki lehet elégíteni, Schrödinger hullámmechanikát épített rá, Heisenberg hermitikus mátrixokkal dolgozott. Elvileg integráloperátorokat is használhatnánk, de azokkal bonyolult számolni. Tradicionálisan a differenciál-egyenletek megoldási apparátusa volt készen, ezért ezzel dolgoztak nagyon sokáig. Később megmutatták, hogy a különböző tárgyalásmódok ekvivalensek. A továbbiakban a Schrödinger-féle reprezentációban dolgozunk. Schrödinger a következő operátorokat vezette be:

$$\begin{aligned} \hat{q} &= q \\ \hat{p} &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q} \end{aligned}$$

Ennek akkor van értelme, ha az operátorok valamilyen folytonos függvényre hatnak. Ezért ebben a reprezentációban a rendszert a koordinátáktól függő hullámfüggvénnyel adjuk meg. Belátható, hogy a bevezetett felcserélési relációkat teljesítik a bevezetett operátorok. A bevezetett hullámfüggvényre további megkötéseink vannak, ha \mathbf{A} valamilyen fizikai mennyiség operátora, akkor fennáll a következő sajátérték-egyenlet:

$$\mathbf{A}\psi = \lambda\psi$$

Ennek csak azon ψ megoldásait fogadjuk el, amelyek egyértékűek, folytonosak, és négyzetesen integrálhatóak, ezeket a függvényeket nevezhetjük reguláris függvényeknek. A továbbiakban a reguláris megoldásokra, mint sajátfüggvényre, az ezekhez tartozó λ paraméterekre, mint sajátértékekre hivatkozunk.

A hullámfüggvény valószínűségi értelmezése

119/209

120/209

A rendszer állapotára bevezettük a hullámfüggvényt: $\psi(\mathbf{q}, t)$. Ennek abszolút érték négyzete meghatározza a koordinátaértékek valószínűségének eloszlását, másképpen $|\psi(\mathbf{q}, t)|^2 d\mathbf{q}$ meghatározza, hogy a $d\mathbf{q}$ elemben mekkora a valószínűsége a \mathbf{q} koordinátaértékek előfordulásának. Speciálisan pontrendszerek esetén visszajutunk a klasszikus koordinátavektorokká váló jellemzésre: $\mathbf{q} = (r_1, \dots, r_N) = \vec{r}$. Ez az értelmezés, hozzávéve azt a tapasztalatot, hogy egy részecskét az ideális detektor valahol mindig megtalál, adja a normálási feltételt, vagyis hogy a hullámfüggvény teljes térre vett integrálja 1.

Koppenhágai axiómák

A fentiek szerint a hullámfüggvény valószínűséget ír le, és a fizikai operátorok rajta sajátértéket vesznek fel méréskor. Ezen fogalmak összekapcsolásának értelmezésére a következőket vezetjük be:

- Ha adott fizikai mennyiséget akarunk megmérni, az eredmény csak annak valamely sajátértéke lehet.
- Ha többszöri mérést végzünk, és a rendszer a fizikai operátor sajátállapotában van, akkor a sajátállapothoz tartozó sajátértéket mérjük, ha nincs sajátállapotban, akkor a hullámfüggvényt ki kell fejteni a sajátértékek bázisán, és a kifejtési együtthatók négyzetei adják az adott sajátértékek mérésének valószínűségeit:

$$|\psi\rangle = \sum_n \alpha_n |\phi_n\rangle$$

$$P(A = a_n) = |\alpha_n|^2$$

A kvantummechanika mértékinvarianciája

A $\psi(\mathbf{q})$ és $\psi(\mathbf{q}) e^{i\chi}$ hullámfüggvényt fizikai szempontból egyenértékűnek tekintjük mivel abszolút értékük megegyezik, χ egy tetszőleges függvény. Ezen transzformációk az $U(1)$ csoportot alkotják.

A Schrödinger-egyenlet

(*A levezetés csak a kitekintés kedvéért szerepel itt)

Az axiomatikus felépítésben érdemes megjegyezni, hogy igen kevés alapfeltevésből eljuthatunk a kvantummechanika talán legalapvetőbb egyenletéhez, a Schrödinger-egyenlethez. Az előzőekben bevezettük a hullámfüggvényt. Erre a sajátérték egyenlet alapján kiróttuk a regularitást, amely alapján a függvény négyzetesen integrálható. Teljesen jogosan várhatjuk el, hogy ez minden időpillanatban teljesüljön a hullámfüggvényre, azaz **az időfejlődés megtartja a normát**. Vezessünk be egy kezdetben tetszőleges $\mathbf{G}(t)$ időfejllesztő operátort. Ez az operátor a hullámfüggvényt t idővel későbbi állapotába viszi át. Követeljük meg, hogy ez a transzformáció független legyen attól, hogy ez az eltolás milyen kezdőponthoz képest történik, azaz legyen **időeltolási szimmetria**. Ez teljesen analóg a klasszikus mechanikánál tapasztaltakkal. Végül követeljük meg, hogyha két egymás utáni transzformációt (időfejllesztést, pl t_1 és t_2) végzünk, az ekvivalens legyen egyetlen, az időkülönbségek összegével jellemzett időfejllesztéssel ($t_3 = t_1 + t_2$). Másszóval **az időfejlődés egyparaméteres csoportot alkot**. A fentiekből némi algebrai átalakításokkal, és a normafeltétel kihasználásával belátható, hogy a \mathbf{G} operátor unitér, azaz az adjungáltja az inverzével egyenlő. További algebrai átalakításokkal, és az egyparaméteres csoportok azon tulajdonságát kihasználva, hogy felírhatóak egy másik exponencializált operátor segítségével kapjuk a következő összefüggést:

$$G(t) = e^{-t\mathbf{Z}}$$

\mathbf{G} unitérségéből belátható, hogy \mathbf{Z} anti-hermitikus, azaz sajátértékei tisztán képzetesek. Vezessük be ennek az operátornak az i -szeresét, ez már hermitikus lesz, és a sajátértékei valóságos lesznek:

$$\mathbf{S} = i \cdot \mathbf{Z}$$

Mivel t dimenziója s, ezért \mathbf{S} dimenziójának $1/s$ -nek kell lennie. Önkényesen bevezethetünk egy másik hermitikus operátort, amelynek a dimenziója Joule:

$$\mathbf{S} = \frac{1}{\hbar} \mathbf{H}$$

120/209

121/209

Ekkor \mathbf{G} alakja:

$$\mathbf{G}(t) = e^{-t\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}}$$

Egy tetszőleges ψ_0 kezdőfeltételből indítva:

$$\psi(t) = e^{-t\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}}\psi(0)$$

Deriváljuk ezt le idő szerint, és szorozzuk be $i\hbar$ -al:

$$i\hbar\frac{d}{dt}\psi(t) = \mathbf{H}\psi(t)$$

Ez az egyenlet a Schrödinger-egyenlet. Itt azonban még nem derült ki, hogy \mathbf{H} micsoda. Belátható, hogy ez a Hamilton-operátora lesz a vizsgált rendszernek. Az így nyert egyenlet lineáris, azaz a hullámfüggvényre érvényes a szuperpozíció elve: ha ψ_1 és ψ_2 a rendszer lehetséges állapotai akkor $\psi = a_1\psi_1 + a_2\psi_2$ is az. Továbbá feltesszük, hogy ψ és $a \cdot \psi$ ugyanazt az állapotot írja le (a valós). Ezek közül a normálással tudunk kiválasztani egyet.

Heisenberg-kép

Az előző levezetésben természetesen adódott, hogy a hullámfüggvény időfüggő, és ezért nem volt szükség arra, hogy az operátorokról feltegyük, hogy időfüggetlenek. Ezt a tárgyalásmódot, hogy az időfüggés a hullámfüggvényben van Schrödinger-képnek nevezzük. Vizsgáljuk meg egy \mathbf{A} operátor időátlagát:

$$\bar{A}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(t)A\psi(t)dt = \langle \psi(t)|A|\psi(t) \rangle$$

Itt bevezettük a bra-ket jelölés rendszert. Írjuk be az időfüggő hullámfüggvényeket mint a kezdőállapot és az arra ható időfejlesztő unitér operátort \mathbf{G} szorzatát:

$$\bar{A}(t) = \langle \psi(0)|\mathbf{G}^+(t)\mathbf{A}\mathbf{G}(t)|\psi(0) \rangle$$

A belső operátor szorzatot elnevezhetjük egy új időfüggő operátornak. Ezt az időfüggő operátort tekinthetjük \mathbf{A} Heisenberg-képbeli reprezentációjának. Az operátorok időfüggését leíró egyenlet:

$$\frac{dA}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, A] + \frac{\partial A}{\partial t}$$

Határozatlansági-elv

Ha adott egy operátor, amelyet hattatva a rendszer hullámfüggvényére az sajátértéket vesz fel, akkor azt mondjuk, hogy az az operátor sajátállapota, ekkor az értéke határozott, a sajátértéket veszi fel. Ha ez nem teljesül, azaz a hullámfüggvényen nem vesz fel az operátor sajátértéket, ekkor az értéke határozatlan. Ha két operátor kommutál, akkor létezik olyan hullámfüggvény, amelyen mindkettő sajátértéket vesz fel. Azok az operátorok, amelyek egymással nem kommutálnak egy igen alapvető összefüggésnek tesznek eleget. Definiáljuk a közepes eltérést:

$$\Delta O = \sqrt{\overline{(O - \bar{O})^2}}$$

Ekkor két hermitikus operátorra fennáll, hogy:

$$\Delta O_1 \Delta O_2 \geq \frac{1}{2} |\overline{[O_1, O_2]}|$$

Szavakban megfogalmazva: két felnemcserélhető operátor értékét nem lehet egyszerre tetszőleges pontossággal

121/209

122/209

megmérni. Mérésnek tekintünk minden folyamatot, ahol klasszikus és kvantumos objektumnak történik kölcsönhatása. A mérésnek elvi korlátja van. Ezt az összefüggést nevezzük Heisenberg-féle határozatlansági relációnak. A leghíresebb a hely és impulzusra vonatkozó reláció:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

Az energia-idő határozatlansági reláció

Az energia és idő közti határozatlansági reláció az előző sémába nem illik bele, mert az időnek nincs operátora. A kvantummechanika korai alapítóinak is világos volt, hogy egy

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

alakú reláció fennáll, de nem volt rögtön világos, hogy mi Δt . A gyakorlatban ez a reláció pl. azt jelenti, hogy egy rövid életidejű állapot energiája csak nagyon gyengén határozott. Az állapot élettartama azonban nem egy, az állapothoz rendelhető operátor. Egy valamivel precízebb megfogalmazás a következő. Egy Ψ állapotban egy B mennyiségre fennáll a következő reláció:

$$\Delta_\Psi E \frac{\Delta_\Psi B}{\left| \frac{d\langle B \rangle}{dt} \right|} \geq \frac{\hbar}{2}$$

Hullámcsomag

A részecskék hullámtermészete a de Broglie hipotézis óta benne volt a levegőben (lásd A kvantumelmélet alapvető kísérletei). A Schrödinger-egyenletnek vannak síkhullám megoldásai, de ezek nyilván nem azonosíthatóak egy részecskével, mert egyáltalán nem lokalizáltak. A síkhullám-megoldásokból azonban **hullámcsomag** alkotható, matematikailag egy Fourier-integrál formájában. Az egyszerűség kedvéért egy dimenzióban:

$$\Psi(x, t) = \int c(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} dk$$

Ezen integrál értéke azokon a pontokon lesz nagy, ahol az exponenciális tag nem túl erősen oszcillál, hiszen ha túl erős az oszcilláció, az integrál kiegyenlítődik és nullát kap. Tehát ott lesz nagy az integrál, ahol $kx - \omega t$ közel konstans, vagyis:

$$\frac{\partial}{\partial k} (kx - \omega(k)t) = x - \frac{\partial \omega}{\partial k} t = 0$$

Ez hasonlít a tömegpont $x=vt$ képletére, így a klasszikus sebesség hullámmechanikai megfelelője a **csoportssebesség**:

$$\vec{v}_{csop} = \text{grad}_{\vec{k}}(\omega)$$

Az impulzusmomentum operátor

Klasszikusan az impulzusmomentum a következő összefüggéssel van definiálva:

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$$

Ezt visszük át az operátoros reprezentációba, a hely és impulzus operátorokat beírva. Egyszerű behelyettesítésekkel igazolhatóak az alábbi képletek (amelyek nem csak a z komponensre állnak fennt, a többire csak permutálni kell az indexeket):

$$\mathbf{L}_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

$$[\mathbf{L}_x, \mathbf{L}_y] = i\hbar\mathbf{L}_z$$

$$\mathbf{L}^2 = \mathbf{L}_x^2 + \mathbf{L}_y^2 + \mathbf{L}_z^2$$

\mathbf{L} felcserélhető bármelyik komponensével. Ebből következik, hogy van közös sajátfüggvényük. Polárkoordinátás áttérés után a sajátérték probléma megoldható, eredményül megkapjuk a sajátfüggvényeket és a sajátértékeket. A z komponensre:

$$\lambda = m\hbar$$

$$\psi_m = A e^{im\phi}$$

Az impulzusmomentum négyzetére:

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

$$\psi_{l,m} = \sin^{|m|} \theta P_l^m(\cos\theta) e^{im\phi}$$

Itt P a módosított Legendre-polinomot jelöli, maga a sajátfüggvény az úgynevezett gömbfüggvény, amely a két térbeli szög, és két másik egészszám függvénye. Ez utóbbiak felelnek meg mágneses- és mellékkvantumszámnak a hidrogénatom esetében.

A Schrödinger-egyenlet szeparálása

Amikor a Schrödinger-egyenletet centrális potenciálban oldjuk meg, a potenciál csak a sugár abszolútértékétől függ. Polárkoordinátás tárgyalásban érezhető, hogy a sugárfüggő rész leválasztható a szögfüggő résztől. Ez valóban így van, a hullámfüggvénynek van szorzatalakú megoldása, amelyben a sugárfüggés leválasztódik. A Schrödinger-egyenletbe visszaírva az két egyenletre esik szét. A szögfüggés az impulzusmomentumnál bevezetett sajátfüggvényeket (gömbfüggvényeket) és sajátértékeket adja, ez tehát minden centrális erőteret problémára ugyanaz. Egy speciális potenciálra, a hidrogénatomra, az integrálható problémáknál kidolgozzuk a megoldást.

A spin és a Pauli-egyenlet

A kísérleti bevezetőben említésre került Stern-Gerlach-féle kísérlet, amely tulajdonképpen a benne áthaladó részecskék impulzusmomentumát méri. A kísérletek csak úgy értelmezhetőek ellentmondásmentesen, ha feltételezzük, hogy a részecskéknek van saját impulzusmomentumuk is. Ezt **spin**nek nevezzük, és az \mathbf{S} operátort rendeljük hozzá.

Az eddigi tárgyalásokban nem voltunk tekintettel erre a mennyiségre. Tudjuk, hogy van a részecskéknek impulzusmomentuma (\mathbf{L}), ezt megkülönböztetésül pályamomentumnak nevezzük mostantól. A két momentum összegére bevezetjük a teljes impulzusmomentumot: $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. A pályamomentumnak ismertek a sajátértékei, a spinről pedig a kísérletek alapján belátható, hogy két féle értéke lehet: $+\frac{\hbar}{2}$ és $-\frac{\hbar}{2}$.

A mágneses hatás leírásához a pályanyomatéknál elég volt a klasszikus analógia:

$$\mathbf{M} = -\frac{e}{2mc} \mathbf{L}$$

A spinhez tartozó mágneses momentumot a kísérletek alapján:

$$\mathbf{M}_S = -\frac{e}{mc} \mathbf{S}$$

definiálja. Ezt a Schrödinger-egyenlet nem tartalmazza, azonban a pontos leíráshoz szükséges ennek figyelembevétele. Mivel a spin kétféle értéket vehet fel, és érvényes a szuperpozíció elve, ezért bevezetünk két

124/209

rész-hullámfüggvényt amelyek lineárkombinációja adja a teljes hullámfüggvényt, az együtthatók pedig a spinsajátfüggvények (pl.: (1, 0) és (0, 1) ha vektorként reprezentáljuk őket). A mágnesestérrel való kölcsönhatást klasszikus analógia alapján adjuk hozzá a Schrödinger-egyenlethez. Ismert klasszikus mechanikából a ponttöltés mozgásegyenlete (H a mágneses tér):

$$m\dot{\mathbf{v}} = -e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{H} \right)$$

Belátható, hogy ezt a mozgásegyenletet előállító Hamilton-függvény (ez most másik H):

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - e\Phi(r)$$

Ezt operátorrá alakítva betesszük a Schrödinger-egyenletbe, és a hullámfüggvényként a spint is figyelembe vevő hullámfüggvényt tekintjük:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi(t) = \left[\frac{1}{2m} \left(\sigma \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right)^2 - e\Phi(r) \right] \psi(t)$$

Az így kapott egyenlet a Pauli-egyenlet. Felbukkantak a Pauli-mátrixok (σ , pontosabban a képletben a 3 mátrixból képzett vektor áll, és a mellette zárójelben szereplő mennyiséggel skalárisan kell szorozni, hiszen az is egy vektor). Ezek a spinnek az algebrájában szerepet játszó 2x2-es mátrixok, velük írhatóak fel a spinoperátorok is:

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_x &= \frac{\hbar}{2} \sigma_x \\ \mathbf{S}_y &= \frac{\hbar}{2} \sigma_y \\ \mathbf{S}_z &= \frac{\hbar}{2} \sigma_z \end{aligned}$$

A mátrixok explicit alakjait lásd itt (http://en.wikipedia.org/wiki/Pauli_matrices).

Korrespondencia-elv, Ehrenfest-tétel

Az eddigiekből látható, hogy a kvantummechanika működése és felépítése nagyban különbözik a klasszikus leírástól, a klasszikus törvények nem alkalmazhatóak változatlanul a mikrovilág leírására. Azonban a kvantumelméletet, mint mélyebb elméletet tekintve felmerül a kérdés, hogy nem tartalmazza-e valamilyen módon a klasszikus törvényeket. A válasz az, hogy igen, a klasszikus rendszerek felfoghatóak sok kvantumszámú összetett rendszerekként, ezért a kvantumosan megfogalmazott törvényeknek nagy kvantumszámokra történő (illetve a Planck-állandóval zérushoz tartó) határátmeneteit kell ekkor vizsgálnunk, és az állítás az, hogy ekkor visszakapjuk a megfelelő klasszikus törvényeket. Ezt az állítást korrespondencia-elvnek (megfeleltetési-elv) nevezzük, és megfogalmazása Niels Bohr nevéhez kötődik.

A korrespondencia-elv egyik ékes bizonyítéka az Ehrenfest-tétel. Tekintsük egy fizikai mennyiség operátorának várható értékét:

$$\bar{O} = \langle \psi | \mathbf{O} | \psi \rangle$$

Számoljuk ki ennek időbeli változását a Schrödinger-egyenlet alapján. Ekkor levezethető, hogy abban az esetben, amikor az operátor nem függ az időtől (minden időfüggés a hullámfüggvény változása miatt történik), akkor a következő formula érvényes:

$$\frac{d\bar{O}}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle \psi | [\mathbf{H}, \mathbf{O}] | \psi \rangle$$

Ha \mathbf{O} helyére a hely vagy az impulzus operátorát írjuk, a következő ismerős összefüggéseket kapjuk:

124/209

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = \langle \psi | \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial p_x} | \psi \rangle$$

$$\frac{d\bar{p}_x}{dt} = -\langle \psi | \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial x} | \psi \rangle$$

Ezek a klasszikus mechanikából ismert kanonikus egyenletek.

Ha egy pontrészcseke mozgását leíró Hamilton-operátort tekintjük, amely potenciált is tartalmaz:

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m} (\mathbf{p}_x^2 + \mathbf{p}_y^2 + \mathbf{p}_z^2) + V(x, y, z)$$

Akkor a helykoordinátákra a következő kifejezés adódik:

$$m \frac{d^2 \bar{x}}{dt^2} = -\frac{\partial V}{\partial x}$$

A baloldalon a gyorsulás, a jobboldalon a ható erő ismerhető fel, azaz visszakaptuk a Newton-törvényt. Amennyiben a potenciál lassan változik, sorfejtést alkalmazhatunk Δx szerint, és akkor a következő eredményt kapjuk:

$$m \frac{d^2 \bar{x}}{dt^2} = -\frac{\partial V}{\partial \bar{x}}$$

azaz lassan változó potenciál esetén elég a koordináta értékeket átlagolni. Tulajdonképpen ez felel meg a klasszikus törvényeknek: amikor a távolságok kicsik a változó potenciálváltozáshoz képest, akkor beszélhetünk klasszikus részecskéről, mert nem követünk el nagy hibát (a sorfejtésben csak a vezető tag nagy), azonban atomi mércén már számos tag jelentős a sorfejtésben, ekkor a klasszikus számolási menet használhatatlan. Az Ehrenfest-tétel tehát az operátor várható értékén keresztül kapcsolatot teremt a klasszikus mechanika és a kvantummechanika között, egyben behatárolva az előbbi érvényességi körét.

EPR-paradoxon, Bell-egyenlőtlenség

A kvantummechanika furcsaságainak és klasszikus gondolkodással szembenálló működésének egyik leglátványosabb példája az Einstein-Podolsky-Rosen által felvetett gondolat kísérlet és annak interpretációja. A gondolat kísérlet egy összefonódott, eltávolodó kvantummechanikai rendszerre vonatkozik (például bomlásban keletkező két ellentétes spinű részecske, vagy két ellentétes polarizációval szétrepülő foton). A felvetés arra pontosul, hogy mit történik amikor megakarjuk mérni a valamely fizikai jellemzőt, amelyre a teljes rendszerben megmaradási törvény érvényes (azaz, ha tudnánk az egyik "rész" értékét, például spinjét, abból meghatározható lenne a másiké).

A mérési problematikát Einsteinék a következő két lehetőségben foglalták össze:

- Vagy az egyik rendszeren végzett mérésnek hatása van a másik B rendszerre, és ezáltal egyetlen méréssel meghatározható mindkét rész állapota
- Vagy van valami olyan rejtett tulajdonság, amelyet a kvantummechanika nem vesz figyelembe, ezért nem teljes a leírásunk a jelenségről, és ez határozza meg, hogy mit is fogunk mérni.

Az első lehetőség a relativitás elmélettel, és a kauzalitással lenne ellentmondásban, a második rejtett paraméterek bevezetését tenné szükségessé, amelyek a kvantummechanikánál mélyebb elméletre utaló jelek lennének.

Az első nyilván tarthatatlan, a kauzalitást eddig minden tapasztalatunk igazolta, ezért a második állítást kezdték el részletesen vizsgálni. Amennyiben létezik rejtettparaméteres elmélet, akkor annak is kell jóslatokat adnia egyes mérhető mennyiségekre, ugyanígy a kvantummechanika is ad jóslatokat. Levezethető, hogy például két kimenetű kísérletekben két mérhető mennyiség korrelációjára általános limit adható (a háromszög egyenlőtlenség felhasználásával), ez a limit vezet a Bell-egyenlőtlenséghez. Ugyanakkor a kvantummechanikából is levethető a két mennyiség korrelációja. Az eredmények vizsgálatával azt látjuk, hogy egyes esetekben a kvantummechanika sérti a rejtettparaméteres moellre fennálló limiteket, azaz az előbbi nem lehet konzisztens alap a kvantumelmélet leírásához!

126/209

A gyakorlatban a Bell által levezetett egyenlőség kevésbé használható (nehezebb ilyen kísérletet készíteni), helyette az általánosabb (általánosabb rejtett paraméteres modelleket magábanfoglaló) CHSH (http://en.wikipedia.org/wiki/CHSH_inequality) egyenlőtlenség használatos.

A kísérletek elvégzésével megmérhetők a korrelációk a valóságban is. Az eredmény: a kvantummechanikai leírás minden esetben helyes jóslatot ad.

Ezek alapján nem konstruálható rejtettparaméteres modell, és elvetettük a távolhatás lehetőségét is. Ezek után felmerül a kérdés, hogy mi a helyzet az EPR paradoxonnal? A válasz az, hogy rossz a kérdésfelvetés. A paradoxon oka, hogy a **kvantummechanikai rendszernek NINCS részrendszere!** Nem beszélhetünk a részrendszernek állapotáról, mennyiségéről, a részrendszerek össze vannak fonódva, csak együtt tárgyalhatók.

A történet tovább bonyolítható, problémák jelentkeznek abban, hogy a kvantummechanikai valószínűség fogalom kissé eltér a Kolmogorovi klasszikus valószínűség fogalomtól. Ha hozzávesszük azt is, hogy a kvantummechanikai valószínűségek nem tekinthetők önálló eseményekként, hanem valamilyen korábbi kiváltó okokkal állnak kapcsolatban feltételes valószínűségeken keresztül, akkor létesíthető olyan rejtett paraméteres modell, amelyet nem sértenek a kísérletek, és a kvantummechanikai jóslatok, ez a gondolatmenet azonban teljes determinizmushoz vezet.

Záróvizsga tematika

Tételek A klasszikus mechanika alapjai | A klasszikus mechanika elméleti tárgyalása | A relativitás elmélet alapjai | Egzaktnál megoldható fizika problémák | Folytonos közegek mechanikája | Fenomenológikus termodinamika | Elektro- és magnetosztatika, áramkörök | Elektrodinamika | Hullámegyenlet és hullámoptika | Geometriai optika és alkalmazásai | A kvantumelmélet alapvető kísérletei | **A kvantummechanika elméleti háttere** | Atom- és molekulaszervezet | A magfizika alapjai | A termodinamika statisztikus alapozása | Kvantumstatisztikák | Kölesönható rendszerek, mágneses anyagok | Kristályos anyagok fizikája | Nemegeyensúlyi folyamatok leírása | Az asztrofizika alapjai

A lap eredeti címe: „http://mafihe.hu/~wiki/wiki/index.php/A_kvantummechanika_elm%C3%A9leti_h%C3%A1ttere”

- A lap utolsó módosítása: 2009. augusztus 19., 20:28

Atom- és molekulaszervezet

A TételWiki wikiből

Tartalomjegyzék

- 1 Perturbációs számítás
 - 1.1 Időfüggetlen, nem-degenerált eset
 - 1.2 Időfüggetlen, degenerált eset
 - 1.3 Időfüggő eset
 - 1.4 Fermi-féle aranyszabály
- 2 Variációs módszer
 - 2.1 Ritz-féle variációs módszer (*)
- 3 Problémák a kvantummechanika közelítő módszereivel
- 4 Azonos részecskék, Pauli-elv
- 5 Átlagtérközelítés
 - 5.1 Nem kölcsönható azonos részecskék
 - 5.2 Átlagtérközelítés
 - 5.3 Hartree-Fock módszer
- 6 A periódusos rendszer
- 7 Viriál-tétel(*)
- 8 A Born-Oppenheimer közelítés
- 9 Hellmann-Feynman tétel (*)
- 10 A kémiai kötés
- 11 A hidrogén atom
 - 11.1 A Schrödinger-egyenlet megoldása Coulomb-potenciálban
- 12 Atomi energianívók termjelölése
- 13 Mágneses momentumok
- 14 Finomfelhasadás
 - 14.1 Spin-pálya kölcsönhatás
- 15 Hiperfinom felhasadás
 - 15.1 A magmágneses dipólmomentum hatása
- 16 Lamb shift
- 17 A hélium atom
- 18 Stark-effektus
- 19 Zeeman-effektus
- 20 A molekulaion, kicserélődési kölcsönhatás(*)
- 21 Kéttomos molekulák
 - 21.1 Általános megjegyzések
 - 21.2 A vegyérték
 - 21.3 A H₂ molekula(*)
- 22 Molekulák rezgési és forgási spektruma
 - 22.1 IR- és Raman-spektroszkópia
- 23 Alagút-effektus

Perturbációs számítás

A kvantummechanikában előbukkanó problémák általánosságban nem oldhatóak meg egzaktul. Sokszor van azonban, hogy a vizsgált rendszer Hamilton-operátora csak kicsit különbözik egy amúgy egzaktul megoldható problémától:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{K}$$

Azt várjuk, hogy ekkor a megoldás is csak kicsit fog különbözni az egzakt megoldástól. Az ilyen alakú problémák megoldási módszerét perturbációs számításnak nevezzük.

Időfüggetlen, nem-degenerált eset

Ebben az esetben azokat a problémákat vizsgáljuk, amikor \mathbf{K} időfüggetlen és a perturbálatlan probléma nem elfajult, azaz minden sajátértékhez egyetlen sajátfüggvény tartozik. Feltesszük, hogy a perturbálatlan esethez ismerjük a megoldásokat, és a fentiek ismeretében keressük a perturbált megoldásokat:

$$\mathbf{H}_0 \psi_k = E_k^{(0)} \psi_k$$

Rayleigh-től eredő trükk a perturbáló operátor kicsinsységének figyelembevételére az, hogy egy kis λ paraméter szerint fejtünk sorba, amely majd később kapja vissza a $\lambda = 1$ értéket:

$$\mathbf{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{K}$$

A λ -ban nulladrendet az ismert perturbálatlan megoldás adja. Bázisnak érdemes a perturbálatlan probléma sajátfüggvényeit használni:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_0 \psi_n &= E_n^{(0)} \psi_n \\ (\mathbf{H}_0)_m n &= E_n^{(0)} \delta_{mn} \end{aligned}$$

Ezen a bázison a Schrödinger-egyenlet mátrixalakja

$$\begin{aligned} \sum_n H_{mn} c_n &= E c_n \\ E_m^{(0)} - E^{(0)} c_m + \lambda \sum_n K_{mn} c_n &= 0 \end{aligned}$$

A sorfejtések:

$$\begin{aligned} E &= E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \dots \\ c_m &= c_m^{(0)} + \lambda c_m^{(1)} + \lambda^2 c_m^{(2)} + \dots \end{aligned}$$

Ezt kell beírni az előző Schrödinger-egyenletbe. A különböző tagok együtthatóiról leolvashatók a különböző rendű korrekciók.

A nulladrend ezt adja:

$$\left(E_m^{(0)} - E^{(0)} \right) c_m^{(0)} = 0$$

Ennek megoldása $E^0 = E_i^{(0)}$ és $c_0^{(0)} = \delta_{im}$.

Az elsőrendű energiakorrekciók:

$$E^{(1)} = K_{ii}$$

Az állapotvektorok elsőrendű korrekciói:

$$c_m^{(1)} = \frac{K_{mi}}{E_i^0 - E_m^0}$$

Az energiák másodrendű korrekciói:

$$E^{(2)} = \sum_{n \neq i} \frac{|K_{in}|^2}{E_i^0 - E_n^0}$$

A módszer alkalmazható, ha a kiszámolt korrekciók tényleg kicsik, vagyis a perturbáció átmeneti mátrixelemei sokkal kisebbek, mint a perturbálatlan energiaszintek különbségei:

$$\left| \frac{K_{mi}}{E_i^0 - E_m^0} \right| \ll 1$$

Időfüggetlen, degenerált eset

Degenerált esetben egyetlen energiasajátértékhez több sajátfüggvény is tartozhat. A perturbáció hatására ezek az energiaszintek fel is hasadhatnak (gondoljunk a Zeeman-effektusra). Ekkor az előző módszer nem alkalmazható. A λ nulladrendjére kapott egyenlet nem határozza meg a nulladrendű sajátvektorokat, mert vannak olyan energiasajátértékek, amelyek megegyeznek. Fel kell használni a következő rendet is. A kapott egyenlet:

$$\sum_n K_{mn} c_n^{(0)} = E^{(1)} c_m^{(0)}$$

Ez így rendezhető át:

$$\sum_n (K_{mn} - E^{(1)} \delta_{mn}) c_n^{(0)} = 0$$

Ezen homogén egyenlet megoldási feltételéből kapjuk a **szekuláris egyenletet** amely megadja az elsőrendű energiakorrekciókat:

$$\det | \mathbf{K} - E^{(1)} \mathbf{I} | = 0$$

Az eredeti egyenletben az elsőrendű energiakorrekciókat visszahelyettesítve megkapjuk a $c_n^{(0)}$ nulladrendű együtthatókat. Ezekután már használhatók a nem degenerált eset képletei.

Időfüggő eset

Az időfüggő perturbációszámítás logikája az eddigiektől eltérő. Mivel kis hatások felhalmozódhatnak hosszú idő alatt, ezért fel szoktuk tenni, hogy a perturbáció csak rövid ideig tart. Most is hasonló sorfejtést alkalmazunk, mint az előbb a perturbálatlan feladat ($\mathbf{H}_0 \psi_n = E_n \psi_n$) sajátfüggvényei szerint kifejtve a megoldást:

$$\psi(t) = \sum_n c_n(t) \psi_n$$

Így a Schrödinger-egyenlet:

$$\dot{c}_n = -\frac{i}{\hbar} E_m c_m(t) + \lambda \sum_n K_{mn} c_n(t)$$

A megoldást hatványsor alakban keressük:

$$c_m(t) = c_m^{(0)}(t) + \lambda c_m^{(1)}(t) + \dots$$

A továbblépés a közönséges differenciálegyenleteknél ismert állandók variálásának módszere. (A kvantummechanikában ebből lett a kölcsönhatási kép.) Legyen:

$$b_m(t) = e^{\frac{i}{\hbar} E_m t} c_m(t)$$

Ez nulladrendben állandó. Ezt az állandót variálja a perturbáció jelenléte.

$$\dot{b}_m(t) = -\frac{i}{\hbar} \lambda \sum_n e^{i\omega_{mn} t} K_{mn}(t)$$

130/209

ahol $\hbar\omega_m n = E_m - E_n$. Az első rendet megkapjuk, ha a jobb oldalon $b_n(t) = b_n(0) = c_n(0)$ közelítést alkalmazunk. A fenti differenciál egyenletről a b együtthatók kiszámolhatóak, segítségével meghatározható a végállapot hullámfüggvénye. Ismert tehát a kezdeti és a végállapot, ebből felírható a K mátrixeleme:

$$K_{mn} = \langle \phi_m | K | \phi_n \rangle$$

Legyen a kezdeti(i) állapot egy perturbálatlan sajátállapot: $c_n(0) = \delta_{in}$. Az átmeneti valószínűség:

$$P_{fi} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i\omega_{fi}\tau} K_{fi}(\tau) d\tau \right|^2$$

Fermi-féle arany szabály

A Fermi-féle arany szabály folytonos/kvázifolytonos spektrumban segít átmeneti valószínűségeket kiszámítani. ω körfrekvenciájú periodikus perturbáció esetén az időegységre jutó átmeneti valószínűség:

$$W_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |\mathbf{K}_{fi}|^2 (\delta(E_f - E_i + \hbar\omega) + \delta(E_f - E_i - \hbar\omega))$$

Ez a formula megkapható az előző pontból kiindulva $t \gg \omega^{-1}$ határérték elvégzésével. Állandó perturbáció esetén:

$$W_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |\mathbf{K}_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i)$$

Ha több állapot valamelyikébe való átmeneti valószínűséget akarjuk tudni, akkor:

$$T_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |\mathbf{K}_{fi}|^2 \rho$$

ahol ρ a végső állapotok sűrűsége (állapotok száma energiaegységenként)

Variációs módszer

Az energiasajátérték egyenlettel ekvivalens állítás az a variációs elv, amely szerint alapállapotban

$$\int \phi^* \mathbf{H} \phi = \langle \phi | \mathbf{H} | \phi \rangle = \min. = E_0$$

az n. gerjesztett állapot pedig úgy kaphatjuk, hogy az előző szélsőértékfeladatot azon mellékfeltételekkel oldjuk meg, hogy az ϕ_n állapot ortogonális az alapállapotra és az előző n-1 gerjesztett állapotokra is. Természetesen a feladat általános megoldása általában lehetetlen, ezért gyakorlati alkalmazásokban csak a Hilbert-tér egy leszűkítésén oldjuk meg, valamilyen próbafüggvényt feltételezve, majd a paramétereit szerint elvégezve a szélsőértékproblémát.

Ritz-féle variációs módszer (*)

Akkor beszélünk Ritz-féle variációs módszerről, ha a próbafüggvény valamilyen bázisfüggvények lineáris kombinációja:

$$\phi = \sum_i c_i \phi_i$$

Ekkor az energia várható értéke:

$$\epsilon = \frac{\langle \sum_{i=1}^N c_i \phi_i | \mathbf{H} | \sum_{i=1}^N c_i \phi_i \rangle}{\langle \sum_{i=1}^N c_i \phi_i | \sum_{i=1}^N c_i \phi_i \rangle}$$

Ennek a c -k vagy c^* -ok szerinti deriválása egy lineáris egyenletrendszerhez vezet, melynek megoldási feltétele a következő **általánosított szekuláris egyenletet** adja:

$$\det|\mathbf{H} - \epsilon\mathbf{S}| = 0$$

ahol az **átfedési mátrix**:

$$S_{ij} = \langle \phi_i | \phi_j \rangle$$

Problémák a kvantummechanika közelítő módszereivel

A perturbációszámítás gyakorlati(pl. molekulafizikai) alkalmazásakor néha problémák merülnek fel. Egyrészt előfordul, hogy az egyre újabb rendekben kapott energiák oszcillálnak, másrészt pedig előfordul, hogy úgy tűnik, mintha már bekonvergált volna a sor, de még néhány tag kiszámolása után ismét elindul. Ezek a problémák nem állnak fenn a variációs módszernél, ott legalább az irány mindig egyértelmű. De ott is előfordul, hogy az energia már nagyon közel van a jó(kísérleti) értékhez, de a hullámfüggvény még meglehetősen messze.

Azonos részecskék, Pauli-elv

A Hamilton-operátor szimmetrikus két azonos részecske(elektron) felcserélésére. Ezért a Hamilton-operátor kommutál a részecskék felcserélésével. Következésképpen választható olyan energia sajátfüggvények, amelyek a felcserélés operátorának is sajátfüggvényei. Mivel kétszeri felcserélés után az eredeti állapotba jutunk vissza, a felcserélés sajátértéke csak ± 1 lehet, vagyis a felcseréléssel szemben a sajátállapot lehet szimmetrikus vagy antiszimmetrikus.

Ha áttérünk az időfüggő Schrödinger-egyenletre, akkor a permutáció operátora megmaradó mennyiség(mivel a Hamilton-operátorral felcserélhető), így a kezdeti szimmetria az időfejlődés során is megmarad.

Mint kiderült, a hullámfüggvény szimmetriája a részecske fajtájából következik:

- Feles spinű részecskék(**fermionok**) hullámfüggvénye antiszimmetrikus. Ebből az állításból rögtön következik, hogy az atom elektronjai közül semelyik kettő nem lehet azonos állapotban.
- Egész spinű részecskék(**bozonok**) hullámfüggvénye szimmetrikus.

Mivel nincsenek vegyes szimmetriájú részecskék, ezért minden részecskének tartozni kell valamelyik kategóriába. Azonos részecskék megcserélése az előzőtől megkülönböztethetetlen állapotot hoz létre. Az **azonos részecskék megkülönböztethetetlenek**.

Átlagtérközelítés

Nem kölcsönható azonos részecskék

Nem kölcsönható azonos részecskék esetében a Hamilton-operátor egyrészecske Hamilton-operátorok összege:

$$\mathbf{H} = \sum_{l=1}^N \mathbf{H}_l^{(1)}$$

Ezesetben a Schrödinger-egyenletnek mindig léteznek szorzatalakú megoldásai:

$$\phi(1, 2, 3, \dots) = \phi_a(1)\phi_b(2)\dots$$

ahol:

$$\mathbf{H}\phi_a(1) = E_a\phi_a(1)$$

Ezen szorzatok viszont még nem teljesítik a Pauli-elvet. Ennek kielégítésére az egyrészecske-állapotokból **Slater-determináns** képezhető:

$$\Psi(1, 2, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(1) & \phi_2(1) & \dots & \phi_N(1) \\ \phi_1(2) & \phi_2(2) & \dots & \phi_N(2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \phi_1(N) & \phi_2(N) & \dots & \phi_N(N) \end{vmatrix}.$$

Ennek látszanak a megfelelő tulajdonságai:

- Ha két részecskét(sort) felcserélünk akkor előjelet vált.
- Ha két oszlop azonos akkor nulla lesz, vagyis nem lehet két részecske azonos állapotban.

Átlagtérközelítés

Továbbá a nemkölsönható részekéktől a következő közelítést alkalmazhatjuk. Egy részecske helyén sok más részecskétől eredő erőt érez, ezt külső térnek tekintjük, és beírjuk az egyrészecske Schrödinger-egyenletbe. Ezt megoldva új egyrészecske sajátfüggvényeket kapunk, amelyek őt teret adnak, ezzel újraszámoljuk az egyenletet stb. Addig iterálunk, amíg a tér be nem konvergál, ezzel megkapjuk az **önkonzisztens teret**, vagy átlagteret.

Hartree-Fock módszer

Azt az átlagtérközelítést, amikor egyetlen Slater-determináns alakjában keressük a megoldást, és ezzel végzünk önkonzisztens-tér közelítést Hartree-Fock módszernek hívjuk. Kicsit részletesebben is megnézzük.

A variációs elvből indulunk ki. Eszerint $I = \langle \phi | \mathbf{H} | \phi \rangle$ minimális. Ha a megoldást szorzatalakban keressük: $\phi = \phi_1(r_1)\phi_2(r_2)\dots$ akkor az I variációjának eltűnéséből az egyrészecske Schrödinger-egyenletek:

$$\left(\mathbf{H}_l + \sum_{k=1}^Z \langle \phi_k | \frac{e^2}{r_{lk}} | \phi_k \rangle - E_l \right) \phi_l = 0$$

Az egylenrendszert pedig szukcesszív aproximációval oldjuk meg, első közelítésben ϕ_k -kat hidrogénszerűnek feltételezve, és innen indítva az önkonzisztens tér közelítést. Ez a **Hartree-módszer**. Itt még láthatóan nem vettük figyelembe a Pauli-elvet.

A Hartree-módszer továbbfejlesztése a **Hartree-Fock módszer**, amely Slater-determináns alakú megoldást keres:

$$\Psi(1, 2, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(1) & \phi_2(1) & \dots & \phi_N(1) \\ \phi_1(2) & \phi_2(2) & \dots & \phi_N(2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \phi_1(N) & \phi_2(N) & \dots & \phi_N(N) \end{vmatrix}.$$

Ekkor I variációjának eltűnése a következő egyenleteket adja:

$$\left(\mathbf{H}_l + \sum_{k=1}^Z \langle \phi_k | \frac{e^2}{r_{kl}} | \phi_k \rangle - E_l \right) \phi_l - \sum_{k=1}^Z \langle \phi_k | \frac{e^2}{r_{kl}} | \phi_l \rangle \phi_k = 0$$

Ezt ugyanúgy szukcesszív approximációval oldjuk meg.

A periódusos rendszer

A kvantummechanika korai sikereinek egyike a periódusos rendszer megértése volt a Hartree-módszer alapján. Az eljárás a következő. A megoldásokat szorzat alakban keressük: $\Psi = \prod_j u_j$, és a Pauli-elv miatt nem engedjük meg,

hogy egy u_j elektronpályát kettőnél több elektron töltsön be (két ellentétes spinű elektron). Az egyrészecske Schrödinger-egyenletekben szereplő átlagos potenciál mindig radiális szimmetriájúvá átlagoljuk vissza, így a kapott egyrészecske állapotok jellemezhetők az n főkvantumszámmal és l mellékkvantumszámmal. Az l főkvantumszámok hasgyománys jelölése: s,p,d,f,...

Az elektronok leárnyékolják a mag potenciáját, így ha egy elektron távolabb van a magtól, akkor kisebb potenciált érez. Az, hogy egy elektron milyen messze jár a magtól elsősorban a mellékkvantumszámától függ, hiszen ahogy pl. a hidrogénatomnál látható, a radiális hullámfüggvény r^l hatvánnyal indul. Másképp megfogalmazva, nagy l -re az $l(l+1)$ -el arányos centrifugális potenciál miatt az elektron kintebb lesz. Így a magasabb l kvantumszámú állapotok gyengébben kötöttek, és megszűnik a hidrogénatomnál még meglévő l szerinti degeneráció. Azonos főkvantumszámra az $l=0$ -tól $(n-1)$ -ig tartó állapotok energiasajátértéke monoton nő.

A Hartree-közelítés megadja az elektronpályák betöltésének sorrendjét:

1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, ...

Érdeemes megfigyelni, hogy a betöltött legmagasabb főkvantumszámú állapotok mindig s és p állapotok. Az atom külső határán a főkvantumszám határozza meg, hogy egy elektronpálya meddig terjed ki. Így azt találtuk, hogy a külső elektronpályák s és p pályák. Márpedig a külső pályák azok, amelyek meghatározzák a kémiai tulajdonságokat. $n=1$ külső héjjal 2 elem létezhet. $n=2$ külső héjjal $2 + 3 \cdot 2 = 8$ $n=3$ -assal ismét 8 és így tovább. A kémiai tulajdonságok az s,p pályák fokozatos betöltésével változik, hogy aztán a következő főkvantumszámmal újra kezdje. Így megértettük a periódusos rendszert.

Viriál-tétel(*)

A kvantummechanikai viriáltétel mondja, hogy ha egy rendszer Hamilton-operátora:

$$\mathbf{H} = \mathbf{T} + \mathbf{V} = \sum \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} + \mathbf{V}$$

ahol a potenciális energia k -adredű homogén függvény:

$$V(\lambda \vec{r}) = \lambda^k V(\vec{r})$$

akkor fennáll a következő egyenlőség:

$$k \langle V \rangle = 2 \langle T \rangle$$

A leggyakoribb potenciálokra:

- Coulomb-potenciál $k=-1$
- Harmonikus oszcillátor $k=2$

A Born-Oppenheimer közelítés

A molekulák elméletében kiemelt jelentőségű az a tény, hogy az atommagok tömege sokkal nagyobb az elektronokénál, ezért azok sokkal lomhábban mozognak, mint az elektronok. Ez teszi lehetővé, hogy a molekula elektronproblémáját rögzített magkoordinátákkal megoldva, azokat paraméternek tekintve, majd az így kapott energiafelület minimumát megkeresve megkapjuk a molekula alapállapot energiáját (és hullámfüggvényét). Ezt az eljárást nevezik Born-Oppenheimer közelítésnek. Az elektronprobléma megoldása több energiát ad, ezekből több potenciálfelületet kapunk. Akkor alkalmazható a közelítés, ha ezek a felületek szeparálva vannak egymástól.

Kicsit részletesebben, a Born-Oppenheimer közelítésben a hullámfüggvény:

$$\Psi = \Psi_{el}(\vec{r}, \vec{R}) \Psi_{mag}(\vec{R})$$

ahol $\Psi_{el}(\vec{r}, \vec{R})$ a magkoordinátáktól is függő elektronállapot, $\Psi_{mag}(\vec{R})$ pedig a magok közelítő állapota. A Hamilton-operátor:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_{el} + \mathbf{H}_{mag}$$

ahol az elektron Hamiltonja a kinetikus energiájuk, a magok vonzása és az elektronok egymás közti taszításának összege:

$$\mathbf{H}_{el}(\vec{R}) = \mathbf{T}_{el} + \mathbf{V}(\vec{r}, \vec{R})$$

és a magok Hamiltonja a kinetikus energiájuk és egymás közti taszításuk összege:

$$\mathbf{H}_{mag} = \mathbf{T}_{mag} + \mathbf{V}_{mag}(\vec{R})$$

A lassan változó magkoordinátáktól függő elektron sajátérték probléma:

$$\mathbf{H}_{el}(\vec{R}) \Psi_{el,j}(\vec{r}, \vec{R}) = U_j(\vec{R}) \Psi_{el,j}(\vec{r}, \vec{R})$$

Adiabatikus közelítésben az a közelítő potenciál, amelynek minimuma a kémiai kötött állapotot jelenti:

$$\mathbf{V}_{mag}(\vec{R}) + U_j(\vec{R})$$

Ezen minimum körül alakulnak ki a molekularezgések, amelyek kis gerjesztésnél harmonikusak, nagyobb gerjesztésnél anharmonikusak. Még nagyobb gerjesztés disszociációhoz, kémiai reakcióhoz vezet.

Formálisan úgy kapható meg a közelítés, mint az $(m_e / m_{mag})^{1/4}$ kis paraméter szerinti sorfejtés vezető tagja. Akkor romlik el a közelítés, ha az elektronok is lassan mozognak. Ahol egy $U_i(\vec{R})$ és $U_j(\vec{R})$ szint keresztezi egymást, ott van lassú mozgás, ott keverednek a molekula különböző gerjesztései. Az ilyen levert gerjesztési módot **polaritonnak** hívják.

Hellmann-Feynman tétel (*)

A Hellmann-Feynman tétel szerint:

$$\frac{\partial E}{\partial \lambda} = \langle \phi | \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \lambda} | \phi \rangle$$

ahol E a ϕ hullámfüggvényhez tartozó energia, λ pedig valamilyen paraméter. Ezen tétel segítségével ki tudjuk számolni a molekulában a magokra ható erőket, amiből lehet egyensúlyi magtávolságokat számolni, ekkor λ helyére a magkoordinátákat kell írni és ekkor tulajdonképpen a potenciál helyszerinti deriváltja áll a képletben, ami mint tudjuk az erő (-1 szerese).

A kémiai kötés

A kvantummechanika egyik nagy sikere volt a kovalens kötés megmagyarázása. A kötés azért jöhet létre, mert a kötött rendszer energiája alacsonyabb, mint az atomok energiájának összege. Ez azért van, mert az elektronok hullámfüggvénye besűrűsödik az atomok köze. Ekkor:

- Coulomb-potenciálban a viriál-tétel miatt:

$$E = \langle T \rangle + \langle V \rangle = -\frac{1}{2} \langle V \rangle$$

Ha a magok között az elektronok összesűrűsödnek, akkor a magok vonzó potenciálja összeadódik, ami mélyebb eredőt eredményez.

- Egy helyről lehet két magot egymás felé vonzani. (Hellmann-Feynmann tétel)

Vannak olyan effektusok is, amelyek a sűrűsödést akadályozzák:

- Kisebb helyre szorulás a kinetikus energia növekedésével jár.
- Az elektronok közötti Coulomb-taszítás
- Pauli-elv akadályozza sok azonos spinű elektron összegyülekezését kis helyre, emiatt egy-egy molekulapályán ellentétes spinű elektronokból párok alakulhatnak ki

Ez kvalitatív kép. A kvantitatív számolások nehezek.

A hidrogén atom

A Schrödinger-egyenlet megoldása Coulomb-potenciálban

A szögfüggő tagok leválasztása után:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) R_l(r) = E \cdot R_l(r)$$

Bevezetve $u = rR$ -t:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} u''(r) + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - E \right) u(r) = 0$$

Ezek után dimenziótlanítunk. Legyen $\rho = r / r_B$ és $\epsilon = E / Ry$, ahol a Bohr-sugár $r_B = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{M_e e^2}$ és a Rydberg-

állandó $Ry = \frac{e^4 M_e}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2}$. Ekkor:

$$-\frac{d^2 u}{d\rho^2} + \left(\frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{2}{\rho} - \epsilon \right) u = 0$$

A szükséges határfeltételek:

- $\rho \rightarrow \infty$ -ben $u=0$.
- $\rho \rightarrow 0$ -ban?

Ha $\rho \rightarrow a \neq 0$ akkor $R \propto \rho^{-1}$, erre hattanva a Laplace operátort az origóban Dirac-deltát kapunk, vagyis nem elégtűnk ki a Schrödinger-egyenletet. Ezért itt is $u=0$ lesz a határfeltétel.

Az egyenlet megoldási módszere **Sommerfeld féle polinom módszer**:

- Megoldjuk az egyenletet aszimptotikusan.

Az aszimptotikus megoldás $\rho \rightarrow \infty$ -ben $e^{\pm\alpha\rho}$ ahol $\alpha = \sqrt{|\epsilon|}$. A norma miatt csak a negatív előjel jó.

- A megoldást $f(\rho) \cdot \psi_a(\rho)$ alakban keressük, ahol $f(\rho) = \sum a_n \rho^n$ hatványsor. Az $f(\rho)$ eredeti egyenletbe való visszahelyettesítése után kapunk egy rekurziót az a_n -ekre.
- A rekurzió megoldása elrontja az aszimptotikát, az egyetlen megoldás, ha a hatványsorunk véges, vagyis

136/209

valamilyen n -re $a_n = 0$. Ebből a feltételből közvetlenül kapjuk az energiaszinteket. Az együtthatók kiszámolásával pedig a sajátfüggvényeket.

Az energiaszintek:

$$\epsilon = -\frac{1}{n^2}$$

Minden energiaszint $\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$ -szeresen degenerált.

Atomi energianívók termjelölése

Az atomi energianívókat jellemző kvantumszámok:

n - főkvantumszám (1,2,3,4,... vagy K,L,M,N,...)

l - mellékvantumszám, az eredő pályaimpulzusmomentum kvantumszáma (0,1,2,3... vagy S,P,D,F,...)

s - eredő spinquantumszám

j - összes impulzusmomentum, értéke $|l-s|$ -től $l+s$ -ig változhat

m_j - mágneses kvantumszám: $j, j-1, \dots, -j$

A hagyományos jelölés:

$$n^{2s+1}l_j$$

Pl.: a nátrium alapállapota $3^2S_{1/2}$

Mágneses momentumok

Az elektron pályaimpulzusához tartozó mágneses momentum:

$$\vec{\mu}_l = -\frac{g_l \mu_B}{\hbar} \vec{L}$$

Az elektronspinhez tartozó mágneses momentum:

$$\vec{\mu}_s = -\frac{g_s \mu_B}{\hbar} \vec{S}$$

A magspinhez tartozó mágneses momentum:

$$\vec{\mu}_I = -\frac{g_I \mu_n}{\hbar} \vec{I}$$

Itt L az elektron pályamomentuma, S a spinje, I a magspin. A Bohr-magneton:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{m_e}$$

A magmagneton:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{m_p}$$

136/209

137/209

A különböző g-faktorok értéke elektronpályára 1, elektronspinre 2(pontosabban 2,00232). Ez első adódik a klasszikus kvantummechanikából, a második a Dirac-egyenletből. A különböző atommagok g-faktorai, vagy giromágneses faktorai táblázatban megtalálhatóak. A mag-giromágneses faktor:

$$\gamma = \frac{g\mu_n}{\hbar}$$

Finomfelhasadás

A spektrumvonalak első korrekciója a relativisztikus hatások figyelembevételé miatt keletkezik. Ez a hidrogén esetében az egyébként csak a főkvantumszámtól függő energiaszintek szeparációját hozza magával. Az effektus nagyságrendje: $(Z\alpha)^2$, ahol Z a rendszám, α a finomszerkezeti-állandó, így a nagyságrend kb. $\propto 10^{-5}$. Ez az effektus több hatás összegése, tartalmazza a spin-pálya kölcsönhatást, a relativisztikus energiakorrekciót és egy kiátlagolt elektronmozgási potenciált.

Spin-pálya kölcsönhatás

A finomfelhasadást részben okozó spin-pálya kölcsönhatás úgy tekinthető, mint a spin mágneses momentumának energiája az atom belső mágneses terébe, mely az elektronok mozgásából ered. A belső tér a pályaimpulzus-momentummal, a spin mágneses momentuma a spinnel arányos, ezért:

$$H' = \zeta(r) \vec{L} \vec{S}$$

Mivel:

$$LS = \frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2)$$

és $S=1/2$, ezért két energiaszint lesz, az $j=l+1/2$ energiája nagyobb mint a $j=l-1/2$ szinté. A felhasadás nem szimmetrikus.

Hiperfinom felhasadás

A spektrumvonalak az elektronok maggal való mágneses kölcsönhatásának és az atommag helyén levő elektromos tér hatására kialakuló mágnelektromos kvadrupól momentum hatásának következtében további felhasadásoknak lesznek kitéve. Általánosságban ezek a finomszerkezethöz még legalább egy nagyságrenddel kisebb effektusok.

A magmágneses dipólmomentum hatása

A magmágneses dipólmomentum kölcsönhatása a valenciaelektronok által a mag helyén keltett mágneses térrel egy nagyon kis mértékű felhasadást okoz az atomi spektrumokban. Hasonlóan a spin-pálya kölcsönhatáshoz, a hozzá tartozó Hamilton felírható ilyen alakban:

$$\hat{H}_F = A_j \hat{I} \hat{J}$$

Ahol a teljes impulzumomentum $F=I+J$. A felhasadás innen:

$$E_F = E_j + A_j (F(F+1) - I(I+1) - j(j+1))$$

Lamb shift

A Dirac-egyenlet szerint az azonos j-khez és különböző l-ekhez tartozó nívók a hidrogén spektrumában elfajultak. Lamb és Retherford(1947) kísérletileg kimutatta, hogy a hidrogén $2^2S_{1/2}$ és $2^2P_{1/2}$ nívói 1058MHz frekvenciával elkülönülnek. A felhasadás máshol is jelen van, de jóval kisebb. A Lamb-shift az elektromágneses tér zérusponthoz tartozó energiájának fluktuációjával kapcsolatos, kvantumelektrodinamikával pontosan számolható.

137/209

A hélium atom

A legegyszerűbb elméleti módszer a héliumatom kezelésére a következő. A Hamilton-operátorban a két elektron taszítását H' perturbációnak tekintjük, így a Hamilton-operátor két H-atom Hamilton-operátor és egy perturbáció összege:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_1 + \mathbf{H}_2 + \mathbf{H}'$$

a két H-atom operátor összegének sajátértékproblémája:

$$(\mathbf{H}_1 + \mathbf{H}_2) \phi_k(\vec{r}_1) \phi_l(\vec{r}_2) = (E_k + E_l) \phi_k(\vec{r}_1) \phi_l(\vec{r}_2)$$

ahol a ϕ_i -k H-atom sajátállapotok. Ezekután a degenerált perturbációszámítás képleteit használva a szekuláris egyenlet:

$$\begin{vmatrix} C - E^{(1)} & K \\ K & C - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

Ami alapján az energiaszintek:

$$E = E_k + E_l + C \pm K$$

Coulomb-integrál:

$$C = \int |\phi_k(\vec{r}_1)|^2 |\phi_l(\vec{r}_2)|^2 \frac{e^2}{r_{12}} d^3 r_1 d^3 r_2$$

Kicszerelődségi integrál:

$$K = \int \phi_k^*(\vec{r}_1) \phi_k(\vec{r}_2) \phi_l^*(\vec{r}_2) \phi_l(\vec{r}_1) \frac{e^2}{r_{12}} d^3 r_1 d^3 r_2$$

Ilyen alakú integrálok folyton előjönnek atom- és molekulfizikai számításoknál. A nulladrendű közelítés hullámfüggvényeire pedig rendre:

$$\begin{aligned} \phi_+^{(0)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_k(1) \phi_l(2) + \phi_l(1) \phi_k(2)) \\ \phi_-^{(0)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_k(1) \phi_l(2) - \phi_l(1) \phi_k(2)) \end{aligned}$$

adódik. A spint és a Pauli-elvet figyelembe véve a következőt mondhatjuk. A szimmetrikus térbeli hullámfüggvény antiszimmetrikus spinhullámfüggvénnyel (szinglet) szorzódik:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle - |-+\rangle)$$

Az antiszimmetrikus térbeli hullámfüggvény szimmetrikus spinhullámfüggvények valamelyikével (triplet) szorzódik szorzódik:

$$\begin{aligned} & \left\{ \begin{array}{l} |++\rangle \\ |--\rangle \end{array} \right\} \\ & \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle + |-+\rangle) \end{aligned}$$

Alapállapotban csak a szinglet valósul meg, hiszen $k=l$ miatt a másik esetben a helyfüggő hullámfüggvény azonosan nulla.

Stark-effektus

Az atom energiájának elektromos tér által bekövetkezett felhasadását Stark-effektusnak nevezzük. Az első gerjesztett állapot Stark-effektusa a perturbáció számítás első közelítésében arányos az elektromos térerősséggel, ezért lineáris Stark-effektusnak nevezzük. A lineáris Stark-effektus szimmetrikus felhasadást eredményez. A négyszeres degeneráció kétszeresre csökken. A H-atom esetében:

$$E_2^{(1)} = \pm 3eEr_B, 0, 0$$

A lineáris Stark-effektus csak hidrogénszerű állapotokra lép fel, vagyis akkor, ha az energia csak az n főkvantumszámtól függ, és az állapotok l szerint elfajultak. Az energia megváltozása a perturbációszámítás második rendjében jelenik meg:

$$E_{nlm} = E_n l^{(0)} + E^2(\alpha + \beta \cdot m^2)$$

ahol α, β állandók, m a mágneses kvantumszám.

Zeeman-effektus

A Zeeman-effektus az aránylag kis mágneses tér hatására bekövetkező, egyébként degenerált energiaszintek felhasadása. A mágneses térnek olyan értelemben kell kicsinek lennie, hogy az az alapállapot Hamilton-hoz perturbációként járuljon hozzá:

$$H = H_0 + K$$

Ahol a perturbáció az atomi mágneses momentum és a mágneses tér szorzata:

$$K = -\mu B$$

Az atomi mágneses momentumhoz a mag is hozzájárul, azonban ez több nagyságrenddel kisebb az elektron járuléknál, így elhanyagolható. A mágnesesmomentum a teljes impulzusmomentumot tartalmazza. Ha a spin-pálya csatolás erős, akkor csak a teljes impulzusmomentum marad állandó, szemléletesen a pálya- és spin momentumok precesszálnak az állandó teljes impulzusmomentum körül. Kiátlagolva időben a két nemmegmaradó momentumot:

$$\bar{S} = \frac{(S \cdot J)}{J^2} J$$

$$\bar{L} = \frac{(L \cdot J)}{J^2} J$$

Ezeket beírhatjuk a mágnesesmomentum kifejezésébe, megszorozva a megfelelő giromágneses faktorokkal, és így megkapjuk az időátlagolt perturbációt. Behelyettesítve, és a z -vetületet véve a perturbáció:

$$K = -\mu_B B m_j g_j$$

Ahol μ_B a Bohr-magnetron, és g_j a felhasadást a kvantumszámok függvényében megadó Landé-faktor:

$$g_J = g_L \frac{J(J+1) - S(S+1) + L(L+1)}{2J(J+1)} + g_S \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

A H_2^+ molekulaion, kicserélődési kölcsönhatás(*)

Kéttatomos molekulák

Általános megjegyzések

140/209

- A tér szimmetrikus a két atommagon átmenő tengelyre, ezért az impulzusmomentum ezen tengelyre vett vetülete megmarad. Ezt a vetületet Λ -val szokás jelölni, és 0,1,2 értékei esetén rendre Σ – , Π – , δ -termről beszélünk.
- A molekula tengelyét tartalmazó síkre való tükrözés az impulzusmomentum előjelét megfordítja (axiálvektor). Következik, hogy a Σ -termek kivételével a többi kétszeresen elfajult (ezek a sajátfüggvények az impulzusmomentum előjelében különböznek). Egy Σ -term tükrözés esetén egy állandóval szorozódhat, mivel kétszeres tükrözés azidentitással egyenlő ez az állandó ± 1 , ezek alapján szokás Σ^+ és Σ^- termekről beszélni.
- Két azonos atomból álló molekula szimmetrikus az atommagokat összekötő szakasz felezőpontjára is. Az erre való tükrözés szerint beszélhetünk páros(h) és páratlan(u) állapotokról. Ez utóbbi az elektronkoordináták előjelének megváltoztatásakor előjelet vált. Jelölés pl.: Π_u
- Empirikus szabály: kémiaiilag stabil kétatomos molekulák túlnyomó többségének alapállapota teljesen szimmetrikus (a molekula minden szimmetriájára invariáns)
- Termeket ábrázolhatjuk grafikusán a magtávolság függvényében. **Tétel:** Csak különböző szimmetriájú termek metszhetik egymást.

A vegyérték

Tekintsük a H_2 molekulát. Ennek a legalacsonyabb impulzusmomentumú lehetséges termjei az $^1\Sigma$ spinszinglett állapot és a $^3\Sigma$ spintriplett állapot. A spintriplett szimmetrikus spinhullámfüggvényt jelent, ami a Pauli-elv miatt antiszimmetrikus helyhullámfüggvényt. Azonban egy antiszimmetrikus helyhullámfüggvény $|\vec{r}_1| = |\vec{r}_2|$ -nél eltűnik, így nem lehet az alapállapot. Kémiában szokásos kifejezés szerint **csomósíkja** van az elektronpályának. Részletes számolás szerint valóban a $^1\Sigma$ termnek a magtávolságfüggvényében minimuma van, míg a $^3\Sigma$ termnek nincs (**lazító állapot**), így az alapállapot a $^1\Sigma$ term. Vagyis alapállapotban a spin 0. Mind kiderül, a főcsoport elemeinek majdnem minden kémiaiilag stabil molekulája rendelkezik ezzel a tulajdonsággal. Azt, hogy az ilyen típusú, tisztán kvantummechanikai kötés (**kovalens kötés**, azaz mindkét atomra kiterjedő molekulapályák által alkotott kötés) a spinnel kapcsolatos, Heitler és London felfedezése volt. Ez teszi lehetővé a **vegyérték** fogalmának bevezetését. Egy atom vegyértéke egy atom spinjének kétszerese, ami a körülötte található elektronok spinjének összege. Atomok egyesülése során pedig a vegyértékeknek kölcsönösen telítődnie kell, vagyis egy atom minden vegyértékkötésének meg kell feleljen egy másik atom vegyértékkötése.

A H_2 molekula(*)

Molekulák rezgési és forgási spektruma

Az eddigi leírások az átlós molekulákra vonatkoztak. Egy molekula azonban végezhet forgó mozgást is, amely szintén kvantált, azaz csak diszkrét energiákat vehet fel, és csak diszkrét kvantumokban gerjeszthető. Ezenfelül a molekulákban, ha megfelelő a potenciálfelület és az molekula geometriájához képesti alapállapotbeli eltérések harmonikus oszcillátorként közelíthetőek, akkor ezek a kötések is gerjeszthetőek a rezgés módusának megfelelő energiájú fotonokkal. Tipikusan a rezgési gerjesztési hullámhossz a közép-infravörös (30–2.5 μm) tartományába esik, az ennél kisebb energiájú forgási gerjesztések kisebb energián, a távoli-infravörösben (1000–30 μm) vannak. Mivel ezek a kisenergiájú gerjesztések igen érzékenyek és specifikusak a molekula geometriájára, illetve az elektronok potenciálfelületeire, ezért egyedülállóan pontos szerkezet- és anyagmeghatározási lehetőségeket biztosítanak. Ez vezetett a megfelelő spektroszkópiák kialakulásához.

Kis gerjesztések esetén a rezgési spektrum közelíthető harmonikus oszcillátorként, kétatomos molekulákra:

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

ahol

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

140/209

141/209

ahol μ a molekulatömeg, k a kémiai kötés erősségére jellemző erőállandó. Többatomos molekulákra a rezgési spektrum első körben több független oszcillátorral közelíthető:

$$E_{rezg} = \sum_i \hbar \omega_i \left(n_i + \frac{1}{2} \right)$$

A forgási energia pedig első körben merev rotátorként képzelhető el. Mivel a forgási energia lényegesen kisebb a rezgésinél, ezért első körben a kettő tekinthető függetlennek.

IR- és Raman-spektroszkópia

Az IR (infravörös) spektroszkópia összefoglaló neve a forgási és rezgési spektrumok tanulmányozására szolgáló spektroszkópiai módszereknek. Az egyes rezgések igen határozottan specifikusak az egyes molekuláris csoportokra, illetve kötésekre, sőt a spektrumvonalak finomszerkezete az izotópokra is érzékeny. Az elméleti számolások itt igen elbonyolodnak sokszor nem élhetünk az energiaszintek adiabatikus közelítéssel sem. A forgásispektroszkópiának további hátránya, hogy csak gázfázisban használható, mert folyadékokban és gázokban az ütközések elnyomják a hatását. Továbbá szükséges hozzá (első közelítésben), hogy legyen a molekulának eredő dipólmomentuma.

Az fenti módusok gerjesztésének egyik más módszere a Raman-spektroszkópia, ez a fotonok rugalmatlan szórása a különböző gerjeszhető részekben (fononokon, molekuláris elektronfelhőn, kémiai kötésekben), aminek következtében energiát ad át az adott módusnak, amiáltal megváltozik a besugárzott foton frekvenciája és az észlelt spektrumban vonalak jelentkeznek. Ezzel párhuzamosan a felgerjesztett módus egy idő után visszatér az alapállapothoz közeli, de gerjesztett szintre. Az alapvető különbség az infravörös és a Raman-spektroszkópia között, hogy az infravörösnél beugárzott foton elnyelődik, és közvetlenül csak a rezgést gerjeszti, míg a Raman spektroszkópiánál egy jóval magasabb szintre történő gerjesztés utáni visszaállítás vezet ugyanarra az energiaszintre.

Ha az alapállapotból történő gerjesztés után a visszatérés az alapállapotba történik, az a klasszikus Rayleigh folyamat. Ha a visszatérés magasabb szintre történik, például az előbb részletezett esetben, akkor Stokes-folyamatról, ha kicsit gerjesztett állapotból mélyebb állapotba térünk vissza, akkor anti-Stokes folyamatról beszélünk.

Alagút-effektus

Tekintsünk egy rendszert, ahol a hullámfüggvénynek az egyik közegben exponenciálisan lecsengő megoldása van, de a közeg két végén oszcilláló megoldása. Ha a közeg egyik oldalán például felvesszünk egy hullámcsomagot, ami adott sebességgel halad az exponenciálisan lecsengő régió felé, akkor véges valószínűsége lesz annak, hogy a hullámcsomag átjut a közegen, és a másik oldalon folytatja útját. Ilyen jelenség van például az atommagban az alfarészecskékkel.

Záróvizsga tematika

Tételek	A klasszikus mechanika alapjai A klasszikus mechanika elméleti tárgyalása A relativitás elmélet alapjai Egzaktnál megoldható fizika problémák Folytonos közegek mechanikája Fenomenológikus termodinamika Elektro- és magnetosztatika, áramkörök Elektrodinamika Hullámegyenlet és hullámoptika Geometriai optika és alkalmazásai A kvantumelmélet alapvető kísérletei A kvantummechanika elméleti háttere Atom- és molekulaszervezet A magfizika alapjai A termodinamika statisztikus alapozása Kvantumstatisztikák Kölcsönható rendszerek, mágneses anyagok Kristályos anyagok fizikája Nemegyensúlyi folyamatok leírása Az asztrofizika alapjai
----------------	---

A lap eredeti címe: „http://mafihe.hu/~wiki/wiki/index.php/Atom-_%C3%A9s_molekulaszervezet”

- A lap utolsó módosítása: 2009. augusztus 19., 20:29

A magfizika alapjai

A TételWiki wikiből

Tartalomjegyzék

- 1 Az izotóp térkép
 - 1.1 Atommagok tömege
 - 1.2 Mérete és alakja
 - 1.3 Kötési energiája
- 2 A magerők kvalitatív jellemzése
 - 2.1 A Yukawa féle Π -mezon(*)
- 3 A cseppmodell
- 4 A félempírikus kötési formula
- 5 Maghasadás
- 6 Magfúzió
- 7 Sugárzás és anyag kölcsönhatása
 - 7.1 Részecskék és anyag kölcsönhatása
 - 7.2 Gammasugárzás és anyag kölcsönhatása
- 8 Radioaktivitás
 - 8.1 Radioaktív bomlások
 - 8.1.1 α -bomlás
 - 8.1.2 β -bomlás típusai
 - 8.1.3 γ -bomlás
 - 8.2 Radioaktív családok
- 9 Elemi részecskék
- 10 Alapvető kölcsönhatások
- 11 Kísérleti eszközök
 - 11.1 Gáztöltésű számlálók
 - 11.2 Szcintillációs számlálók
 - 11.3 Félvezető detektorok
 - 11.4 Részecskenyom-detektorok
 - 11.5 CCD

Az izotóp térkép

Az anyagot az atomok alkotják. Ezeknek a lényegi tulajdonságainak egyrészét az atommag összetétele határozza meg, a másikfelét a jelenlevő elektronok száma. Az atomokat a periódusos rendszerben foglalhatjuk össze a kémiai tulajdonságaik alapján csoportosítva. A magfizikában azonban célszerűbb az atommagokat, mint neutronok és protonok kombinációját tekinteni. Az izotóptérképen az egyik tengelyre a neutronok számát, a másik tengelyre a protonok számát (a rendszámot) mérik fel. Ezen az ábrán a stabil magok az origó közelében a 45-fokos tengely mentén sorakoznak, távolodva azonban a neutron többlet felé hajlanak el.

Atommagok tömege

Az atommagok tömegét a protonok és neutronok adják, de ennél valójában kicsit könnyebbek a tömegdefektus miatt.

Mérete és alakja

Az atommagok méretét és alakját szórás kísérletekkel lehet megmérni, más összetett bombázórészecskékkel a magerők eloszlása is feltérképezhető. Az átlagos méret 1 fm körül alakul.

Kötési energiája

Az atommagok kötés energiáját az egy nukleonra jutó kötésenergiával jellemezzük. Ez a mennyiség a rendszám növelésével először meredeken csökken, a vasnál minimumot ér el, utána lassan emelkedik. Ez azt jelenti, hogy a könnyű elemek egybeolvadása (fúzió) és a vasnál nehezebb elemek bomlása energiatermelő folyamat.

A magerők kvalitatív jellemzése

A magerők a nukleonok között hatnak, ezek tartják össze az atommagot. Ez az erőhatás az erőskölcsönhatás másodlagos megnyilvánulása, hasonlóan a Van der Waals-féle indukált dipólus kölcsönhatáshoz. Az erőskölcsönhatást a kvantumszindinamikával igen jól le lehet írni - aszimptotikus esetben nagy energián. Azonban a magfizikailag érdekes energiaskálákon az elmélet nem perturbatív, így "ab initio" számításokat igen nehéz végezni. Ezekből kifolyólag a magerők leírására igencsak kvalitatív, és fenomenologikus.

Kvalitatív tulajdonságai:

- Nukleonok között hat.
- Kis távolságokon erősen taszító, ettől távolabb vonzó, de gyorsan lecseng.
- Elektromos töltésfüggetlen.
- A közvetítő részecskéjét a pionnal azonosítjuk.

Ez utóbbi állítást úgy kell elképzelni, hogy itt is gluonok közvetítik a kölcsönhatást, csak időnként egy kvark-antikvark csere történik, amely felfogható egy pionként is, lásd: itt (http://en.wikipedia.org/wiki/File:Pn_scatter_quarks.png) .

A Yukawa féle Π -mezon(*)

Yukawa a magerők leírására javasolta az alábbi alakú potenciált:

$$V_Y = -\frac{1}{r}e^{-r/R}$$

ahol R az a karakterisztikus hossz, amin a magerők hatása lecseng. Nyilvánvaló, hogy ez a potenciál a közeli taszító részt nem tartalmazza, így egyfajta aszimptotikus közelítése a magerők tényleges potenciáljának. A Yukawa-potenciál elektrodinamikai analógiával a következő hullámegyenletből származtatható:

$$\left(\Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{1}{R^2} \right) \phi = 0$$

Ennek síkhullámmegoldásait keresve $\phi \propto e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$ a következő diszperziós relációt kapjuk:

$$-k^2 + \omega^2/c^2 - 1/R^2 = 0$$

Ez összevetve a szokásos relativisztikus diszperziós relációval

$$E^2 = m^2 c^4 + p^2 c^2$$

Megbecsülhető a közvetítő részecske, a Π -mezon tömege. Az, hogy a közvetítő részecskének van tömege, az okozza a kölcsönhatás rövid hatótávolságát.ü

$$m_{\Pi} \sim \frac{\hbar}{Rc} \sim 197 \text{ MeV} \text{ ha } R=1 \text{ fm-vel számolunk. A töltött pion tényleges tömege } 140 \text{ MeV, a semlegesé } 135 \text{ MeV.}$$

A cseppmodell

A cseppmodell az atommagokat összenyomhatatlan folyadékként képzei el, amelynek az összenyomhatatlanságát a Pauli-féle kizárási elv biztosítja. Ebből és más fenomenologikus érvekből kifolyólag az atommagoknak forgási-ellipszoidot tételezünk fel, amelynek forgási tengelye a spinnel esik egybe.

A félempirikus kötési formula

A félempirikus kötési formula az atommagok kötöttségét írja le fenomenologikus alapon, az elméleti megfontolásokból bevezetett tagokat a mérésekhez fittelve. Eszerint a kötési energia a következőképpen írható:

$$E = \alpha A - \beta A^{3/2} - \gamma Z^2 A^{-1/3} - \delta \frac{(N - Z)^2}{A} - \epsilon \kappa A^{-3/4}$$

Az első tag a térfogati tag, ez egyenesen arányos a nukleonok számával (A). Ez a tag dominálja az összeget, és ez bizonyíték arra is, hogy a megerők rövidhatótávolságúak. Ha hosszúhatótávolságú lenne, akkor ugyanúgy négyzetesen menne a töltéssel, mint az elektromos vagy gravitációs. A második tag a felületi tag, ez azt jellemzi, hogy a felületen levő nukleonoknak kevesebb szomszédjuk van, ezért ezek kevésbé kötöttek (hasonló a felületi feszültséghez). A harmadik tag a Coulomb-tag, amely az elektrosztatikus taszítás miatti csökkenést írja le. A negyedik tag a Pauli-féle szimmetria tag, ez a kizárási elv miatt bukkan fel hiszen a nukleonok is fermionok, így nem tartózkodhat azonos állapotokban egy részecskénél több. Az ötödik tag a párenergia, a spincsatolást próbálja meg figyelembevenni, és a páros feltöltődés kedvezőbb mivoltát (kedvező helyzet, ha egy állapotban csak spinben különböző részecskék vannak, ezért kedvező a párosság, ha a protonok és neutronok száma is páratlan az negatív előjelet ad, az előző két eseten kívül pedig 0).

Ez a látszólag mondvacsinált formula jól leírja a legtöbb periódusosrendszerbeli magot, a legkönnyebbek kivételével, átlagosan kb. 5% pontossággal, csupán 5 paraméterrel, ezért széleskörben elterjedten használják. Hátránya, hogy nem ad számot a mágikus számok megjelenéséről.

Maghasadás

A korábban bevezetett kötésienergia rendszám szerinti eloszlásából következik, hogy a nehéz atommagok, ha könnyebbekbe tudnak elbomlani, akkor energia szabadul fel, tehát ez utóbbi állapot mélyebb energiájú. A nehéz atommagok önmaguktól is elbomolhatnak alfa, vagy bétabomlás segítségével. Ezt a folyamatot spontán bomlásnak nevezzük. Az atombombában és az atomerőművekben indukált bomlásról beszélünk, itt termikus neutronokkal bombázva bontják szét az atommagokat, ezáltal a reakció hevesebb, de egyben irányítható is marad. A legfontosabb alkalmazott hasadóanyagok a Plutónium 239-es izotópja, és az Urán 235-ös izotópja.

Magfúzió

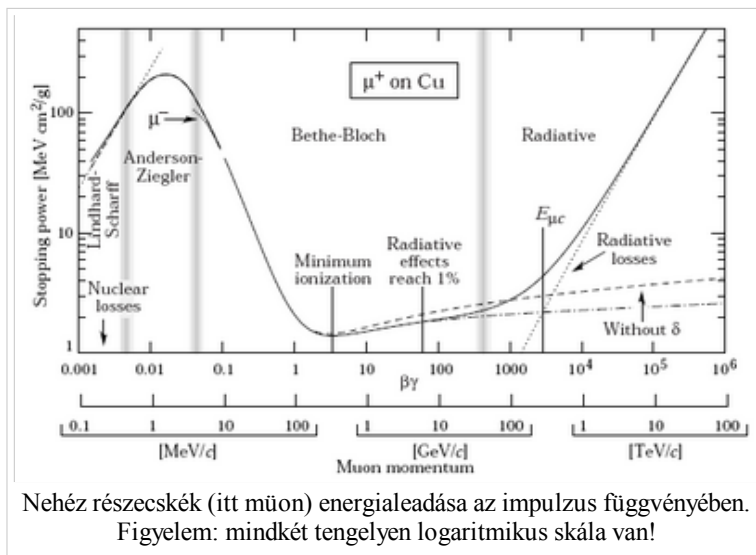
A kötésienergia kis rendszámok esetén a rendszám növelésével csökken, azaz itt energetikailag kedvező, ha a kisebb atommagok nagyobbakká egyesülnek. Itt azonban le kell győzni a Coulomb-potenciál taszítását, így ehhez igen nagy hőmérséklet és sűrűség kell. Ez a folyamat a csillagokban számottevő, de jelenleg folynak kísérletek erőművi alkalmazások kifejlesztésére.

Sugárzás és anyag kölcsönhatása

Részecskék és anyag kölcsönhatása

A különböző energiával haladó részecskék álló anyaggal való kölcsönhatása igen sokféle lehet, azonban a makroszkópikus hatás közös: a mozgó részek energiát vesztenek, miközben az általuk leadott energia más részecskéknek adódik át valamilyen formában. Ebből kifolyólag a leggyakrabban tárgyalt mennyiség az egységnyi úton leadott energia. Legegyszerűbb közelítésben különböztessük meg a sugárzásos és ionizációs energiavesztéseget, valamint különítsük el az elektronokat, mint könnyű, elemi részecskéket a többi nehezebb és összetett részecskétől. Fontos megjegyezni hogy az itt részletezett folyamatok töltött részecskékre értendők.

- A nehézrészecskékre sokkal jelentősebb az ionizációs energia leadás kis energián
- Nagyon nagy energián itt is szerepet játszik a fékezési sugárzás, és a Cserenkov-sugárzás.
- Könnyű részecskékre (elektronokra) az fenti elkülönülési határ alacsonyabban van, így már kisebb energián is jelentős a fékezésisugárzásuk, de ezek is tudnak ionizálni.



Az ionizációs folyamatok általában az anyagban a elektronburokkal való kölcsönhatás eredményei, legegyszerűbben a mozgásienergia átadódik az elektronoknak a burookban.

Nehéz részecskék ionizációs leírására a Bethe-formula használatos, amely nemrelativisztikus energiákra a következő:

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi n Z^2}{m_e v^2} \cdot \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \cdot \left[\ln\left(\frac{2m_e v^2}{I}\right)\right]$$

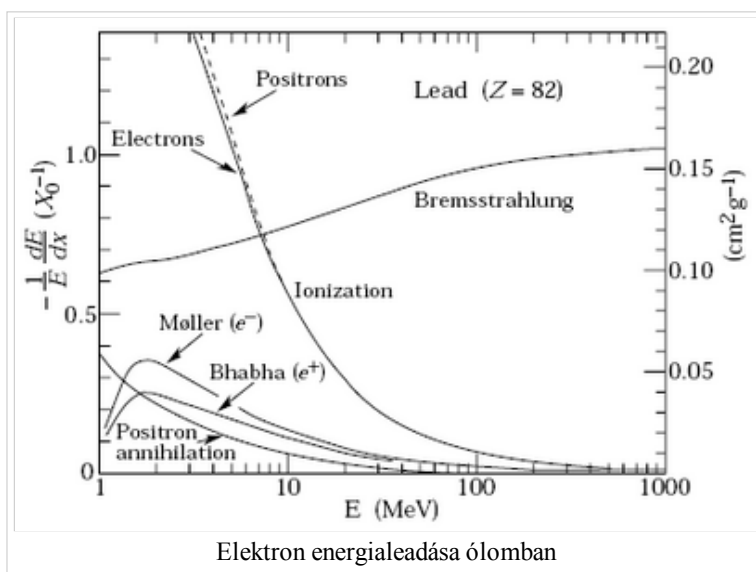
A legfontosabb arányosságok a formulából a rendszám négyzetével (Z) és a sebesség négyzetével fordítottan való függés. Ebből az következik, hogy az energialeadási görbe a sebesség növelésével csökkenő tendenciát mutat. Ezután más effektusok kezdenek szerepet játszani (polarizáció, sugárzási energia veszteség) ezért egy minimum után újra emelkedni kezd a görbe:

Elektronokra azt érdemes tudni, hogy az ionizációval leadott energia logaritmusosan függ az energiától, míg a fékezésisugárzásos energialeadás lineárisan, ezért ez utóbbi dominál már pár 10 MeV felett.

A nehéz részecskék sugárzásos energialeadásából a legfontosabb jelenség a Cserenkov-sugárzás, amely akkor jön létre, ha a nagyenergiájú töltött részecske sebessége meghaladja az adott közegbeli fénysebességet. Fontos, hogy a közeg szigetelő legyen. Ekkor a töltött részecske által megrántott közegbeli dipólok sugárzást bocsátanak ki, amely kúpfelületű frontba rendeződik. Ennek a kúpnek a nyílásszöge:

$$\cos\theta = \frac{c_0}{nv}$$

ahol n a közeg törésmutatója, v a részecske sebessége, c₀ a vákuumbeli fénysebesség. A Cserenkov-sugárzás jellegzetes kék színű, és intenzitása még a nagyobb frekvenciák felé nő, de a gamma spektrumban levág.



Gammasugárzás és anyag kölcsönhatása

Az elektromágneses hullámok anyaggal való kölcsönhatásában a következő folyamatok játszanak fontos szerepet:

- Compton-folyamat: foton fugalmatlan szóródása elektrononm ekkor a foton energiát ad le az elektronnak.
- Fotoeffektus: az elektronburokban egy elektron éppen egy másik pályára való átmenethez szükséges energiát hordozó fotonnal találkozik. Ekkor a foton elnyelődik, és az elektron gerjesztett állapotba kerül.
- Párkeltés: egy nagyenergiás foton ($E > 2 \times 511 \text{ keV}$) elektron-positron párt hoz létre. Szükséges hozzá külső tér (vákuumban nem jön létre).

Alacsony energián a fotoeffektus dominál, jellegzetes csúcsokkal, hiszen keskeny energiasávban tud csak elnyelni. Közepes energián a comptoneffektus dominál, ez folytonos spektrummal rendelkezik, az energiával fordítottan arányos megközelítőleg. Nagyenergián a párkeltés kezd el dominálni. Továbbá a rendszám függések is jellegzetesek: a Compton-effektus valószínűsége arányos a rendszámmal, a fotoeffektusé azonban a rendszám 5. hatványával!

Radioaktivitás

Összefoglalóan radioaktivitásnak nevezzük atommagból eredő sugárzásokat. Ezek többnyire valamilyen atommagátalakulásos, vagy átrendeződéses folyamat eredményei.

Amikor az átalakulás külső hatás nélkül játszódik le, akkor spontán folyamatról beszélünk. Ezeket teljesen véletlenszerűnek tekintjük, a bomlások Poisson-folyamat szerint fordulnak elő, amiből következik, hogy két bomlás között exponenciális idő tellik el, és a következő bomlásig hátralevő idő is exponenciális eloszlású. Ez az exponenciális bomlástörvény:

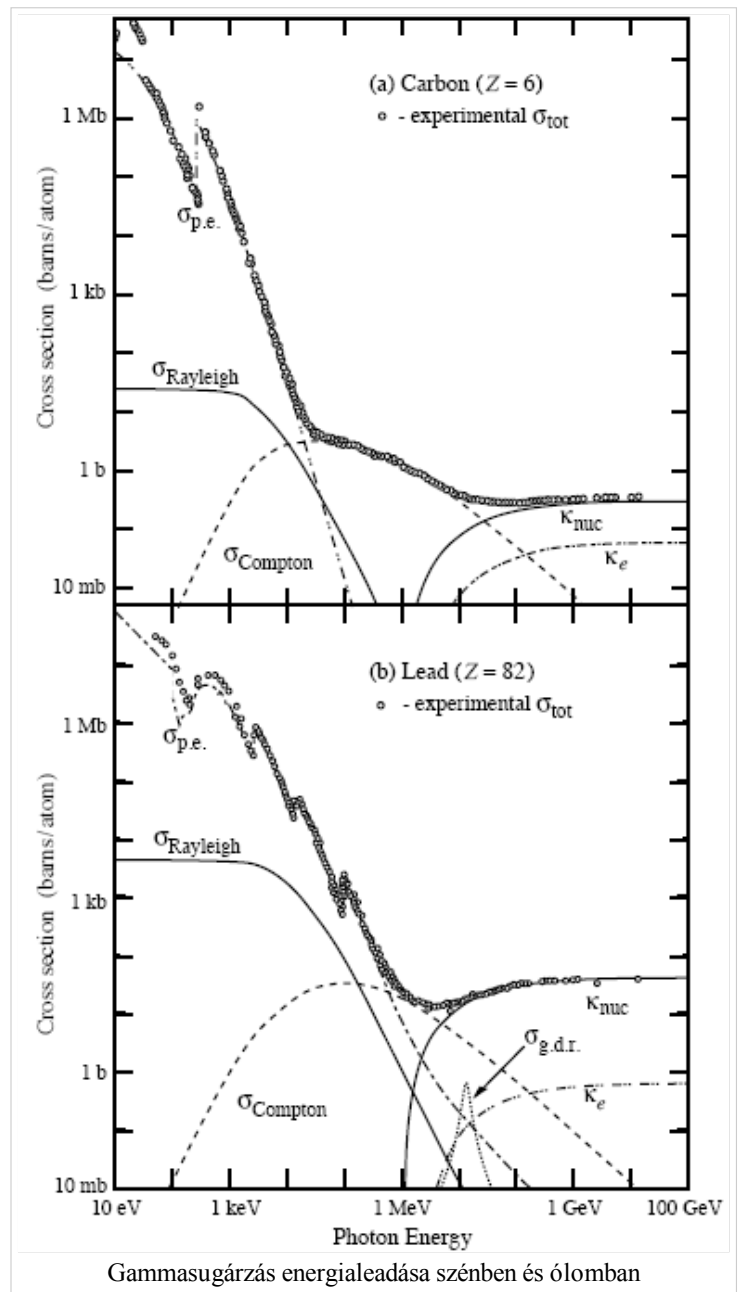
$$N(t) = N_0 \cdot e^{-\lambda t}$$

ahol $\lambda = \frac{\ln 2}{T_{1/2}}$ a bomlási paraméter, T a felezésiidő. Belátható, hogy az átlagos élettartam: $\tau = \frac{1}{\lambda}$

Radioaktív bomlások

α -bomlás

Az atommagokra vonatkozóan említettük, hogy csak igen fenomenologikus elméletek állnak rendelkezésünkre a magok leírására. Ezek közül igen jólműködőnek tűnik az a leírás amely az atommagokban kisebb, erősen kötött alrészekkel számol. A kötésienergia-eloszlása alapján ismert, hogy a hélium atommagjának igen magas a kötési energiája, ezért célszerű azt feltételezni (és kis magok esetében jól működik), hogy az összetettebb atommagok



hélium atommagok, és más részek szuperpozíciójából tevődnek össze.

Ismert azonban kvantummechanikából az alagút-effektus. Eszerint egy véges potenciálgátakközé zárt részecske bizonyos valószínűséggel ki tud jutni a gát mögül annak ellenére, hogy az energiája kisebb és kisebb is marad a gát magasságánál. Ha az alfarészt, mint a magerők potenciáljába zárt részecskét tekintjük, ugyan ez a lehetőség fennáll. Ezt a folyamatot, amelyben alfarészecske hagyja el az atommagot, α -bomlásnak nevezzük.

Az alfabomlás energiája igen bebtárolt, maximum 10 MeV körül alakul. Nagyméretű atommag révén könnyen lefékeződik és leadja energiáját így kicsi az áthatoló képessége.

Az alfarészecskék energiájára Geiger-Nuttall tapasztalati törvény fontos jellemző, amely a felezési időket és a kibocsátott alfarészecskék energiáit kapcsolja össze:

$$\ln \lambda = -A \frac{Z}{\sqrt{E}} + B$$

ahol A és B konstansok, Z a rendszám, E az alfarészecske energiája. Ez a törvény azt foglalja magában, hogy a sok nagyságrendet átfogó felezési idők igen kis különbségeknek felelnek meg a kisugárzott alfarészecske energiájában.

β -bomlás típusai

β -bomlásnál egy u-d kvark alakul át egymásba, amely reakció közben egy töltött **W** bozon csere is lezajlik, tehát a β -bomlások a gyengekölcsönhatás által vezérelt reakciók. Felszabadul továbbá egy elektron és egy hozzátartozó neutrínó (vagy ezek antirészecskéi), ezért a β sugárzás részecskéjének az elektront tekintjük.

A gyengekölcsönhatással magyarázható, hogy ez a reakció lényegesen lassabban zajlanak le, mint az erős kölcsönhatással vezérelt beomlási reakciók (ilyenekkel a részecskefizika foglalkozik). Az alapvető folyamatok:

Negatív β -bomlás: $n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e$

Pozitív β -bomlás: $p \rightarrow n + e^+ + \nu_e$

Ezek a folyamatokat az úgynevezett Feynman-gráfokkal érdemes jellemzni, például a negatív β -bomlás gráfja ilyen (http://en.wikipedia.org/wiki/File:Beta_Negative_Decay.svg). A gráf csúcsaiban érvényes a lepton- és barionszám megmaradás. A fenti folyamatok átrendezésével további két reakció kapható:

Pozitronbefogás: $n + e^+ \rightarrow p + \bar{\nu}_e$

Elektronbefogás: $p + e^- \rightarrow n + \nu_e$

Ezek közül a felső gyakorlatilag nem játszódik le, mert az elektronburokban a pozitron annihilálódik, így nem tud eljutni a neutronig. Ezzel szemben az elektronok az atommag körül igen hosszú időt eltöltenek, és mivel a hullámfüggvényük szétfolyt, bizonyos valószínűséggel a mag helyén is tartózkodnak, így előfordulhat, hogy a magbéli proton befog egy elektront és átalakul.

Egyéb gyenge kölcsönhatás által vezérelt folyamatok:

A proton-proton lánc kezdőreakciója: $p + p \rightarrow D + e^+ + \nu_e (+0,46 \text{ MeV})$

γ -bomlás

Ez a szerkezeti változással nemjáráó folyamat a magbelső gerjesztettségét sugározza ki egy foton formájában. Ez a foton igen nagy energiájú is lehet, ezért számottevő biológisi veszélyt is hordoz.

Radioaktív családok

A nehéz atommagok könnyen bomlanak, azonban ekkor is csak aránylag kis csökkenés zajlik le bennük a rendszámában, következésképpen a belőlük kialakuló új mag is hajlamos bomlásra. Ezeket a láncokat nevezzük

radioaktív családoknak. Az atommagok tömegét csak az alfabomlás csökkenti, mégpedig négyvel, ebből az következik, hogy a bomló magok négy csoportba sorolhatóak be az alapján, hogy 4-nek melyik maradékosztályába tartoznak. Ezt a négy csoportot a négy radioaktív családnak nevezzük. Közülük a Neptúnium-család lényegében teljesen elbomlott a kezdő atommag rövid felezési ideje miatt, a másik három a Tórium, Rádium és Aktínium család még jelen van a Földön. A bomlási sorok stabil elemekben végződnek: a hérom hosszú család Ólomban, a Neptúnium család Talliumban végződik.

Elemi részecskék

Definíció szeirnt elemi részecskének nevezzük azokat az alkotókat, amelyeknek nem tulajdonítunk belső struktúrát. Jelenlegi ismereteink szerint ilyenek a kvarkok (u, d, c, s, t, b) és a leptonok (elektron, müon, tau, és a hozzájuk tartozó neutrínók). Ezeket generációkba rendezve csoportosíthatjuk, az elsőbe az u, d kvarkok, az elektron és az elektron neutrínó tartozik, a másodikba a c, s, müon és neutrínója, stb.

Alapvető kölcsönhatások

A természetben jelenlegi ismereteink szerint négy alapvető kölcsönhatás van. Ezek töltések között hatnak, és közvetítő részecskéket tudunk hozzájuk rendelni, ennek tömege alapján pedig -jelenlegi elméleteink szerint- kölcsönhatási távolságot.

- Elektromágneses kölcsönhatás: közvetítője a foton, nulla tömegű, ennél fogva végtelen a hatótávolsága, az elektromos töltések között hat, amelyekből két féle van, az azonosak vonzzák, a különbözőek taszítják egymást.
- Gravitációs: a közvetítő részecskéjét (gravitron) nem sikerült kimutatni, ennek ellenére a kísérleti tapasztalatok alapján végtelen hatótávolságot tulajdonítunk neki. A tömegek között hat, csak vonzó lehet. Nagyskálán határozza meg az univerzum viselkedését, mert a többi kölcsönhatás vagy kiátlagolódik, vagy túl gyorsan lecseng.
- Erős kölcsönhatás: a színtöltések között hat, közvetítői a gluonok, rövidhatótávolságú, ugyanakkor fajlagosan a legerősebb kölcsönhatás. Másodlagos kölcsönhatásként az atommagot tartja össze.
- Gyengekölcsönhatás: az ízek között hat, közvetítő részecskéi a W^\pm és Z^0 bozonok, amelyek nagy tömegűek, ezért a hatótávolság igen rövid. A radioaktivitásban és más lassú bomlásokban játszik szerepet.

Kísérleti eszközök

A detektorok két típusát különböztetjük meg:

- számlálók - csak jelzik egy-egy részecske felbukkanását
- részecskenyom-detektorok - a detektoron áthaladó részecske pályáját rögzítik.

A detektálás során a részecske (sugárzás) és a detektoranyag valamilyen (általában EM) kölcsönhatását figyeljük meg. Semleges részecskék detektálása általában közvetett módon történik.

Gáztöltésű számlálók

Ionizációs kamra - felépítés: gázszigetelésű síkkondenzátor. Töltött részecske áthaladása esetén a gáz ionizálódik, a töltött részecskék a kondenzátorra kapcsolt feszültség (V) hatására mozogni fognak, az áram mérhető. Kis V esetén a töltéshordozók lassan mozognak, a rekombináció esélye nagy, ezért nem mindegyik jut el az elektródáig. Az áramerősség eleve kicsi, a kamra nagy intenzitások esetén használható (doziméter, kozmikus sugárzási mérések)

Proporcionális számláló - felépítés: cső alakú katód, benne középen egy anódszál, valamint a kettő között valamilyen gáz. Megfelelően nagy térerősség mellett egy szabadelektron két ütközés között a gáz ionizációs potenciáljának megfelelő energiára tehet szert, a gázmolekulával való ütközés után pedig már két elektron megy tovább. A folyamat többször megismétlődik, elektronlavina alakul ki. A végső jel arányos lesz a primer elektronok számával. Töltőgáznak metánt szoktak alkalmazni, mivel nagy az abszorpciója az ultraibolya tartományban

(rekombinációkor ilyen energiájú fotonok sugárzódnak ki). Felhasználás: neutronfluxus mérése (bór-tetrafluorid töltőgáz, bór + neutron magreakció).

Proporcionális kamra - felépítés: a katód két síklemez, közötté anódszálak, közös gáztérben, a széleken vékony műanyagfóliával határolva. Megfelelő mennyiségű anódszál esetén a részecske áthaladásának helyét akár mm pontossággal is megkaphatjuk.

Driftkamra - mint a proporcionális kamra, csak a szálak közötti távolság nagyobb (~10 cm). Egy kiegészítő szcintillációs számláló használatával mérhető a részecske azon történő áthaladása és az anódszálon megjelenése közötti idő. Ha az áthaladás mentén a térerő teljesen homogén, a megtett út és az ehhez szükséges idő közötti összefüggés lineáris. Mágneses térben nem alkalmazható (elrontaná a homogén teret). Bonyolultabb konstrukció, mint a proporcionális kamra, de mivel kevesebb szál van benne, ezért az ehhez szükséges elektronika jóval kevesebb (és olcsóbb).

Geiger-Müller cső - proporcionális számláló, magasabb tápfeszültségen. Egy elektron által megindított kisülés önfenntartó, így a jel detektálása egyszerűbb. Energiamérésre nem alkalmas. Argon + alkohol töltőgázkeverék alkalmazásával elérhető, hogy a számláló önkioltó legyen.

Szikrakamra - proporcionális kamra-szerűség. A síklap és a szálak között elegendő nagy feszültség esetén a kettő között szikra ütne át. Ha ennél a feszültségnél valamivel kisebbet kapcsolunk a vezetőkre, akkor egy, a detektoron áthaladó ionizáló részecske nyomán a szikra kialakulásának valószínűsége nagy lesz. Egy korábbi részecske által létrehozott ionokat egy állandó, nagyságrendileg 100 V-os tértisztító feszültséggel tüntetjük el. Koordináta-detektorként használható, az egyes szálak melletti elhaladás rögzíthető elektronikusan, vagy a szikrasorozat lefényképezésével.

Szcintillációs számlálók

A kristályokban keletkező felvillanásokat detektáljuk. Eleinte az észlelés szabad szemmel történt, később fotoelektron-sokszorozót alkalmaztak.

Felépítése:

- szcintillátor - a sugárzás itt alakul át fényenergiává,
- fotoelektron-sokszorozó - fényfelvillanás elektromos impulzussá alakítása,
- erősítés, analízálás, regisztrálás elektronikusan.

Töltött részecskék és fotonok detektálására alkalmas, utóbbi másodlagos folyamatok által (fotoeffektus, Compton-szórás, párkeltés). Gyakran használt szcintillátorok: ZnS(Cu), NaI(Tl), CsI(Tl), naftalin kristályok, toluol (folyadék).

Félvezető detektorok

Elsősorban Si, Ge használata, Li-al szennyezve vagy nagyon tiszta formában. Ge csak nagyon alacsony hőmérsékleten használható, viszont mivel nagyobb a rendszáma, mint a szilíciumé, előnyösebb a gamma-sugárzások detektálásához.

A félvezető detektorokban egységnyi átadott energia hatására lényegesen több töltéshordozó keletkezik, mint a szcintillációs vagy a gázionizációs detektorokban. Az ingadozás kisebb, ezért a felbontóképesség jobb.

Részecskenyom-detektorok

Elsősorban töltött részecskék detektálására alkalmas szerkezetek, ugyanis ezek azok, amelyek nyomot hagynak maguk után.

(Wilson-féle) ködkamra - túltelített gáz-gőz keverék. Ionizáló részecske nyomán a gázionokon a gőzcseppek kicsapódnak, láthatóvá válnak. Rögzítés: lefényképezzük. Kiegészíthető számláló detektorokkal, így a felvétel készítése vezérelhető.

Buborékkamra - forráspont fölé túlfűtött folyadékban a töltött részecske áthaladása után keletkezett ionpárok buborékokat hoznak létre. Ha a folyadék nyomását hirtelen lecsökkentjük, a pálya mentén lefényképezhető méretű

150/209

buborékok (~ 200 mikrométer) alakulnak ki. Nagy méretű, költséges szerkezetek.

CCD

Záróvizsga tematika

Tételek A klasszikus mechanika alapjai | A klasszikus mechanika elméleti tárgyalása | A relativitás elmélet alapjai | Egzaktul megoldható fizika problémák | Folytonos közegek mechanikája | Fenomenologikus termodinamika | Elektro- és magnetosztatika, áramkörök | Elektrodinamika | Hullámegyenlet és hullámoptika | Geometriai optika és alkalmazásai | A kvantumelmélet alapvető kísérletei | A kvantummechanika elméleti háttere | Atom- és molekulaszervezet | **A magfizika alapjai** | A termodinamika statisztikus alapozása | Kvantumstatisztikák | Kölcsonható rendszerek, mágneses anyagok | Kristályos anyagok fizikája | Nemegyensúlyi folyamatok leírása | Az asztrofizika alapjai

A lap eredeti címe: „http://mafihe.hu/~wiki/wiki/index.php/A_magfizika_alapjai”

- A lap utolsó módosítása: 2009. augusztus 19., 20:43

A termodinamika statisztikus alapozása

A TételWiki wikiből

Tartalomjegyzék

- 1 Az egyensúlyi statisztikus fizika feltevései
- 2 A Gibbs féle sokaságfogalom
- 3 Az entrópia
- 4 A mikrokanonikus sokaság
- 5 A hőmérséklet
- 6 A nyomás
- 7 A kémiai potenciál
- 8 Fundamentális egyenlet
- 9 Az első főtétel
- 10 A második főtétel
- 11 A harmadik főtétel
- 12 Kanonikus sokaság
- 13 Az ekvipartíció tétele
- 14 Egyensúly körüli fluktuációk
- 15 A szabadenergia
- 16 Nagykanonikus sokaság
- 17 A nagykanonikus potenciál
- 18 A klasszikus ideális gáz
 - 18.1 Bernoulli-formula(*)
 - 18.2 Maxwell gondolatmenete
 - 18.3 Kanonikus sokaságban

Az egyensúlyi statisztikus fizika feltevései

I. posztulátum: A magukra hagyott makroszkopikus rendszerek kellően hosszú idő után a termodinamikai egyensúly állapotába kerülnek.

Az egyensúly beállításában fontos a rendszer részrendszerei közötti kölcsönhatás, ha az egyensúly már beállt, akkor viszont a kölcsönhatás az esetek többségében elhanyagolható.

II. posztulátum: Egyensúlyi állapotban lévő rendszer minden olyan mikroállapotát egyenlő valószínűséggel veszi fel, amely a róla szerzett, nem teljes információval (tipikusan makroszkopikus állapotjelzővel) összeegyeztethető.

Másképp fogalmazva, ha a rendszerrel kevesebb információnk van, mint amennyi az összes mikroállapotot rögzítené, akkor az általunk megfigyelhető állapotot a rendszer egynél több mikroállapottal tudja megvalósítani, és ezeket egyforma valószínűséggel fogja felvenni.

Ez a posztulátum azt jelenti, hogy nem vetítünk a rendszerre olyan információt, amelyet nem tudunk róla. Ez pedig a statisztikus fizika kivételével minden más tudományágra jellemző! A feltétel matematikai megfogalmazása az entrópia maximalizálását jelenti.

A Gibbs féle sokaságfogalom

Egy makroállapothoz nagyon sok különböző mikroállapot tartozik. Ezt úgy mondhatjuk, hogy a makroszkopikus tulajdonságok ismerete nem egy makroszkopikus testet határoz meg, hanem azok egy sokaságát. Ezt a halmazt

nevezzük Gibbs féle sokaságnak.

Termodinamikai egyensúlyban lévő rendszerek esetében a rajtuk végzett mérések eredménye független a mérés idejétől, így a mért érték a mennyiség időbeli átlagának tekinthető. A mérés ideje alatt azonban a rendszer sok mikroállapotát megvalósítja, így azt várjuk, hogy a sokaságra vett átlag megegyezik az időbeli átlaggal. Ha ez teljesül, akkor a bonyolult időbeli átlagtól eltekinthetünk.

A sokaság megadása eloszlásfüggvénnyel történik. $\rho(i)$ azt adja meg, hogy milyen valószínűséggel van a rendszer az i . állapotában. A normálást a

$$\sum \rho(i) = 1$$

feltétel adja. Egy A fizikai mennyiség sokaságátlaga pedig:

$$\sum A(i)\rho(i)$$

Kvantumos rendszer esetén ez a rendszer állapotaira való szummázást jelenti, azonos részecskékből álló klasszikus fizikai rendszer esetén pedig

$$\sum \rightarrow \int \frac{d\vec{q}d\vec{p}}{N!h^{3N}}$$

helyettesítés alkalmazandó. Az $N!$ és a h^{3N} tag szükségességére később talán még visszatérünk. Egyelőre annyit említünk meg, hogy nyilvánvaló módon, egy klasszikus fizikai rendszer végtelen sok állapotban lehet, hiszen folytonos értékeket vesznek fel mind a koordináták, mind az impulzusok. Ahhoz, hogy meg tudjuk számolni az állapotokat, a fázisteret valahogy diszkrétizálni kell, például kis hiperkockákra kell bontani. Ha a rendszer egy adott kockában van, az tekinthető egy állapotnak. Dimenzióanalízis adja, hogy a képletben szereplő h -nak hatásdimenziójú mennyiségnek kell lennie. Az, hogy ez ténylegesen a **Planck-állandó**, pedig a kvantumstatisztikák klasszikus határátmenetének elvégzésekor olvasható le. Az $N!$ szorzó kvantummechanikai esetben szintén természetesnek hat, hiszen az azonos részecskék megkülönböztethetetlenek, azonban a klasszikus fizikában ez nem igaz, ez vezetett a **Gibbs-paradoxon**hoz, amely lényegében azt jelenti, hogy ahhoz, hogy az entrópia extenzív mennyiség legyen, szükség volt az $N!$ bevezetésére.

Az entrópia

Definíció szerint az entrópia:

$$S = -k \int \rho \cdot \ln \rho$$

Az entrópia maximalizálása jelenti a II. posztulátum teljesítését. Miért?

Az így definiált entrópia a **Shannon féle információelméleti entrópia**:

$$S_{inf} = - \sum p_i \log_2(p_i),$$

ahol p_i általánosított valószínűségeloszlás. Ennek a következő tulajdonságai vannak:

- Biztos eseményre minimális.
- Ha $p_i = p$ minden i -re, akkor maximális.
- Független eloszlásokra additív.

Ezek pont azok a tulajdonságok, amiket az entrópiától elvárunk. Tehát mindig az entrópia szélsőértékét kell keresni, a makroszkopikusan adott mennyiségeket mint mellékfeltételt figyelembevéve. Ennek matematikai módszere a variációszámítás alkalmazása az S funkcionálra, a mellékfeltételek pedig Lagrange-multiplikátorok segítségével vehetők figyelembe.

A mikrokanonikus sokaság

A mikrokanonikus sokaság a zárt rendszer statisztikus modellje. Itt az ismert makroszkopikus feltétel az, hogy a rendszer teljes energiája E és $E + \delta E$ között legyen. Az eloszlásfüggvény:

$$\rho(i) = \frac{1}{\Omega(E, \delta E)} \text{ ha } E \leq E_i \leq E + \delta E, \text{ máshol pedig } 0.$$

Ahol mikroállapotok száma:

$$\Omega(E, \delta E) = \sum_{E \leq E_i \leq E + \delta E} 1$$

illetve klasszikus esetben

$$\Omega(E, \delta E) = \frac{1}{N! h^{3N}} \int_{E \leq E(\vec{q}, \vec{p}) \leq E + \delta E} \vec{d}q \vec{d}p$$

Itt hallgatólagosan kihasználtuk, hogy a fázistérbeli sűrűség csak az energiától függ. Ennek háttérében az áll, hogy stacionárius megoldást keresünk ($\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$). Ebből a Liouville-egyenlet szerint következik, hogy a fázistérbeli sűrűség csak additív mozgásállandóktól függhet. Megfelelő koordinátarendszert választva az impulzus és az impulzusmomentum 0, így a fázistérbeli sűrűség valóban csak az energiától függ. Ez a hatalmas redukció a paraméterek számában ($6N \rightarrow 1$) a statisztikus fizika egyik legfontosabb elméleti pillére.

Az eloszlásfüggvényt behelyettesítve az entrópia definíciójába megkapjuk az eredeti Gibbs féle entrópiafogalmat, amely zárt rendszerre érvényes:

$$S = k \cdot \ln \Omega(E, \delta E)$$

Innen még úgy tűnhet, hogy az entrópia még függ a kis δE megválasztásától is, ez azonban nagyon jó közelítéssel nem igaz, sőt, gyakorlati alkalmazásokban $\Omega(E, \delta E)$ helyettesíthető:

$$\Omega(E) = \sum_{0 \leq E_i \leq E} 1_{\text{el}}$$

illetve klasszikus esetben a:

$$\Omega(E, \delta E) = \frac{1}{N! h^{3N}} \int_{0 \leq E(\vec{q}, \vec{p}) \leq E} \vec{d}q \vec{d}p$$

függvénnyel.

Az S természetes változói az extenzív állapotjelzők: $S(E, V, N)$.

Ha x egy fizikai mennyiség, akkor annak a valószínűsége, hogy egy x_k értéket vesz fel

$$P_k = \frac{\Omega(E, \delta E, x_k)}{\Omega(E, \delta E)}$$

ahol $\Omega(E, \delta E, x_k)$ azon állapotok száma, amelyek az energia $(E, E + \delta E)$ közötti értéke mellett még rögzített $x = x_k$ értékkel is rendelkeznek.

A hőmérséklet

Tekintsünk egy zárt rendszert, amely két alrendszerből áll, melyek között energia áramolhat. Ekkor az összes

állapotok száma egyenlő a részrendszerek állapotszámainak szorzatával:

$$\Omega(E, \delta E) = \Omega_1(E_1, \delta E)\Omega_2(E - E_1, \delta E)$$

Ekkor az egyensúly feltétele (az entrópia szélsőértéke: $\frac{\partial S}{\partial E_1} = 0$) a következőhöz vezet

$$\frac{\partial S_1}{\partial E_1} = \frac{\partial S_2}{\partial E_2}$$

mivel tudjuk, hogy az egyensúlyi feltétel a fenomenologikus termodinamikában a hőmérsékletek egyenlősége, ezért dimenzióanalízissel adódik, hogy a T hőmérsékletet érdemes a következőképpen definiálni:

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E}$$

Később majd látjuk, hogy ez valóban ugyanaz, mint a termodinamikai hőmérséklet.

A nyomás

Tekintsünk egy olyan zárt rendszert, melynek egyik alrendszere E_1 energiájú, N_1 részecskét tartalmazó gáz, a másik alrendszere pedig egy E_2 energiájú rugó, a két alrendszert dugattyú választja el. Itt ismételtelen keresve az entrópia szélsőértékét, a mechanikai egyensúly feltételével (erők egyenlősége) összeegyeztethető egyenlőséget kapunk, ha a gáz p nyomását a következőképpen definiáljuk:

$$\frac{p}{T} = \frac{\partial S}{\partial V}$$

A kémiai potenciál

Ha egy olyan rendszert tekintünk, melyek két alrendszere részecske és energiacserére képes, térfogata viszont állandó. Ekkor szintén kapunk egy egyensúlyi feltételt, amely a kémiai potenciálok kiegyenlítődsét adja, ha a kémiai potenciál a következőképpen definiáljuk:

$$\frac{\mu}{T} = -\frac{\partial S}{\partial N}$$

Fundamentális egyenlet

Az előző három pontban leírtak szerint az entrópia teljes differenciálja:

$$dS = \frac{1}{T}dE + \frac{p}{T}dV - \frac{\mu}{T}dN$$

ennek átrendezése adja a fundamentális egyenletet:

$$dE = TdS - pdV + \mu dN$$

Az első főtétel

Legyen egyelőre a részecskeszám állandó. Hasonlítsuk össze a termodinamika első főtételét a fundamentális egyenlettel! Az első szerint:

$$dE = \delta Q + \delta W$$

a második szerint:

$$dE = TdS - pdV$$

Vonzó ötlet a két egyenlet egyes tagjait azonosítani, de ez a legáltalánosabb esetben nem helyes. Persze a bal oldalak azonos kezdő- és végállapotok esetén egyenlők. Az első egyenlet az energiamegmaradást fejezi ki, a test energiájának megváltozása egyenlő a munka és a hőközlés összegével. A második egyenlet csak egyensúlyban értelmezhető, hiszen T és p egyébként nem értelmes mennyiségek, tehát ez az egyenlet csak két egyensúlyi állapot energiakülönbségéről szól. De **általánosan nem** igaz, hogy $TdS = \delta Q$. Például tekintsünk egy olyan zárt rendszert, amely egy V, T, p állapotjelzőkkel leírható gáztól egy elválasztóval elválasztott dV térfogatú vákuumot tartalmaz még. Ekkor ha a válaszfalat a felület normálisára merőleges irányban kirántjuk, akkor $\delta W = 0$, hiszen merőleges az elmozdulás és az erő. Ugyanakkor a rendszert zárt, tehát $\delta Q = 0$. Ekkor $dE=0$. Ugyanakkor pdV nem 0, és $TdS=pdV$. Ezért $\delta Q \neq TdS$. Ugyanakkor, ha a folyamat olyan lassan megy végbe, hogy a változás közben a rendszert pillanatnyi paramétereivel jellemzett egyensúlyi állapotban lévőnek vehetjük (**kvázisztatikus folyamat**), akkor az egyenlet két tagja valóban egyenlő, hiszen térfogati munkát tekintve:

$$\delta W = -pdV$$

Ebből következik, hogy:

$$dS = \frac{\delta Q}{T}$$

Beláttuk, hogy a **termodinamikai és a statisztikus fizikai entrópia fogalom ekvivalens**.

A második főtétel

A második főtétel szerint spontán folyamatokban az entrópia mindig nő. Ez az állítás következik az $S = k \cdot \Omega(E, V, N)$ definícióból, ugyanis spontán változásokban az állapotok száma mindig nő. Például, ha egy hőszigetelt edényt válaszfalal két részre bontunk, és az egyik felében gáz van, a másikban vákuum, akkor a válaszfal elhúzása után a gáz kitölti az egész edényt, megvan minden korábbi állapota, de nagyon sok más is, így az entrópia nő.

Nem zárt rendszer esetén a második főtétel:

$$dS \geq \frac{\delta Q}{T_0}$$

ez is könnyen belátható, ha az A rendszerből és az A' tartályból álló zárt rendszert tekintjük, a tartály ugyanis nagy, benne a változás kvázisztatikus ezért entrópiaváltozása $-\frac{\delta Q}{T_0}$, a teljes rendszerre pedig igaz a zárt rendszerre vonatkozó főtétel.

A harmadik főtétel

A harmadik főtétel azt mondja ki, hogy 0 hőmérséklethez tartva az entrópia is 0-hoz tart. Ez nem igazolható általánosan, csak a konkrét rendszer tulajdonságait figyelembe véve.

Kanonikus sokaság

A kanonikus sokaság a hőtartályban lévő test statisztikus modellje. A szokásos normálási feltétel mellett adott az energia várhatóértéke:

$$\int E \cdot \rho \cdot d\Gamma = \langle H \rangle = \text{adott}$$

A Lagrange multiplikátor módszerrel ezt a kényszert figyelembe véve az eloszlásfüggvényre a következő adódik:

$$\rho(i) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E}$$

ahol β mint Lagrange-multiplikátor jelent meg, ahol az állapotösszeg:

$$Z = \sum e^{-\beta E_i},$$

illetve N klasszikus részecske esetén:

$$Z = \frac{1}{N! h^{3N}} \int e^{-\beta E(\vec{p}, \vec{q})} d\vec{p} d\vec{q}$$

β dimenzióanalízis miatt energia mértékegységű. Hogy pontosan micsoda, az a következőképpen dönthető el. Tekintsünk egy zárt rendszert, amely áll a kérdéses kanonikus rendszerből és a hőtartályból. A kettő együtt a mikrokanonikus sokasággal írható le, a rendszer összenergiája E. Ekkor annak a valószínűsége, hogy a kis méretű rendszer energiája E_i :

$$\rho(i) = \frac{\Omega_T(E - E_i)}{\Omega(E)}$$

ahol T a hőtartályt jelenti. Feltételünk szerint $E_i \ll E$, vagyis ha $\ln \rho$ -t sorbafejtjük, akkor:

$$\ln \rho \approx konst. + \ln \Omega_T(E) - \left(\frac{\partial \ln \Omega_T(E_T)}{\partial E_T} \right)_{E_T=E} E_i + \dots$$

Innen már leolvasható, hogy

$$\beta = \frac{1}{kT}$$

Az ekvipartíció tétele

Ha egy klasszikus rendszer Hamilton operátor $H = ax^2 + H_2$ alakú, ahol H_2 nem függ x-től (ami tetszőleges impulzus vagy koordinátakomponens), akkor $\langle ax^2 \rangle = \frac{1}{2} kT$, azaz a Hamilton ezen részére átlagosan $\frac{1}{2} kT$ energia jut. Ez az ekvipartíció tétele. A kanonikus formalizmus alapképleteit használva könnyen belátható.

Az ekvipartíció tétel sok egyszerű eredményt ad, ilyen pl.:

Egyatomos ideális gáz energiája:

$$E = \frac{3}{2} N k T$$

Dulong-Petit szabály: Eredetileg empirikus összefüggés a szilárdtestek hőkapacitásáról. Akkor kapható meg, ha feltételezzük, hogy a szilárd test N független 3 dimenziós oszcillátorból áll. Ekkor

$$C_V = 3Nk.$$

Egyensúly körüli fluktuációk

Az energia várható értéke:

$$\langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum E_i e^{-\beta E_i} = - \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta}$$

157/209

hasonlóan

$$\langle E^2 \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2}$$

Az energiafluktuációk négyzete:

$$\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} - \left(\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)^2 = -\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta} = kT^2 \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = kT^2 C_V$$

Kihhasználva, hogy a hőkapacitás és az energia extenzív mennyiségek révén arányosak N-el relatív fluktuációk:

$$\sqrt{\frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{E^2}} \propto \frac{1}{\sqrt{N}}$$

ami, mivel N nagyon nagy szám (10^{23}) arra utal, hogy a fluktuációk makroszkopikus testek esetén nagyon kicsik. Kérdéses azonban, hogy mekkora az arányossági tényező, ez ugyanis fázisátalakulások közelében nagyon megnőhet.

A szabadenergia

Ha E energiához $\Omega(E)$ állapot tartozik, akkor az állapotösszeg:

$$Z = \sum \Omega(E) e^{-\beta E}$$

a termodinamikai limitben az energiaeloszlás Dirac-delta szerű, ezért

$$k_b \ln Z = S - \frac{E}{T}$$

innen a szabadenergia termodinamikai definícióját felhasználva:

$$F = E - TS = -kT \ln Z$$

A szabadenergia szemléletesen egy zárt rendszerből kinyerhető hasznos munkát méri állandó hőmérsékleten és nyomáson.

Annak a valószínűsége, hogy egy x extenzív mennyiség értéke x legyen:

$$P(x) = \frac{1}{Z} \sum_E \Omega(E, x) e^{-\beta E}$$

kihasználva, hogy a makroszkopikus testek esetén E eloszlása nagyon keskeny a szummát egyszerűen a legvalószínűbb értékkel helyettesíthetjük:

$$P(x) \approx \frac{1}{Z} \Omega(\bar{E}, x) e^{-\beta \bar{E}} = \frac{1}{Z} e^{S(x)/k - \beta E} = \frac{1}{Z} e^{-\beta F(x)}$$

vagyis az egyensúly (a legvalószínűbb állapot) feltétele F minimuma.

Nagykanonikus sokaság

Ha a kis rendszer a nagy rendszertől nem csak hőt vehet át, hanem a részecskék is "átmehetnek a falon", akkor nagykanonikus sokaságról beszélünk, ekkor az energia és a részecskeszám átlagértékét tekintjük adottnak:

$$\int E \cdot \rho \cdot d\Gamma = \langle H \rangle$$

157/209

158/209

$$\int N \cdot \rho \cdot d\Gamma = \langle N \rangle$$

A Lagrange-multiplikátor módszer szerint az eloszlásfüggvény:

$$\rho(i) = \frac{1}{Q} e^{-\beta E + \alpha N}$$

ahol $-\beta, \alpha$ a különböző mellékfeltételekhez tartozó Lagrange-multiplikátorok. A kanonikus eloszlásnál leírthoz hasonló elemzés szerint pedig

$$\beta = \frac{1}{kT}$$

$$\alpha = \frac{\mu}{kT}$$

a normáláshoz szükséges Q tényező pedig:

$$Q = \sum_N \sum_i e^{-\beta(E_N(i) - \mu \cdot N)}$$

illetve a klasszikus esetben:

$$Q = \sum_N \int \frac{e^{-\beta(E_N - \mu \cdot N)} d\Gamma}{h^{3N} N!}$$

A nagykanonikus potenciál

$$Q = \sum \Omega(E, N) e^{-\frac{E}{kT} + \frac{\mu N}{kT}}$$

termodinamikai határesetben az eloszlások élesek:

$$k \cdot \ln Q = S - \frac{E}{T} + \frac{\mu N}{T}$$

a nagykanonikus potenciál termodinamikai definícióját használva:

$$\Phi = E - TS - \mu N = -kT \ln Q$$

A nagykanonikus potenciál (vagy Landau-potenciál) minimuma lesz az egyensúly feltétele nagykanonikus sokaság esetében. Ez a szabadenergiánál leírthoz hasonló gondolatmenettel belátható. Kémiai egyensúlyban tehát Φ minimális.

A klasszikus ideális gáz

Az eddigiek alkalmazásaként lássuk a klasszikus részecskékből álló nem kölcsönható gáz példáját.

Bernoulli-formula(*)

Tekintsünk egy nagyon egyszerű modellt. Egy valamilyen edényben lévő klasszikus ideális gáz esetén, feltéve, hogy erő csak a fallal való ütközéskor lép fel, a viriál:

$$\int_S \vec{F} \vec{r} dS = -p \int \vec{n} \vec{r} dS = -p \int_V \nabla \vec{r} dV = -3pV$$

158/209

Továbbá:

$$\frac{d}{dt} \sum p_i r_i = \sum \dot{p}_i r_i + \sum p_i \dot{r}_i$$

egyenlet időátlagolásával:

$$0 = \langle \sum F_i r_i \rangle + 2N \langle \epsilon \rangle$$

ahol ϵ egy részecske energiája. A két egyenlet összeolvasásával

$$pV = \frac{2}{3} N \langle \epsilon \rangle$$

Maxwell gondolatmenete

Maxwell gyakorlatilag még a statisztikus fizika megszületése előtt levezette az ideális gáz sebességeloszlását. Annak a valószínűsége, hogy egy atom sebessége d^3v -be esik:

$$f(\vec{v}) d^3v$$

Maxwell gondolatmenete a következő volt:

- Nincs kitüntetett irány

vagyis $f(|\vec{v}|)$ szerint függ, vagyis f -nek v szerinti gradiense párhuzamos v -vel:

$$\frac{1}{v_x} \frac{\partial f(\vec{v})}{\partial v_x} = \frac{1}{v_y} \frac{\partial f(\vec{v})}{\partial v_y} = \frac{1}{v_z} \frac{\partial f(\vec{v})}{\partial v_z}$$

- v_x, v_y, v_z független

$$f(v) = g(v_x)g(v_y)g(v_z)$$

ezért:

$$\frac{g'(v_x)}{v_x g(v_x)} = \frac{g'(v_y)}{v_y g(v_y)} = \frac{g'(v_z)}{v_z g(v_z)} = -2\alpha$$

Ennek a differenciálegyenletnek a megoldása:

$$g(v_i) = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} e^{-\alpha v_i^2}$$

ahol már g normáltóságát is kihasználtuk. α értékét megkaphatnánk az ekvipartíció felhasználásával, hiszen

$$\langle v_x^2 \rangle = \frac{1}{2\alpha},$$

de ez Maxwell idejében még általánosan nem volt ismert. Helyette a Bernoulli-formula és az ideális gáz állapotegyenletének kombinálásával jutott arra a következtetésre, hogy $\alpha = \frac{m}{2kT}$. A sebesség abszolút értéke szerinti eloszlás:

$$F(v)dv = \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} 4\pi v^2 dv$$

Kanonikus sokaságban

160/209

Természetesen a kanonikus sokaság ismeretében a sebességeloszlás rögtön leolvasható az alapképletből. Több is megtehető azonban. Megkapható ugyanis az ideális gáz állapotegyenlete. Az állapotösszeg $3N$ Gauss-integrál kiszámítása után:

$$Z = \frac{V^N}{h^{3N} N!} (2\pi mkT)^{3N/2}$$

A szabadenergia:

$$F = -kT \ln Z = -kT (N \ln V - 3N \ln h - \ln N! + \frac{3N}{2} \ln (2\pi mkT))$$

A nyomás:

$$p = -\frac{\partial F}{\partial V} = kT \frac{N}{V}$$

Záróvizsga tematika

Tételek A klasszikus mechanika alapjai | A klasszikus mechanika elméleti tárgyalása | A relativitás elmélet alapjai | Egzaktul megoldható fizika problémák | Folytonos közegek mechanikája | Fenomenologikus termodinamika | Elektro- és magnetosztatika, áramkörök | Elektrodinamika | Hullámegyenlet és hullámoptika | Geometriai optika és alkalmazásai | A kvantumelmélet alapvető kísérletei | A kvantummechanika elméleti háttere | Atom- és molekulaszervezet | A magfizika alapjai | **A termodinamika statisztikus alapozása** | Kvantumstatisztikák | Kölcsönható rendszerek, mágneses anyagok | Kristályos anyagok fizikája | Nemelegensúlyi folyamatok leírása | Az asztrofizika alapjai

A lap eredeti címe: „http://mafihe.hu/~wiki/wiki/index.php/A_termodinamika_statisztikus_alapoz%C3%A1sa”

- A lap utolsó módosítása: 2009. augusztus 19., 20:47

Kvantumstatisztikák

A TételWiki wikiből

Tartalomjegyzék

- 1 Bevezetés, ideális gázok, Fermi- és Bose-eloszlás
 - 1.1 A Bose-Einstein-eloszlás
 - 1.2 A Fermi-Dirac-eloszlás
 - 1.3 Ideális gázok
 - 1.4 A klasszikus határeset
- 2 Bose-Einstein kondenzáció
- 3 Hőmérsékleti sugárzás, Stefan-Boltzmann törvény
- 4 Fononok, szilárdtestfizikai alkalmazások (diszperziós reláció)
- 5 Degenerált Fermi-gáz
- 6 Elektronfajhó, kvantumkorrekciók. {Bethe-Sommerfeld sorfejtés, Landau-paramágnesség}

Bevezetés, ideális gázok, Fermi- és Bose-eloszlás

Egy sokrészecskés kvantummechanikai rendszert a hullámfüggvénye ír le, ami összes részecske összes koordinátájától, és egyéb, belső szabadsági fokot leíró változójától (pl.: spin) is függ. Egy fizikai mennyiség várható értéke az operátorával vett szendiccsel számítható ki: $\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle$. Bármilyen hullámfüggvény kifejezhető például az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet megoldásaival, amik a rendszer energiasajátállapotai. Véges méretű rendszernél ezekből általában megszámlálhatóan sok van, így a hullámfüggvény egy (véges vagy végtelen) összeggel adható meg:

$$\Psi = \sum_n c_n \Psi_n$$

Itt $p_n \equiv |c_n|^2$ a valószínűsége annak, hogy a rendszeren mérést végezve azt az n -edik sajátállapotban találjuk. Így ha megadjuk a rendszer hullámfüggvényét egy pillanatban, akkor azzal megadtuk a rendszert leíró valószínűségeloszlást is. A rendszer entrópiája a klasszikus rendszerekhez hasonlóan

$$S = -k \sum_n p_n \ln p_n$$

A klasszikus rendszerekkel szemben, ahol a rendszer energiája egy tartományon belül folytonosan változhatott, itt az energia (és így a rendszert leíró többi mennyiség is) megszámlálhatóan sok diszkrét értéket vehet fel. Sokrészecskés rendszernél általában az energiasajátértékek degeneráltak, és nagyon sok van belőlük, így az összegzést gyakran integrállal lehet helyettesíteni.

A továbbiakban kölcsönhatás nélküli kvantumgázokkal foglalkozunk. Ekkor a részecskék közül mindegyikre ugyanaz az egyrészecskés Schrödinger-egyenlet vonatkozik, az ennek megoldásaként adódó egyrészecskés energiasajátállapotok minden részecskére ugyanazok, így (mivel a részecskék megkülönböztethetetlenek) a rendszer leírásához elég azt leírni, hogy melyik egyrészecské sajátállapotban hány részecske van. Fermionoknál ehhez hozzá kell tenni még azt a feltételt, hogy egy energiasajátállapotban legfeljebb egy részecske lehet, bozonoknál akármennyi. A kvantumgázoknál általában nagykanonikus sokaságban érdemes dolgozni, mert így az állapotösszeg és a belőle számítható mennyiségek kiszámításakor nem kell a részecskék számára vonatkozó mellékfeltételt figyelembe venni, ami egyszerűsíti a számításokat. Ekkor a részecskeszámot és a többi mennyiséget is a kémiai potenciál függvényében kell kiszámítani, az így kapott eredményekből a kémiai potenciál kiküszöbölésével lehet a gáz állapotegyenletét meghatározni, ez azonban analitikusan nem végezhető el.

A Bose-Einstein-eloszlás

$n_l = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_l - \mu)} - 1}$ megadja az ε_l energiájú állapotban levő részecskék várható értékét. Ahhoz, hogy ez sehol se divergáljon és a részecskék száma pozitív legyen, az szükséges, hogy a kémiai potenciál kisebb legyen a legalacsonyabb energiaszintnél (így a nevezőben mindig egy pozitív szám lesz).

A Fermi-Dirac-eloszlás

$n_l = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_l - \mu)} + 1}$ megadja az ε_l energiájú állapotban levő részecskék várható értékét. A Fermi-eloszlás értéke mindig egy 0 és 1 közötti szám.

Ideális gázok

Egy L oldalú kockába zárt ideális gáznál az energisajátállapotok: $\varepsilon(r_1, r_2, r_3) = \frac{\hbar^2}{4L^2 2m} (r_1^2 + r_2^2 + r_3^2)$ Itt a három r egész értékeket vehet fel. Az eloszlásfüggvények segítségével kiszámíthatjuk a részecskeszámot és az energiát.

$$N = \sum_l n_l$$

$$E = \sum_l \varepsilon_l n_l$$

A nyomás a nagykanonikus potenciálból származtatható:

$$pV = \pm kT \sum_l \ln(1 \pm e^{\beta(\mu - \varepsilon_l)})$$

A felső előjel vonatkozik a fermionokra, az alsó a bozonokra.

A fenti összegzések (azt feltételezve, hogy nagyon sok energiaszint van és ezek egymáshoz közel helyezkednek el) integrállal közelíthetők, az eredmények:

$$N = (2s + 1) \frac{2V\pi}{h^3} (2m)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\varepsilon}}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} \pm 1} d\varepsilon$$

$$E = (2s + 1) \frac{2V\pi}{h^3} (2m)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{3/2}}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} \pm 1} d^3p$$

$$pV = \pm (2s + 1) \frac{2V\pi}{h^3} (2m)^{3/2} kT \int_0^\infty \sqrt{\varepsilon} \ln(1 \pm e^{\beta(\mu - \varepsilon)}) d\varepsilon$$

Itt s a részecskék spinje, V a gáz térfogata, és $\varepsilon(p) = \frac{p^2}{2m}$ egy részecske energiája. A nyomás kifejezését parciálisan integrálva kapjuk, hogy:

$$pV = \frac{2}{3} E$$

A klasszikus határeset

Mindkét eloszlásnak a klasszikus határeset a Boltzmann eloszlás. Ha a számlálóban levő exponenciális tag nagy, akkor mellette az 1 elhanyagolható, és pont a Boltzmann eloszlást kapjuk. (Természetesen ekkor mindegyik állapotban a részecskék számának várható értéke nagyon kicsi, majdnem 0.) Legyen az alapállapot energiája $\varepsilon_0 = 0$ (az alapállapot energiát tetszőlegesen eltolhatjuk, mert nem mérhető), a részecskék energiája: $\varepsilon \geq 0$. Ekkor annak a feltétele, hogy az eloszlásban szereplő exponenciális értéke minden energiaszintre nagy legyen annak felel meg, hogy

$$e^{-\beta\mu} \gg 1 \text{ teljesüljön. Klasszikus ideális gázra: } e^{\beta\mu} = \frac{N}{V} \left(\frac{h^2}{2\pi mkT} \right)^{3/2}$$

$$\text{Ezzel az előző feltétellel: } 1 \gg \frac{N}{V} \left(\frac{h^2}{2\pi mkT} \right)^{3/2}$$

Azaz az előző feltétel annak felel meg, hogy elég magas legyen a hőmérséklet és elég kicsi legyen a gáz sűrűsége. Ugyanezt az eredményt kapjuk a határozatlansági reláció felhasználásával is. Klasszikus esetben $\Delta x \Delta p \gg h$, a koordináta és impulzusbizonytalanságokról pedig feltételezzük, hogy kisebbek, mint azok átlagos értékei:

$$\Delta x \ll R = \left(\frac{V}{N} \right)^{1/3} \quad \Delta p \ll p_T = \sqrt{2mkT}$$

Ezeket behelyettesítve a határozatlansági relációba és mindkét oldal harmadik hatványát véve pont az előbbi feltételt kapjuk.

Bose-Einstein kondenzáció

A Bose-kondenzáció lényege, hogy a hőmérsékletet csökkentve egy megmaradó számú részecskéből álló Bose-gázban makroszkópicusan sok részecske lesz a legalsó energiaszinten (mivel az egy energiaszinten levő részecskék számát semmi sem korlátozza), a $T = 0$ hőmérsékletű határesetet véve az összes részecske a legalsó szinten lenne.

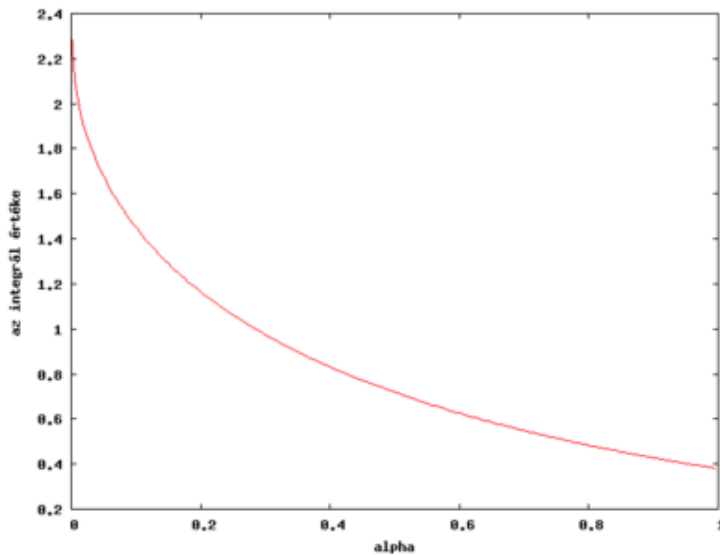
Legyen egy dobozba zárt ideális Bose-gázunk (ahol a részecskék száma megmarad), és kezdjük el hűteni. Mivel a részecskék száma megmarad, a sűrűségnek is állandónak kell lennie. A sűrűség:

$$\frac{N}{V} = \frac{4\pi}{h^3} \int_0^\infty \frac{p^2 dp}{e^{\beta\left(\frac{p^2}{2m} - \mu\right)} - 1} = 2\pi \left(\frac{2mkT}{h^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\sqrt{x} dx}{e^{x+\alpha} - 1}$$

Itt felhasználtuk a $x \equiv \frac{\beta p^2}{2m}$ és a $\alpha \equiv -\beta\mu$ helyettesítéseket. Mivel itt a legalsó energiaszintet 0-nak vettük, így

$\alpha \geq 0$. Az integrál szorzója egy véges szám, ami a hőmérsékletet csökkentve egyre csökken, így ahhoz, hogy a sűrűség állandó maradjon, az integrál értékének nőnie kell. Az integrál az $\alpha = -\beta\mu$ paraméter függvénye, így az integrál növekedése a kémiai potenciál változtatásával érhető el. Megvizsgálva az integrál eredményéből adódó függvényt azt kapjuk, hogy az α -nak a monoton csökkenő függvénye, és $\alpha = 0$ -nál is véges értéket vesz fel.

164/209



Mivel az integrál előtti szorzó tetszőlegesen kis értéket felvehet a hőmérsékletet csökkentve, ezért az integrál értékének növekedése ezt csak egy ideig tudja kompenzálni, egy kritikus hőmérséklet alatt (ahol α eléri a 0-t) a részecskeszám elkezd csökkenni, és a hőmérséklettel 0-hoz tartva az integrállal számolt részecskeszám is 0-hoz tart, ami ellentmond annak a feltevésnek, hogy a rendszerben a részecskék száma megmarad.

Az ellentmondás abból fakad, hogy a részecskeszám integrállal kiszámítása csak egy közelítés, a valóságban diszkrét állapotok vannak, és ezekre összegzést kell végezni. A legalacsonyabb energiaszinten levő részecskék száma:

$$N_0 = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_0 - \mu)} - 1}$$

A fenti esetben $\varepsilon_0 = 0$ és így az exponenciális függvény kitevőjében pont α áll. Abban az esetben, ha α 0-hoz tart (azaz a kémiai potenciál tart a legalacsonyabb energiájú állapothoz), N_0 értéke divergál, a legalacsonyabb állapotban levő részecskék száma akármilyen nagy lehet. Az első gerjesztett állapotban levő részecskék száma már véges, nagyságrendekkel kisebb lesz, így az a többi állapottal együtt integrállal kezelhető. Így a részecskeszám kiszámításához a kritikus hőmérséklet alatt a legalsó energiaszinten levő részecskék számát külön kell venni, a többi részecskét lehet integrállal számolni ($\alpha = 0$ -val számolva). A részecskék száma a kritikus hőmérsékleten:

$$N = 2\pi V \left(\frac{2mkT_C}{h^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\sqrt{x} dx}{e^x - 1}$$

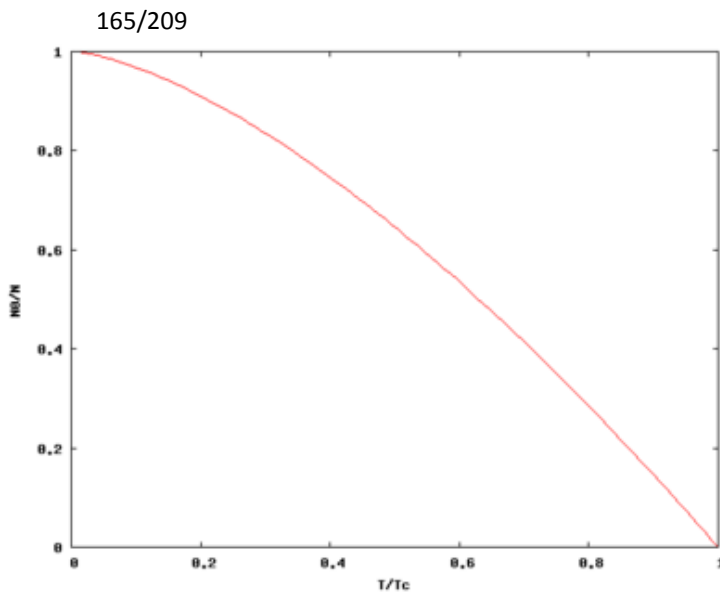
A kritikus hőmérséklet alatt:

$$N = N_0 + 2\pi V \left(\frac{2mkT}{h^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\sqrt{x} dx}{e^x - 1}$$

Itt N_0 adja a legalsó szinten levő részecskék számát, az integrálos tag pedig a magasabb energiaszinteken levő részecskéket. Ha a gáz hűtése közben a részecskék száma megmarad, akkor a két részecskeszám megegyezik és ebből N_0 kifejezhető:

$$N_0 = N \left(1 - \left(\frac{T}{T_C} \right)^{3/2} \right)$$

164/209



A természetben ritka alkáli gőzökben (^{23}Na és ^{87}Rb) figyeltek meg Bose-kondenzációt, pár μK hőmérsékleten, mágneses csapdáknál lehűtve. Az elsőre szóba jövő jelölt ^4He -nél azon a hőmérsékleten és sűrűsége, ahol Bose-kondenzációra lehetne számítani, már folyadék halmazállapotba kerül, ahol már nem elhanyagolható a részecskék közötti kölcsönhatás, a Bose-kondenzáció helyett a szuperfolyékonyság jelenik meg, ami szintén egy makroszkópikus kvantumeffektus.

Hőmérsékleti sugárzás, Stefan-Boltzmann törvény

Vizsgáljuk meg egy (az egyszerűség kedvéért kocka alakú) kályhában kialakuló sugárzást! A kályha falait tökéletesen tükrözőnek (tökéletes vezető fémnek) feltételezve a Maxwell-egyenletek megoldásaként adódó állóhullámok felelnek meg a rendszer energiasajátállapotainak. A kályhában véges sok állóhullám módus alakulhat ki, egy módus frekvenciája:

$$\omega = \frac{\pi c}{L} \sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2}$$

Itt L a kocka élhossza, c a fénysebesség (a hullámok terjedési sebessége), n_1 , n_2 és n_3 egész számok. Klasszikusan egy módus energiája bármennyi lehetne. A kvantumos tárgyalásban viszont az ω frekvenciájú módus energiája $n\hbar\omega$, ahol n egész szám. Így a rendszer 0 tömegű, $\varepsilon = cp$ egyrészecske energiájú bozonokként kezelhető, melyekből egy módusban akárhány lehet. Ezeket a részecskéket nevezzük fotonoknak. A fotonokra nincsen részecskeszám megmaradást megkövetelő törvény, így a kémiai potenciáljuk 0, számukat csak a hőmérséklet határozza meg. A rendszer energiája:

$$E = V \int_0^\infty \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar\omega d\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}$$

Az integrálban az első tag az ω és $\omega + d\omega$ közötti módusok száma, a második tag az Bose-eloszlás az oszcillátor energiájával súlyozva. Az $x \equiv \beta\hbar\omega$ helyettesítéssel az integrálból a hőmérséklet kiemelhető, és az integrál a hőmérséklettől függetlenül elvégezhető, az eredményül adódó energiasűrűség:

$$\frac{E}{V} = \frac{8\pi}{(hc)^3} (kT)^4 \frac{\pi^4}{15} = 7,56 \cdot 10^{-16} \frac{\text{J}}{\text{K}^4 \text{m}^3} \cdot T^4$$

Ez a Stefan-Boltzmann törvény. A fotongáz nyomása:

$$p = \frac{1}{3} \frac{E}{V}$$

Ez az $\varepsilon = cp$ diszperziós reláció következménye, fermionokra is fennállna, a szabadenergia felírásával és parciális integrálással történő átalakításával könnyen belátható.

Fononok, szilárdtestfizikai alkalmazások (diszperziós reláció)

Első közelítésben a szilárd testek rezgései is szabad Bose-gázként kezelhetők. Az atomok kis rezgéseinek sajátértékproblémáját (például az atomokat rugókkal összekötött golyóknak képzelve, és lineáris közelítéssel számolva) megoldva a foton problémához hasonlóan állóhullám módusokat kapunk, fontos különbség az, hogy itt a hullámhossz nem lehet a rácsállandónál kisebb, így véges sok módust kapunk (szemben azzal, hogy a hőmérsékleti sugárzás hullámhossza tetszőlegesen kicsi lehet). Feltételezve, hogy egy módus energiája $n\hbar\omega$ lehet, ahol n egész szám, az atomok rezgéseit kvázirészecskékként lehet helettesíteni, amiket fononoknak nevezünk. A számítás a fotonokéhoz hasonló, fontos különbség, hogy az állapotsűrűség kifejezése más (bonyolultabb) és az, hogy csak véges sok módust kell összeadni.
$$E = \int_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \frac{g(\mathbf{k})\varepsilon(\mathbf{k})d^3\mathbf{k}}{e^{\beta\varepsilon(\mathbf{k})} - 1}$$

A fenti integrálban a $g(\mathbf{k})$ függvény az állapotsűrűség és $\varepsilon(\mathbf{k})$ a módus energiája. Ezek általános esetben függhetnek a \mathbf{k} hullámszámvektor irányától is.

Egy szilárd testre az $\varepsilon(\mathbf{k})$ diszperziós reláció általában valamilyen bonyolult függvény, de kis frekvenciákon általában lineáris közelítéssel lehet élni. Alacsony hőmérsékleten csak a kis energiájú módusok gerjesztődnek, így az egész spektrumot vehetjük jó közelítéssel lineárisnak, mert ahol ez már nem teljesülne, azok a módusok már nem (vagy elhanyagolhatóan keveset gerjesztődnek). A diszperziós relációnak általában több ága van, az origóból induló 3 akusztikus ág mellett létezik egy optikai ág is, amiben a 0 hullámszámhoz is véges frekvencia tartozik. A Bruillen-zóna szélénél az optikai és akusztikus ágak találkoznak. Az ehhez tartozó frekvenciára tehetünk egy becslést lineáris közelítésben, $\omega = ck$ diszperziós relációt feltételezve. A kristályrác rácsállandója $a \approx 10^{-10} \text{ m}$ nagyságrendű, a hangsebesség $c \approx 10^3 \text{ m/s}$, így a maximális frekvencia $\omega_{\max} \approx c/a \approx 10^{13} \text{ s}^{-1}$. Az ennek megfelelő hőmérséklet (a Debye-hőmérséklet): $\hbar\omega_{\max} \equiv kT_D \rightarrow T_D \approx 100 \text{ K}$

A Debye-hőmérsékletnél jóval alacsonyabb hőmérsékleten úgy tehetünk, mintha az egész spektrum lineáris lenne, és a módusokat a véges ω_{\max} helyett végtelenig számoljuk, mert az ω_{\max} körüli módusok már nem tudnak gerjesztődni, így a számolás teljesen ugyanaz lesz, mint a hőmérsékleti sugárzásnál. Vegyük még figyelembe, hogy a hanghullámoknak két transzverzális és egy longitudinális módusa is lehetséges, amiknek a terjedési sebessége

általában különbözik, ennek a kezelésére vezessük be az effektív hangsebességet: $\frac{3}{c^3} \equiv \frac{1}{c_l^3} + \frac{2}{c_{tr}^3}$ Ezzel a képletek

a hőmérsékleti sugárzáshoz hasonlóak lesznek. Az energia és a fajhő:
$$E = \frac{V\pi^2(kT)^4}{10(\hbar c)^3}$$

$$c_V = \frac{2\pi^2 k^4 V}{5(\hbar c)^3} T^3$$

A lineáris spektrumra jellemző, hogy a fajhő a hőmérséklet harmadik hatványától függ, szilárd testeknél alacsony hőmérsékleten a fajhő ezt a viselkedést mutatja. A fenti képletek csak alacsony ($T \ll T_D$) hőmérsékleten érvényesek, amíg csak azok a módusok gerjesztődnek, ahol még érvényes az itt alkalmazott közelítés.

A Debye-hőmérsékletnél jóval magasabb hőmérsékleten már az összes módus gerjesztődik, viszont az összes módusra teljesül, hogy $\varepsilon(\mathbf{k}) \ll kT$, így a $e^{\beta\varepsilon(\mathbf{k})} - 1 \approx \beta\varepsilon(\mathbf{k})$ közelítést alkalmazhatjuk, amivel az energia:

$$E = \int kT g(\mathbf{k}) d^3\mathbf{k} = 3NkT$$

Felhasználtuk, hogy az állapotsűrűség integrálja az összes módus számát adja, így az adódott eredményül, hogy elég magas (sok anyagra már szobahőmérsékletnél) hőmérsékleten teljesül az ekvipartíció, minden módusra kT energia jut, a fajhő nem függ a hőmérséklettől.

A Debye hőmérséklet közelében is elvégezhetünk egy közelítést. Tegyük fel, hogy a spektrum a maximális hullámszámig lineáris, de nem a valódi maximális hullámszámot használjuk, hanem egy olyan effektív értéket, ami biztosítja, hogy a módusok száma megfeleljen a valóságnak:

$$\int_0^{k_{\max}} \frac{3V k^2 dk}{2\pi^2} \equiv 3N$$

167/209

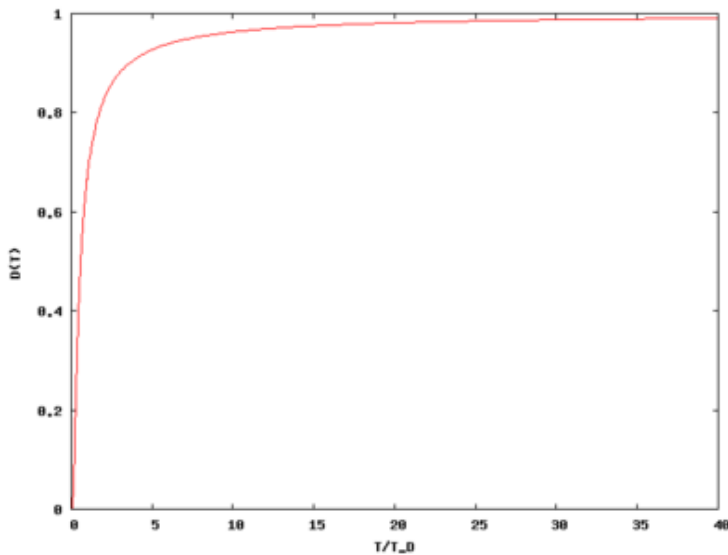
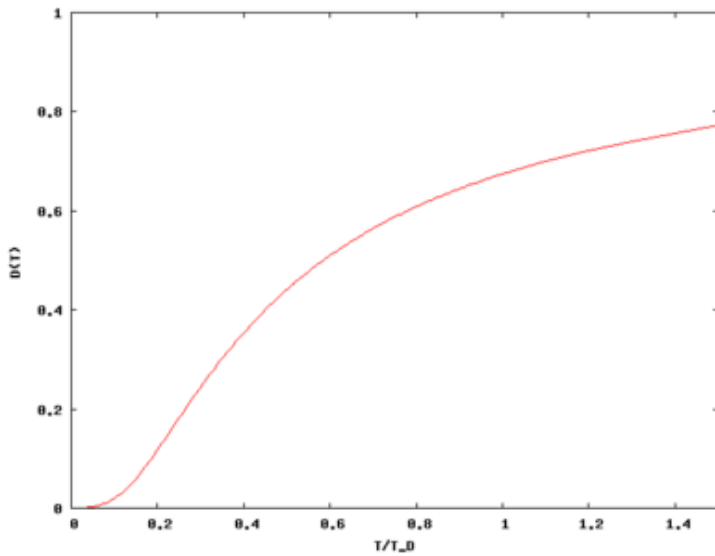
Ezzel felírva az energia:

$$E = 3NkTD \left(\frac{T_D}{T} \right)$$

Ebben a magas hőmérsékleten számolt eredmény a Debye-függvénnyel van megszorozva:

$$D(x) \equiv \frac{3}{x} \int_0^x \frac{z^3 dz}{e^z - 1}$$

A Debye-függvény alacsony hőmérsékleten a hőmérséklet köbével arányosan indul, magas hőmérsékleten viszont 1-hez tart, ez megfelel a korábban számolt két határesetnek.



Degenerált Fermi-gáz

A $T \rightarrow 0$ határesetet véve a Fermi-eloszlásfüggvény lépcsőfüggvénybe megy át: a kémiai potenciál alatti állapotok be vannak töltve, a felette levőkben nincs részecske. Így 0 hőmérsékleten az integrálok könnyen elvégezhetőek, ez az alacsony hőmérsékletű Fermi-gázokra jó közelítés lehet. A kémiai potenciált 0 hőmérsékleten Fermi-energiának is nevezik: $\varepsilon_F \equiv \mu$. A részecskeszám számítása:

$$N = (2s + 1) \frac{2\pi V (2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^{\varepsilon_F} \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon = (2s + 1) \frac{4\pi V (2m)^{3/2}}{3h^3} \varepsilon_F^{3/2}$$

167/209

168/209

Az energia hasonlóan számolható, az eredmény:

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{5} \varepsilon_F$$

Annak a feltétele, hogy ez a közelítés jó legyen felírható úgy is, hogy a hőmérséklet jóval kisebb legyen a Fermi-energiának megfelelő Fermi-hőmérsékletnél: $kT \ll \varepsilon_F$. Fémek vezetési elektronjaira a Fermi-hőmérséklet $T_F \approx 10^5 \text{K}$, így ott ez egy elég jó közelítés.

Elektronfajhő, kvantumkorrekciók. {Bethe-Sommerfeld sorfejtés, Landau-paramágnesség}

Alacsony hőmérsékletű rendszereknél alkalmazható módszer a Bethe-Sommerfeld sorfejtés, aminek a lényege az, hogy a Fermi-eloszlást tartalmazó integrált $T = 0$ körül sorbafejtjük. Legyen a kiszámítandó integrál:

$$I = \int_0^\infty g(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon$$

A fenti képletben $f(\varepsilon)$ a Fermi-eloszlás és legyen $g = G'$ (azaz a g függvény integrálja ismert, ami a 0 hőmérsékletű határesetnek felel meg. Ekkor parciálisan integrálva, majd a G függvény a kémiai potenciál körül sorbafejtve a következőt kapjuk:

$$I = - \int_0^\infty G(\varepsilon) f'(\varepsilon) d\varepsilon = G(\mu) - \sum_{k=1}^{\infty} G^{(k)}(\mu) \int_0^\infty (\varepsilon - \mu)^k f'(\varepsilon) d\varepsilon$$

Az első tag a 0 hőmérsékletű határeset, az összegzésben a páratlan tagok 0-t adnak a páros tagokban az integrál elvégezhető, az eredmény:

$$I = G(\mu) + \sum_{k=1}^{\infty} G^{(2k)}(\mu) (kT)^{2k} (2 - 2^{-2k}) \zeta(2k) \approx G(\mu) + (kT)^2 \frac{\pi^2}{6} G''(\mu)$$

Sokszor elég csak a legelső tagot megtartani, az eredeti jelölésekkel:

$$\int_0^\infty \frac{g(\varepsilon) d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1} \approx \int_0^\mu g(\varepsilon) d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 g'(\mu)$$

Ezzel például meghatározhatjuk a fémek fajhőjéhez az elektronok által adott járulékat (az elektronokat szabad Fermi-gáznak tekintve). A fémeknél a szobahőmérséklet nagyon kicsi a Fermi-hőmérséklethez képest, így elég csak az első tagot megtartani. Az a hőmérséklet négyzetétől függ, így a belőle számolt fajhőjárulék lineáris lesz. A pontos eredmény:

$$c_V = \frac{\pi^2 kT}{2 \varepsilon_F} Nk$$

Ez (mivel $kT/\varepsilon_F \approx 3 \cdot 10^{-3}$) szobahőmérsékleten a fononok fajhőjéhez képest elhanyagolhatóan kicsi, viszont a hőmérséklet függvényében változik (a fononokból származó fajhő itt már konstans), ezért ki lehet mérni. Alacsony hőmérsékleten viszont a köbösen induló fononfajhőhöz képest ez adja a nagyobb járulékot.

Záróvizsga tematika

A klasszikus mechanika alapjai | A klasszikus mechanika elméleti tárgyalása | A relativitás elmélet alapjai
| Egzaktul megoldható fizika problémák | Folytonos közegek mechanikája | Fenomenológikus termodinamika | Elektro- és magnetosztatika, áramkörök | Elektrodinamika | Hullámegyenlet és

Tételek

168/209

hullámoptika | Geometriai optika és alkalmazásai | A kvantumelmélet alapvető kísérletei | A kvantummechanika elméleti háttere | Atom- és molekulaszervezet | A magfizika alapjai | A termodinamika statisztikus alapozása | **Kvantumstatistikák** | Kölcsönható rendszerek, mágneses anyagok | Kristályos anyagok fizikája | Nemegyensúlyi folyamatok leírása | Az asztrofizika alapjai

A lap eredeti címe: „<http://mafihe.hu/~wiki/wiki/index.php/Kvantumstatistik%C3%A1k>”

- A lap utolsó módosítása: 2009. augusztus 19., 20:57

Kölcsönható rendszerek, mágneses anyagok

A TételWiki wikiből

Tartalomjegyzék

- 1 Ritka gázok állapotegyenlete
- 2 Viriál sorfejtés
- 3 Van der Waals gázok
- 4 Ising-modell
 - 4.1 Az Ising-modell megoldása 1 dimenzióban(*)
 - 4.2 Az Ising-modell átlagtérelmélete 2 dimenzióban(**)
- 5 Mágneses anyagok típusai
 - 5.1 Ferro, ferri, és antiferromágneses anyagok
 - 5.2 Domainedek
 - 5.3 Atomi paramágnesség
 - 5.4 Atomi diamágnesség
 - 5.5 Pauli szuszceptibilitás
 - 5.6 Landau diamágnesség
- 6 Hiszterézis
- 7 Curie-Weiss-törvény
- 8 Speciális anyagok
 - 8.1 Spinüveg
 - 8.2 Mágneses ellenállás
 - 8.3 Szupravezetés

Ritka gázok állapotegyenlete

Tekintsük a következő Hamilton-operátorral jellemezhető rendszert:

$$H = \sum_{i=1}^N \left[\frac{p_i^2}{2m} + \epsilon_i \right] + U(r_1, \dots, r_N)$$

Az első tag a részecskék mozgásienergiája és belső gerjesztettsége, második a kölcsönhatást jellemző potenciál. Analitikusan a következők számolhatók ki ebből:

- ritka gázok: gyenge a kölcsönhatás, és kicsi a járuléka,
- szilárd és amorf anyagok: erős a kölcsönhatás, de kicsi a hőmérséklet, ezért a részecskék a potenciál minimuma körül rezegnek.

Minket most a ritka gázok állapotegyenlete érdekel. Írjuk fel az állapotösszeget:

$$Z = \frac{1}{N!} \zeta^N \int \dots \int d^3r_1 \dots d^3r_N e^{-\beta U(\dots)}$$

ahol az impulzust kiintegráltuk:

$$\zeta = \frac{1}{h^3} \int d^3p e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} e^{-\beta f(T)} = \frac{(2\pi mkT)^{3/2}}{h^3} e^{-\beta f(T)}$$

Azonban a potenciált nem tudjuk kiintegrálni ilyen általánosan, arról valamilyen modellt kell alkotni. Feltesszük a következőket:

171/209

- A kölcsönhatás párkölcsönhatás, mégpedig úgy, hogy csak a két kölcsönható részecske távolságának abszolút értékétől függ.
- Valamilyen modell függényt tételezünk fel a párkölcsönhatásra. Ez lehet például Lenard-Jones, vagy a merev gömb: egy bizonyos r_0 közelségen belül végtelenül nagy a potenciál, azaz ennél közelebb nem kerülhetnek egymáshoz a részecskék. A mostani levezetés általános, az utolsó I integrál tartalmazza ezt expliciten.

Amit tehát ki szeretnénk számolni:

$$z_n = \int \dots \int d^3r_1 \dots d^3r_N e^{-\beta U(\dots)}$$

Tekintsük egy pillanatra az átlagos potenciális energiát itt, és a kanonikus tárgyalásban a belső energiát:

$$\bar{U} = \int \dots \int d^3r_1 \dots d^3r_N U(\dots) \frac{e^{-\beta U(\dots)}}{z_n}$$

$$\bar{E} = \sum_m E_m \frac{e^{-\beta E_m}}{z}$$

Az első egyenletben szándékosan vittük be az állapotösszeget, ugyanis az így kapott tört a koordinátakonfiguráció valószínűségét jelenti, analógiában a kanonikus modellbeli mikroállapot valószínűséggel. A kanonikus tárgyalásban azonban U -t feltudtuk írni z deriváltjaként, és az analógiát felhasználva itt is megtegyük z_n -re:

$$\bar{E} = -\partial_\beta \ln z$$

$$\bar{U} = -\partial_\beta \ln z_n$$

Ez utóbbit felintegrálva kapjuk:

$$\ln z_n = - \int_0^\beta d\beta' \bar{U}(\beta') + c$$

c -ről belátható a határokon felvett értékek alapján, hogy $N \ln V$.

Írjuk fel az átlagos potenciális energiát, mint párkölcsönhatások összegét is:

$$\bar{U} = \sum_{i < j} \bar{u}(|r_i - r_j|) = \frac{N(N-1)}{2} \bar{u} \approx \frac{N^2}{2} \bar{u}$$

Ezt szeretnénk egyenlővé tenni az előbb megfogalmazott valószínűségi integrállal, azonban annyit már elértünk, hogy a részecskék már csak a valószínűségben vannak csatolva. A továbbiakban felírjuk a nevezőt is integrál alakban, áttérünk a helykoordináták különbségére (r), mint változóra, ekkor az integrálok fele elvégezhető, ami térfogatot ad és kiesik. A maradékot felírjuk, mint β szerinti deriváltat. Ez már igen egyszerű alakú:

$$\bar{U} = -\partial_\beta \ln \int d^3r e^{-\beta U(r)}$$

Ehhez kihasználtuk azt a feltevést, hogy csak kettős ütközések vannak, a többrészecskék ütközéseket elhanyagoltuk. A továbbiakban feltesszük, hogy az r_0 , mint a részecskék méretét jellemző paraméter sokkal kisebb mint a térfogatot jellemző méretek. Az integrált exponenciális függvény szinte mindenütt 1 (mert az argumentuma 0), kivéve r_0 közelében, ezért becsempészünk nullát, mint +1 -1. Az így kapott exponenciális integrál (I) csak r_0 közelében jelentős, ezért kicsit átírva sorbafejthető. Eredményül azt kapjuk, hogy:

$$\bar{U} = -\frac{1}{V} \partial_\beta I$$

Ezt behelyettesíthetjük a párkölcsönhatások felösszegzésébe, ezután pedig az egész átlagos potenciális energiát beírjuk a kanonikus analógiából kapott $\ln z_n$ képletbe, és elvégezzük az integrált:

172/209

$$\ln z_n = N \ln V + \frac{N^2}{2V} I$$

Itt már látszik, hogy az első tag a klasszikus ideális gázhoz tartozik, a második az új, korrekciós tag. Az állapotegyenletet a $p = kT \partial_V \ln z_n$ összefüggésből számolhatjuk:

$$\frac{p}{kT} = \frac{N}{V} \left[1 - \frac{N}{2V} I \right]$$

Az eljárás tovább folytatatható, egyre több korrekció adható az ideális gáz egyenletéhez, további integrálos együtthatók jelennek meg, amelyek N/V egyre magasabb hatványaival skáláznak.

Viriál sorfejtés

A fentebb levezetett nyomásképlet általános alakban az úgynevezett viriál sorfejtés, amelyet a nyomásra vezethetünk le:

$$\frac{p}{k_B T} = \frac{N}{V} + B_2(T) \left(\frac{N}{V} \right)^2 + B_3(T) \left(\frac{N}{V} \right)^3 + \dots$$

A fenti esetben csak a kétrészecske kölcsönhatásokat vettük figyelembe, a további kölcsönhatások figyelembevétele és a megfelelő viriál-együtthatók integráljainak felírása kombinatorikai feladattá növi ki magát. Az egyes viriál együtthatók továbbá mindig függenek a hőmérséklettől is. További információ itt (http://en.wikipedia.org/wiki/Virial_coefficient#Definition%20in%20terms%20of%20graphs).

Van der Waals gázok

A fenti ritka gázokra adott levezetéshez igen hasonló módon levezethető a Van der Waals féle valós gázok modelljének állapotegyenlete. Induljunk ki ideális gázból, amelyet N darab megkülönböztethetetlen részecske alkot. Ennek a Hamiltonja:

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}$$

Az ennek megfelelő egyrészecske állapotösszeg:

$$\zeta = \frac{1}{h^3} \int d^3 p \int d^3 r e^{-\beta H} = \frac{V}{\lambda_T^3}$$

Itt elvégeztünk két integrált, a helyszerinti egyszerűen a térfogatot adta, az impulzus szerintit pedig Gauss-integrál segítségével tudtuk elvégezni. Bevezettük továbbá a termikus hullámhossz jelölését is, ami megközelítőleg a részecskék átlagos de Broglie hullámhossza adott hőmérsékleten, ideális gázban:

$$\lambda_T = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k T}}$$

A korábbiakból a teljes állapotösszeg:

$$z = \frac{\zeta^N}{N!}$$

Most továbblépünk az ideálisgázokról, és feltételezzük, hogy a részecskék között a következő párpotenciál van:

$$u(r) = \infty \quad r < d$$

173/209

$$u(r) = -\epsilon \left(\frac{d}{r}\right)^6 \quad r \geq d$$

r két részecske távolságát jelöli, d azt a távolságot ahol két részecske éppen érinti egymást. A potenciál definíciója miatt ennél közelebb nem lehetnek egymáshoz. Ezt egyben azt is jelenti, hogy a teljes térfogat nem megengedett a részecskék számára, abból le kell vonni a potenciál által tiltott részt:

$$V = V_0 - N \cdot \frac{2}{3}d^3\pi$$

Azért kellett egy további kettes faktorttal leosztani, mert különben a kizárt térfogatot duplán számoltuk volna. Továbbá bevezetjük a részecskék közötti átlagospotenciált, amit a fentiek felhasználásával egy homogén részecskesűrűségre:

$$\phi = \frac{N}{V} \int_d^\infty u(r) 4\pi r^2 dr$$

Ami a szokásos dr vastagságú gömbfelület darabok felösszegzése. Elvégezve az integrált bevezethetünk két konstans, az egyiket azonosíthatjuk is a fentebbi fajlagos kirekesztett térfogattal (b):

$$\phi = -2a \frac{N}{V} \quad a = \epsilon \frac{2}{3}d^3\pi = \epsilon b$$

A potenciálhoz szintén egy energia tartozik, amelyben az eloszlás Boltzmann-eloszlás, azért ezt is bevezetjük, azonban a túlszámlálás elkerülésére itt is bevezetünk egy $1/2$ -es faktort. A módosított térfogatot és a potenciált beírva az állapotösszegbe:

$$z = \frac{1}{N!} \frac{(V - Nb)^N}{\lambda_T^{3N}} e^{-\frac{\phi}{2}\beta}$$

Ezekután érdemes az állapotösszeg logaritmusát venni, amelyből a nyomás meghatározható, a ritkagázokhoz hasonlóan:

$$p = kT \frac{\partial \ln z}{\partial V}$$

Algebrai átalakítások után megkapjuk a Van der Waals gázok állapotegyenletét:

$$\left(p + \frac{N^2 a}{V^2}\right) (V - Nb) = NkT$$

Ising-modell

Az Ising-modell figyelembe veszi a szomszédos spinek közötti kölcsönhatást, egy (ferromágneses) rendszer energiája így:

$$E = -H \sum_i s_i - J \sum_{i,j} s_i s_j$$

A második összegzés csak azokra az i,j párokra értendő, amik elsőszomszédok. Az egyszerűség kedvéért tegyük fel, hogy csak két állapot lehetséges, tehát az atomok spinje: $s_i = \pm 1$. Az első tag a H nagyságú külső mágneses térrel vett kölcsönhatás, a második tag a szomszédos spinek közötti kölcsönhatás járuléka. Ferromágnesnél az a kedvező energiájú helyzet, ha a szomszédos spinek ugyanabba az irányba mutatnak, így a J együttható pozitív.

Természetesen a valóságban a távolabbi spinek között is lehet kölcsönhatás, az Ising-modellnek azonban jelentős előnye, hogy 1 és 2 dimenzióban egzaktul megoldható.

173/209

Az Ising-modell megoldása 1 dimenzióban(*)

Az egyszerűség kedvéért periódikus határfeltételekkel számolunk (ez nem változtatja meg jelentősen a végeredményt), így a modellt úgy lehet elképzelni, hogy a N spin egy gyűrű mentén helyezkedik el. A rendszer energiája:

$$E = -J \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} - H \sum_{i=1}^N s_i$$

A termodinamikai mennyiségek meghatározásához írjuk fel az állapotösszeget:

$$Z = \sum_{\{s_i\}} \exp \left(\beta J \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} + \beta H \sum_{i=1}^N s_i \right)$$

Az összegzés az összes elképzelhető s_i sorozatra értendő. Az exponenciálist szorzattá lehet bontani, és a szorzást a sorozatokra vett összegzéssel fel lehet cserélni:

$$Z = \prod_{i=1}^N \sum_{s_i = \pm 1} e^{\beta J s_i s_{i+1} + \beta H (s_i + s_{i+1})/2}$$

Vezessük be két spin között a következő transzfermátrixot:

$$T_{s_i s_j} = e^{\beta J s_i s_j + \beta H (s_i + s_j)/2}$$

Mivel s_i és s_j értéke is ± 1 lehet, T egy 2×2 mátrix lesz:

$$T = \begin{pmatrix} e^{\beta J + \beta H} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J - \beta H} \end{pmatrix}$$

Ekkor az állapotösszeg felírható a transzfermátrixszal:

$$Z = \prod_{i=1}^N \sum_{s_i = \pm 1} T_{s_i s_{i+1}} = \text{Sp}(T^N) = \lambda_1^N + \lambda_2^N \approx \lambda_1^N$$

Az állapotösszeg a mátrix N -edik hatványának a spurja, ami kifejezhető a λ_1 és λ_2 sajátértékek hatványával. Mivel N nagyon nagy, ezért a kisebb sajátérték hatványa elhanyagolható a nagyobbhoz képest. A transzfermátrix sajátértékei:

$$\lambda_{1,2} = e^{\beta J} \pm \sqrt{e^{2\beta J} \text{sh}^2(\beta H) + e^{-2\beta J}}$$

Ha nincs külső tér ($H = 0$), az állapotösszeg: $Z = 2^N \text{ch}^N(\beta J)$. A mágneszettség külső tér esetén:

$$M = \frac{\partial \ln Z}{\partial(\beta H)} = \frac{N e^{\beta J} \text{sh}(\beta H)}{\sqrt{e^{2\beta J} \text{sh}^2(\beta H) + e^{-2\beta J}}}$$

A korrelációs függvény:

$$c_k(r) = \langle s_k s_{k+r} \rangle = e^{-r/\xi} \text{ ahol } \xi = \frac{-1}{\ln \text{th}(\beta J)}$$

Az Ising-modell átlagtérelmélete 2 dimenzióban(**)

175/209

Az Ising-modell 2 dimenzióban is megoldható egzaktul, de ez nagyon bonyolult, ezért itt egy átlagtérelméleti közelítést mutatunk be. A z energia kifejezésében a spinváltozókhöz adjuk hozzá és vonjuk is le a várható értéküket, jelölje ezt $m \equiv \langle s_i \rangle$:

$$s_i s_j = (m + (s_i - m))(m + (s_j - m)) = m(s_i + s_j) - m^2 + (s_i - m)(s_j - m)$$

Az utolsó tag az átlagtól való eltérések szorzata, amit a továbbiakban elhanyagolunk, így nem lesz két spin szorzatát tartalmazó tagunk, a rendszer úgy kezelhető, mint egy szabad spinrendszer, amire az átlagos térnek megfelelő külső tér hat. Az energia így felírva:

$$E = \frac{1}{2} J q m^2 N - (H + J q m) \sum_i s_i$$

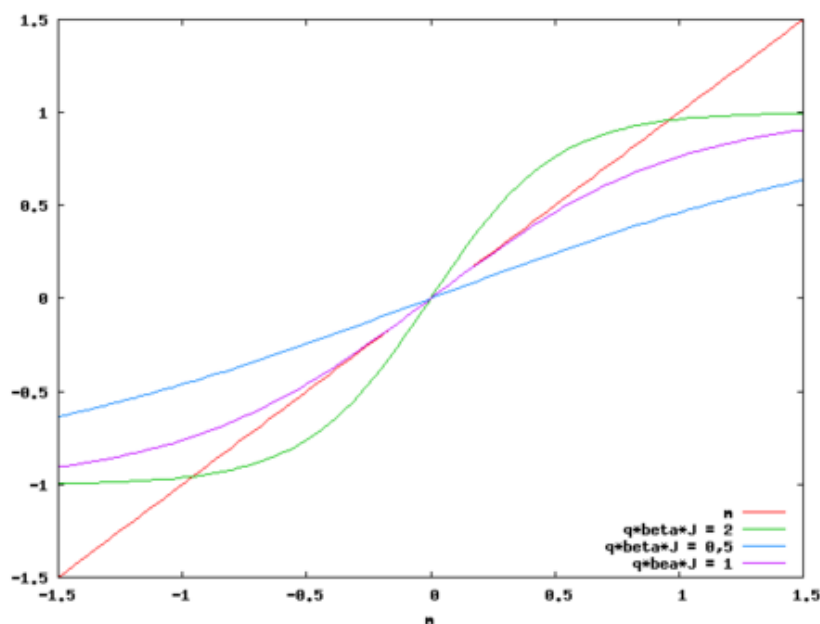
Itt q az elsőszomszédok száma, amit koordinációs számnak hívnak. Az állapotösszeg:

$$Z = e^{-\beta J q m^2 N/2} \sum_{\{s_i\}} e^{\beta(q J m + H) \sum_i s_i} = e^{-\beta J q m^2 N/2} \prod_i \sum_{s_i = \pm 1} e^{\beta(q J m + H) s_i} = e^{-\beta J q m^2 N/2} (2 \operatorname{ch}(\beta$$

Ebből kiszámítható a mágneszettség várható értéke:

$$m = \langle s_i \rangle = \operatorname{th}(\beta(q J m + H))$$

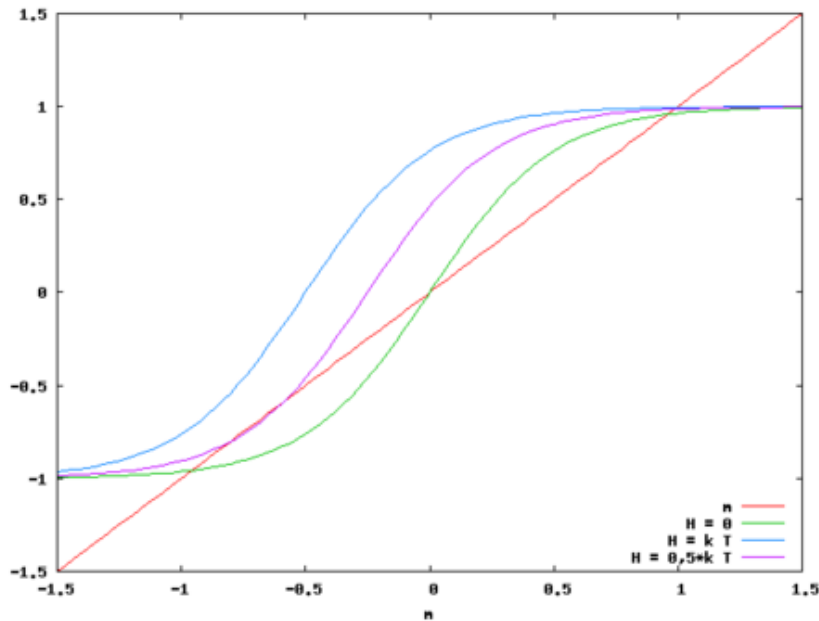
A számolás alatt végig felhasználtunk egy m paramétert, mint átlagos mágneszettséget, de ennek az értéke nem tetszőleges, hanem olyan, hogy a fenti egyenletet kielégíti. Az egyenletet érdemes grafikusán megoldani. Mindkét oldalt m függvényében ábrázolva, a baloldal egy 45° meredekségű egyenes, a jobb oldal egy tangens hiperbolikus függvény. A két görbe metszéspontjai az egyenlet megoldásai.



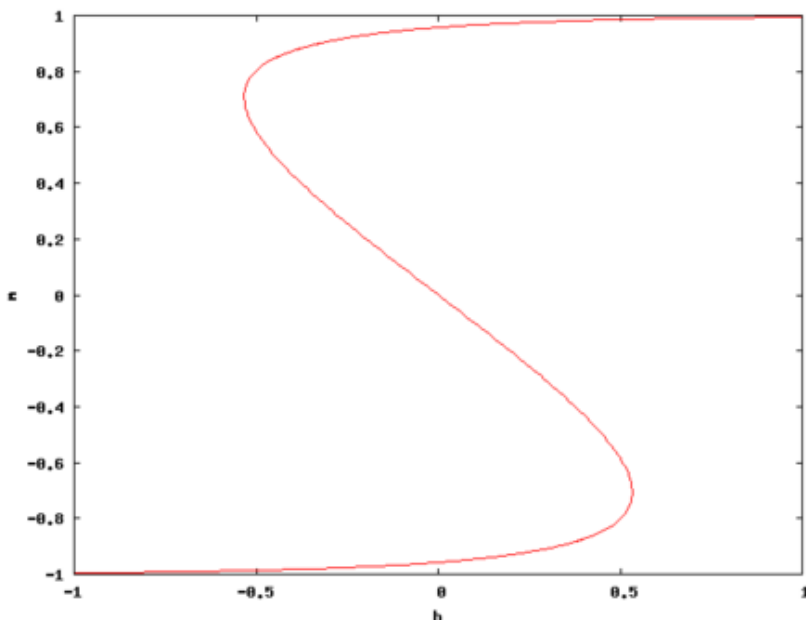
A tangensfüggvény meredeksége viszont függ a hőmérséklettől is, így egy kritikus hőmérséklet felett csak egy, alatta viszont három megoldás van. A kritikus hőmérséklet alatt az anyag viselkedése ferromágneses, felette paramágneses, a kritikus hőmérsékleten másodrendű fázisátalakulás játszódik le. Ha a külső tér 0, akkor az egyik megoldás mindig az origóban van, a másik két megoldás pedig szimmetrikusan helyezkedik el. Ha a külső tér nem 0, akkor a megoldások eltolódnak, elég nagy tér mellett már a ferromágneses fázisban is csak egy megoldás lesz.

175/209

176/209



A mágneszettséget a külső tér függvényében ábrázolva (az alábbi ábra $\beta qJ = 2$ paraméter mellett készült) S alakú görbét kapunk, egy kritikus külső tér érték felett már csak egy megoldás létezik, alatta három. A három megoldás közül azonban a középső instabil (a megoldások a szabadenergia szélsőértékeihez tartoznak, a két szélső megoldás minimum, a középső maximum), így a külső teret mondjuk egy magas értékről egyre csökkentve a mágneszettség a felső görbén marad, majd a visszafordulási pontot elérve leugrik az alsó ágra. A külső teret ismét növelve a mágneszettség az alsó ág mentén haladva növekszik, majd a felső visszafordulási pontot elérve visszaugrik a felső ágra. A mágneses teret a közbülső részben hagyva előfordulhat, hogy a rendszer a termikus fluktuációk hatására átugrik az egyik helyről a másikra. Azokat a pontokat, ahol a mágneszettség visszafordul, spinodális pontoknak nevezik. Ez a viselkedés a valódi ferromágneses anyagokban található hiszterézishez hasonló. Egy valódi anyag azonban sok doménből áll, amik kiolthatják egymás hatását, így be lehet menni vele a 0 mágneszettség környezetébe is. Természetesen ez csak egy közelítő leírás, ami csak a viselkedés jellegét adja vissza, így a ferromágneses anyagok hiszterézise a részletekben eltér ettől.



A fázisátalakulás hőmérsékletét az határozza meg, hogy ott a tangens hiperbolikus függvény meredeksége az origóban (a biztos metszéspontban) éppen 1, így még csak egy metszéspont létezik. $\beta_C = \frac{1}{qJ} T_C = \frac{qJ}{k}$

Mágneses anyagok típusai

A mágnesség tárgyalásánál előbukkantak a következő mennyiségek: Mágneses térerősség (H), mágneses indukció

176/209

177/209

vektor (\mathbf{B}), mágnesezettség (\mathbf{M}). Bevezettük a mágneses szuszceptibilitást, mint anyagi jellemzőt és arányossági tényezőt:

$$\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{H} + \mathbf{M}) = \mu_0(1 + \chi_v)\mathbf{H} = \mu\mathbf{H}$$

Azaz a mágneses szuszceptibilitás a mágnesezettség és a mágneses térerősség közötti kapcsolat. A szuszceptibilitás lehet pozitív és negatív is, azaz külső mágneses térbe helyezve az anyagot, az vagy erősíti azt, csak csökkenti (a mágnes vonzza, vagy taszítja őket). Utóbbi esetben az anyag diamágneses, az előbbi esetben több mechanizmust különböztetünk meg. A diamágnesség okozói a belső lezárt elektronhéjakon levő elektronok, amelyek a megváltozással szemben hatnak a mágneses momentumuk térrel szembe állításával.

Ferro, ferri, és antiferromágneses anyagok

Paramágnességről beszélünk, ha a vonzó, térerősítő hatás csak a külső mágneses tér jelenlétekor érezhető (ez a tér rendezi egy irányba a momentumokat, eltávolításával azok újra rendezetlenné válnak, és zárusra átlagolódnak a hatásuk). A diamágnességgel együtt gyengének tekinthetők. A ferro, ferri és antiferromágneses anyagokban a mágnesezettség forrásául szolgáló atomi momentumok eleve rendezetten állnak, a különbség csak az irányban és a méretben van. Ha az atomi rendben azonos méretű és egy irányba álló momentumok vesznek részt, akkor az anyag ferromágneses, így ez állandómágneses jelleget mutat. Ha egymással ellentétesek, és kioltják egymást, akkor antiferromágneses az anyag, ha pedig ellentétes, de különböző nagyságúak a momentumok, akkor ferrimágneses az anyag.

A szilárdtestfizika leírásokat dolgozott ki ezen jelenségek mikroszkópikus magyarázatára.

Domainek

A ferromágneses anyagoknál a domainek nagy, makroszkópikus méretű azonos beállású területek. Kialakulásuk oka egyszerűen érthető: a momentumoknak kedvező, ha azonos irányba állnak be, azonban amíg a hőmozgás rendezetlenné tudja tenni a rendszert, ez nem érvényesül. Ahogy hűtjük lefelé, egy kritikus pontnál a momentumok beállása erősebb lesz a hőmozgás karakterisztikus energiájánál, és fázisátmenet következik be, a kialakult kis azonos beállású helyek hirtelen makroszkópikus méretűvé tudnak válni, hiszen egymást állítják be a rendezetlen állapotból, ugyanakkor egy másik irányba rendeződött részt nem tudnak megfordítani. Ahol a különböző irányítottaságú részek összeérnek ott lesznek a fázishatárok, vagy domain falak az anyagban. Külső erős térrel beállítható az egész anyagban az orientáció egy irányúvá, így maximális térerősség nyerhető.

Atomi paramágnesség

Másnéven lokalizált paramágnesség. Tekintsük az összes impulzusmomentumot ($\mathbf{J} = \mathbf{L} + 2\mathbf{S}$), ekkor a mágneses momentum a következőképpen írható:

$$\boldsymbol{\mu} = -g\mu_B\mathbf{J}$$

A \mathbf{B} külső térben ez a következő energiát jelenti:

$$E = -\boldsymbol{\mu}\mathbf{B}$$

Ha feltesszük, hogy \mathbf{B} z irányú. akkor a $\mathbf{B}\mathbf{J}$ skaláris szorzatot helyettesíthetjük BJ_z szorzattal. Az energia ismeretében feltudjuk írni az állapotösszeget (Z), azonban mivel az atomok függetlenek, elég egy atom járulékát vizsgálni:

$$\zeta = \sum_{J_z=-J}^J e^{-\beta g\mu_B B J_z}$$

Itt csak J_z -ben különböznek az állapotok, ezért a kitevő többi részére bevezetjük a x változót, ekkor az összeg egy véges geometriai sorba megy át. A felösszegzésre az eredmény:

$$\zeta = \frac{\text{sh}[(J + 1/2)x]}{\text{sh}(1/2x)}$$

Az egyrészecke-állapotösszeg ismeretében felírható a szabadenergia:

$$F = -NkT \ln \zeta$$

amelyben B is paraméterként fog szerepelni és a $\frac{\partial F}{\partial B}$ fogja megadni a mágnesezettséget (pontosabban a mágnesezettség-sűrűséget). Az eredményben a bonyolult kotangens-hiperbolikusok helyett bevezettük a Brillouin-függvényt:

$$VM = Ng\mu_B J \cdot B_J(J \cdot x)$$

A Brillouin-függvény alakra hasonló az arkusz-tangenshez, de ez a pozitív oldalon 1-hez, negatív oldalon -1-hez tart. Ebből következik, hogy a maradék szorzófaktor a maximális mágnesezettséget adja meg, a függvény alakjából pedig a szaturáció jelensége adódik, ami akkor következik be, amikor az összes mágneses momentumot egy irányba állítottuk be. Kiszámolhatjuk a függvény $x \ll 1$, azaz $B \rightarrow 0$ határesetét, amelyet behelyettesítve megkaphatjuk a szuszceptibilitást:

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} = \frac{C}{T}$$

Ahol a számottevő mennyiségű konstanst a C Curie-állandóba vontuk össze. Ez a hőmérséklettel fordítottan arányos szuszceptibilitás függés a Curie-törvény.

Atomi diamágnesség

Az atomi diamágnességet szemléletesen úgy magyarázzuk, hogy a külső mágneses tér hatására a keringő elektron pályája megváltozik, és ezáltal a mágneses momentuma is. Keringjen az elektron r sugarú pályán, melynek az atommagon átmenő, térre merőleges vetületének négyzetes középértéke ρ^2 . A keringési frekvencia ω , és legyen a külső mágneses tér \mathbf{H} , ekkor a mag vonzó ereje és a Lorentz-erő tart ellent a centrifugális gyorsulással:

$$F + e\rho\omega H\mu_0 = m\rho(\omega + \Delta\omega)^2$$

A négyzetet felbontjuk és a másodrendűen kicsi tagot elhagyjuk. Itt felhasználjuk Larmor-tételét, amely azt állítja, hogy egy mágneses térben levő atom elektronjainak mozgása első rendű közelítésben olyan, mintha a tér nem is lenne jelen, csak a körfrekvenciára egy:

$$\omega_L = -\frac{eH}{2mc}$$

precesszió szuperponálódna, ezt feleltetjük meg a fenti kis körfrekvencia-megváltozásnak. A mágnesesmomentum az áram és a felület szorzata, az áramot pedig azzal a definícióval írjuk, fel hogy az áramirányra merőleges felületelemen mennyi töltés halad át egy másodperc alatt. Ezek alapján a mágneses momentum komponensei:

$$\mu_i = e \frac{\Delta\omega}{2\pi} \rho_i^2 \pi = \frac{e\Delta\omega \rho_i^2}{2}$$

A mágneses momentumhoz csak a térirányához merőleges távolságok járulnak hozzá az elektorn azonban r sugarú pályán kering, ez behoz még egy 3/2-es faktort a távolságnégyzetek között, így a valódi teljes mágneses momentum z komponense Z rendszámú atommagra:

$$\mu_z = Ze \frac{\Delta\omega}{3} \langle r^2 \rangle$$

Behelyettesítve a Larmor-frekvenciát:

179/209

$$\mu_z = -\frac{Ze^2 H}{6mc} \langle r^2 \rangle$$

Amelyből a szuszceptibilitás már leolvasható, a negatív előjel jelenti a diamágneses hatást.

Pauli szuszceptibilitás

A Pauli szuszceptibilitás a paramágnesség egy másik modellje. A modell lényege, hogy a Fermi-energia környékén lévő vezetési elektronok járulnak hozzá az elektronspin szuszceptibilitáshoz. A hőmérséklettől független, szemben a kötési elektronok paramágneses szuszceptibilitásával, amely hőmérsékletfüggő (Curie-törvény), és kb. két nagyságrenddel nagyobb, mint a Pauli-szuszeptibilitás. Ez az energiaszeintek betöltöttségi sűrűségéből számolja ki a felfelé és lefelé álló momentumok mennyiségét. A betöltöttségi sűrűságre a Bethe-Sommerfeld sereftést alkalmazza. Ezek ismeretében ugyanis a mágneszettség felírható:

$$M = \frac{1}{V} (g\mu_B) (N_{fel} - N_{le})$$

N-be a mágneses indukció is bele vna olvasztva. Eredményül a szuszceptibilitás:

$$\chi = (g\mu_B)^2 \frac{3}{2} N \frac{\mu_0}{V} \frac{1}{\epsilon_F}$$

Ahol az utolsó tényezőben a Fermi-energia szerepel.

Landau diamágnesség

A diamágnesség ezen másik modellje már kvantummechanikai megfontolásokon alapul. Az alapötlet szerint a szabad elektornok a mágneses térben körben mozognak, amei megint mágneses teret kelt, és ez gyengíti le a külső teret. Kiindulásként a szabad elektorn mágneses térbeli Hamilton-operátora szolgál:

$$H = \frac{p_x^2 + (p_y - eBx)^2 + p_z^2}{2m}$$

Azért kell kvantumosan számolni, mert klasszikusan a mágneses tér kitranszformálható, mi pedig éppen az aszerinti függést keresünk. A rendszert jellemző hullámfüggvényt felbontjuk egy y, z és egy x függő rész szorzatára, és vizsgáljuk a Schrödinger-egyenletbeli megoldást, amelyben felismerjük a harmonikus oszcillátor energiáját. Az energiát y és z szerint azonban még ki kell számolni, ezt azonban a betöltöttségi-sűrűségéből is ki tudjuk számolni. A mágneszettséget az energia tér szerinti deriváltjából határozzuk meg, ebből pedig a szuszceptibilitás kapható meg:

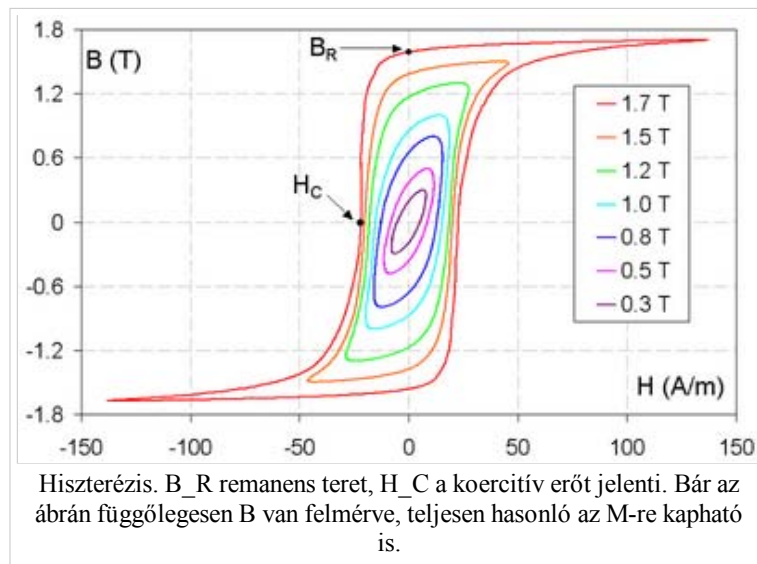
$$\chi = -\frac{1}{2} \frac{N}{V} \frac{1}{\epsilon_F} g^2 \mu_B^2 \mu_0$$

amely éppen a Pauli-szuszeptibilitás -1/3-a.

Hiszterézis

180/209

A hiszterézis a ferromágneses anyagoknak az átmágnesezéssel szemben mutatott ellenállása. Másképpen megfogalmazva, amikor áttároljuk mágnesezni az anyagot, akkor az valamennyire emlékszik korábbi állapotára, ezért adott irányú és mértékű átmágnesezés után kapott remanens (visszamaradó) mágnesség különböző lehet az anyag előzetes mágnesezettségének függvényében. Legszembetűnőbb ezt akkor láthatjuk ha teljesen átmágnesezzük az anyagot egyik, majd másik irányba. A bejárt út különbözik a **H-M**-síkon. Itt külön névvel illetjük a külső tér megűnésekor hátaahagyott mágnesezettséget (ez a remanens mágnesezettség) és az anyag terét éppen kompenzáló külső térerősséget (koercitív erő).



Curie-Weiss-törvény

A fenti memória effektust Weiss egy belső tér elmélettel próbálta megmagyarázni. Eszerint a spinek egyirányú beállása okozza a visszamaradó mágnesezettségi memóriát, amelyet úgy lehet figyelembe venni, hogy a mágnesezettség a külső téren kívül önmagának is függvénye. Ennek a függésnek a sorfejtéséből levezethető a Curie-Weiss törvény. A domaineknél említettek értelmében kihűlésnél megtörténik a "mágneses kifagyás" afelett azonban a termikus random orientáció dominál. A Curie-Weiss törvény leírja a szuszceptibilitás változását a kifagyási pont felett, a paramágneses hőmérséklet tartományban:

$$M = \frac{C}{T - T_C} H$$

Ez a formula a kifagyás felett érvényes, az átalakulási pontban divergens, ami nyilván nem releváns.

Speciális anyagok

Spinüveg

Egyes speciális anyagokat felmágnesezve azok Curie-törvényt követik, azonban ha elvesszük a külső mágneses teret egy gyors lebomlás után egy remanens mágnesezettséget mutatnak, amely azonban idővel lassan, de tovább bomlik. Ez a viselkedés egyfajta átmenetként fogható fel a ferro és paramágneses anyagok tulajdonságai között. Magyarázata részben a vegyes ferro és antiferromágneses kötések üvegszerű amorf elhelyezkedésében rejlik.

Mágneses ellenállás

Ferromágneses és nemmágneses rétegek szendvicselésével speciális vezető eszköz készíthető, amelynek ellenállása nagyban függ a külső mágneses tértől: ha külső mágneses térben van, akkor igen kicsi az ellenállása, ha azonban nincs jelen tér, akkor igen nagy ellenállást mutat. Az effektus mértéke akár több 100% is lehet. A jelenség oka, a különböző spinű elektronokkal szemben mutatott ellenállás, amely mögött az RKKY magspin és vezetési elektron hiperfinom mágneses csatolása áll.

Szupravezetés

Egyes anyagok igen alacsony hőmérsékletre hűtéskor az elektromos ellenállás egzaktul nullává válik bizonyos hőmérséklet alatt. A jelenséget elektron-elektron párok (ún. Cooper-párok) létrejöttével sikerült értelmezni, amelyek között a rácsrezgések fononjai tartanak össze. Ilyen párokból jönnek létre egy Bose-Einstein kondenzációhoz hasonló jelenség következtében, mivel az így kialakult párok már bozonként tekinthetők.

181/209

Tételek

A klasszikus mechanika alapjai | A klasszikus mechanika elméleti tárgyalása | A relativitás elmélet alapjai | Egzaktul megoldható fizika problémák | Folytonos közegek mechanikája | Fenomenologikus termodinamika | Elektro- és magnetosztatika, áramkörök | Elektrodinamika | Hullámegyenlet és hullámoptika | Geometriai optika és alkalmazásai | A kvantumelmélet alapvető kísérletei | A kvantummechanika elméleti háttere | Atom- és molekulaszervezet | A magfizika alapjai | A termodinamika statisztikus alapozása | Kvantumstatisztikák | **Kölcsönható rendszerek, mágneses anyagok** | Kristályos anyagok fizikája | Nemegyensúlyi folyamatok leírása | Az asztrofizika alapjai

A lap eredeti címe: „http://mafihe.hu/~wiki/wiki/index.php/K%C3%B6lcs%C3%B6nhat%C3%B3_rendszerek,_m%C3%A1gneses_ananyagok”

- A lap utolsó módosítása: 2009. augusztus 19., 21:01

Kristályos anyagok fizikája

A TételWiki wikiből

Tartalomjegyzék

- 1 Pontcsoportok, Bravais-rácsok, szimmetriák.
 - 1.1 Szimmetriák
 - 1.2 Bravais-rácsok
 - 1.3 Fontosabb kristályszerkezetek^[2]
 - 1.4 Bloch tétel, adiabatikus szétszétolás.
- 2 Röntgen- és elektrondiffrakció. Diffrakció, kinetikus elmélet. Ewald-szerkesztés. Bragg-feltétel.
 - 2.1 Röntgen-diffrakció
 - 2.2 Elektronok
 - 2.3 Szórás kinetikus elmélete
 - 2.4 Bragg-feltétel
- 3 Különbség az elektron- és röntgendiffrakció között
- 4 Rácsrezgések termikus hatásai.
 - 4.1 Debye-féle fajhő
 - 4.2 Hővezetés
 - 4.3 Hőtágulás

Pontcsoportok, Bravais-rácsok, szimmetriák.

Rácsvektor (\underline{R}_n): olyan vektor, mely mentén ha eltoljuk a rácsot, önmagába megy át. (ez a translációs vektor is)

Ez felbontható elemi rácsvektorok lineáris kombinációjára:

$$\underline{R}_n = n_1 \underline{a}_1 + n_2 \underline{a}_2 + n_3 \underline{a}_3$$

Az ilyen \underline{R}_n vektorral való eltolását *transzlációs műveletnek* nevezzük. Az ilyen műveletek összessége a translációs csoportot alkot.

Pontrács: pontok olyan háló szerű elrendeződése, amelyben minden kiszemelt pont környezete minden szempontból azonos akármelyik másik pont környezetével.

Kristályszerkezetet akkor kapunk, ha a rács minden pontjában azonos összetételű irányítású atomcsoportot helyezünk el.

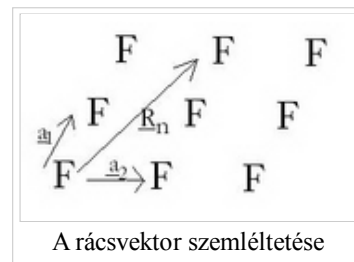
Ideális kristály: olyan test, amelynek atomjai rácsszerűen úgy helyezkednek el, hogy létezik három ($\underline{a}_1, \underline{a}_2, \underline{a}_3$) vektor, hogy az atomi elrendeződés minden pontból ugyanolyannak látszik.

Elemi cella: elemi rácsvektorok által kifeszített paralelepipedon. $\underline{a}_1 (\underline{a}_2 \times \underline{a}_3)$ Az elemi cella *primitív*, ha csak a csúcaiban tartalmaz rácspontot. Wigner-Seitz cella: Azon pontok halmaza, melyek közelebb vannak egy adott rácsponthoz, mint bármely másikhoz. (Ha a kristálynak van valamilyen szimmetriája, akkor ez a WS-cellának is megvan, míg az elemi cellának nincs!)

Reciprok rács: $\underline{K}(h_1, h_2, h_3) = h_1 \underline{b}_1 + h_2 \underline{b}_2 + h_3 \underline{b}_3$, ahol $\underline{b}_1 = 2\pi \frac{\underline{a}_2 \times \underline{a}_3}{(\underline{a}_1 \times \underline{a}_2) \cdot \underline{a}_3}$

Szimmetriák

1. **Transzláció**: létezik az \underline{R}_n translációs vektor

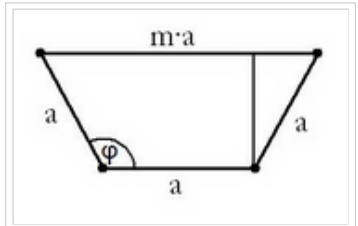


2. *Forgatás*: (inverz forgatás is megengedett)

Ha egy kiszemelt tengely körüli $\frac{2\pi}{n}$ szögű forgatás egy testet önmagába visz át, akkor az ilyen tengelyt *n-fogású* forgástengelynek nevezik:

$$ma = a + 2a \sin\left(\varphi - \frac{\pi}{2}\right)m = 1 - 2 \cos \varphi \cos \varphi = \frac{1 - m}{2}$$

$$\varphi = \arccos\left(\frac{1 - m}{2}\right)$$



A forgatás szemléltetése. Az alap (alsó) szakaszt forgatjuk el φ szöggel a bal csúcs körül. Ebből kapjuk a trapéz egyik oldalát. Ha megengedett az inverz forgatás, akkor megkapjuk a másik oldalt is. Ekkor a két új pont távolsága (a trapéz felső éle) kifejezhető a szöggel, lásd a táblázatban.

m	-1	0	1	2	3
φ	$0\pi, 2\pi$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{2}$	$\frac{2\pi}{3}$	π
n	1	6	4	3	2

(kvázi kristályoknál - ahol nincs periodikus szerk. - lehet 5 fogású)

3. *Inverzió*: (tükrözés) $r = -r$

4. *Csúszósík*: összetett szimmetria művelet \rightarrow tükrözés, majd a tengely irányába való eltolás (az eltolás a fele a tengely irányába eső ismétlődési hosszának).

5. *Csavartengely*: összetett szimmetria művelet \rightarrow forgatás, majd a tengely irányába való eltolás.

1-5-ig az elemi szimmetriaműveletek matematikai csoportot alkotnak, mivel ezek egymásutáni elvégzése is szimmetriaművelet (csoport szorzás művelete). A pontcsoportok a teljes ortogonális $O(3)$ csoport diszkrét alcsoportjai, és 1-5 műveletek tetszőleges kombinációból állnak.

Bravais-rácsok

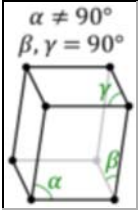
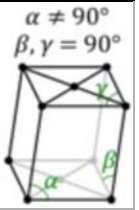
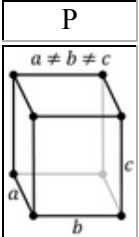
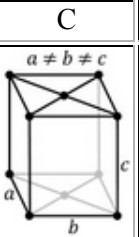
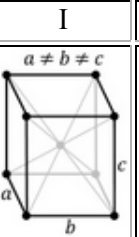
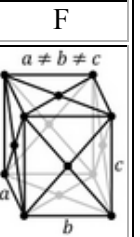
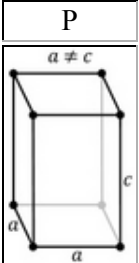
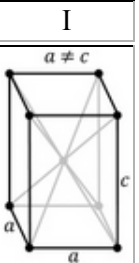
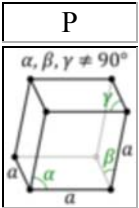
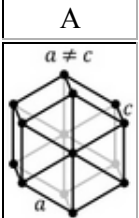
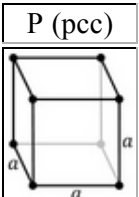
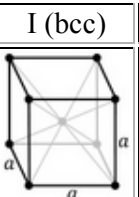
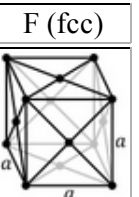
230 tércsoport és 32 pontcsoport (7 osztályba sorolva) létezik 3D-ben, 10 pontcsoport 2D-ben

14 Bravais rács létezik 3D-ben, 7 Bravais rács létezik 2D-ben

A jelölések^[1]:

- Primitív elrendezés (P): rácspontos a cellák csúcsaiban
- Tércentrált elrendezés (I): +1 rácspont a cella közepén
- Lapcentrált elrendezés (F): minden oldallap közepén +1 rácspont
- Egy oldalpáron lapcentrált (A,B vagy C): csak két (szemközti) oldal közepén van +1-1 rácspont

A 7 kristályszimmetria	A 14 Bravais rács	
Triklin	P	
	$\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$ 	
Monoklin	P	C

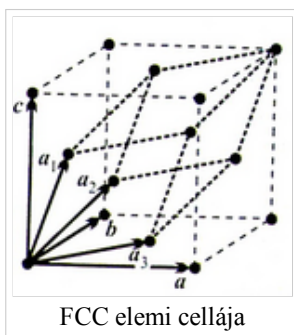
	$\alpha \neq 90^\circ$ $\beta, \gamma = 90^\circ$ 	$\alpha \neq 90^\circ$ $\beta, \gamma = 90^\circ$ 		
Ortorombos	P	C	I	F
	$a \neq b \neq c$ 	$a \neq b \neq c$ 	$a \neq b \neq c$ 	$a \neq b \neq c$ 
Tetragonális	P	I		
	$a \neq c$ 	$a \neq c$ 		
Trigonális	P			
	$\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$ 			
Hexagonális	A			
	$a \neq c$ 			
Köbös	P (psc)	I (bcc)	F (fcc)	
				

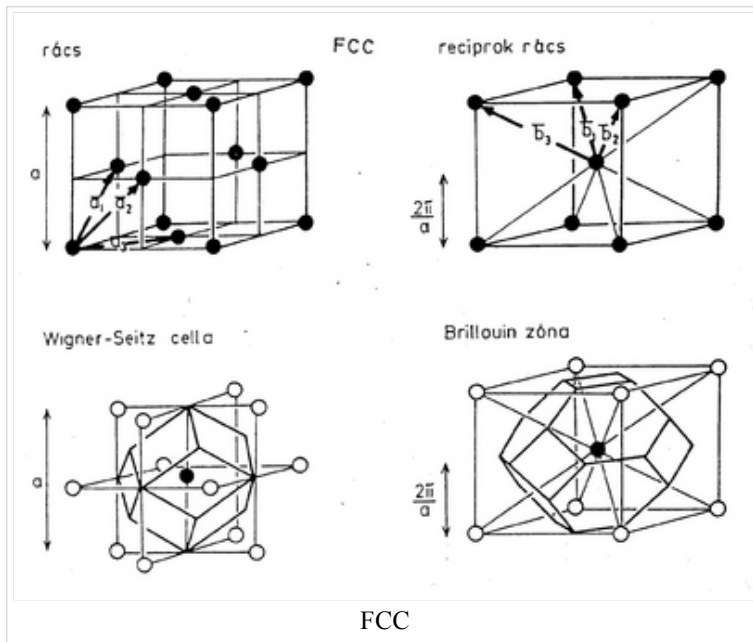
Fontosabb kristályszerkezetek^[2]

1. Egyszerű köbös (SC): Po

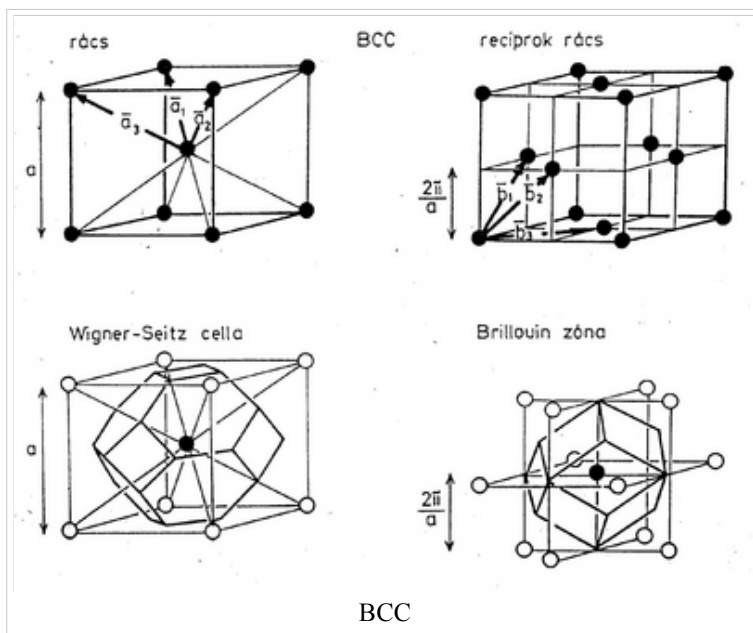
A WS cellája is kocka.

2. Lapcentrált köbös (FCC): Cu, Al, Au, Ag, Ni, Pt ((Ez a legsűrűbb rács))



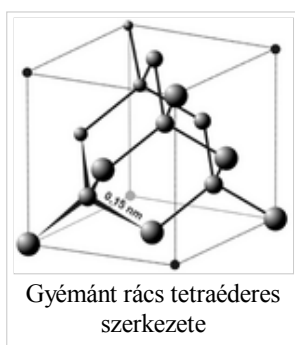


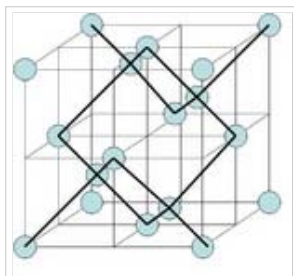
3. Tércentrált köbös (BCC): Fe, W, Mo



4. Gyémánt rács: C_{gy} , Si, Ge

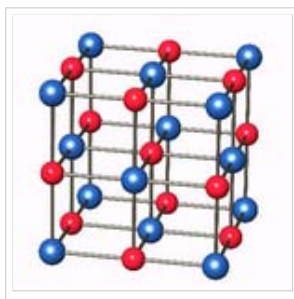
FCC rács az alapja (és minden második nyolcad kockában van atom).





Gyémánt rács FCC rácsból

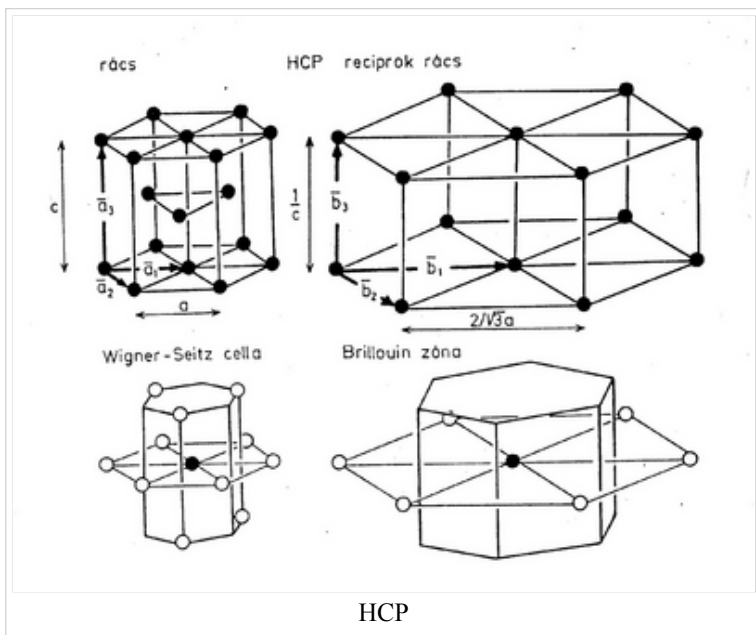
5. NaCl szerkezet: (két egymásba tolt FCC)



Sókristály rácserkezetel

6. Hexagonális (szoros illeszkedésű szerkezet): Zn, Nb

4 atom tetraédert alkot. Ha szabályos ez a tetraéder, akkor teljesen szoros az illeszkedés.



Bloch tétel, adiabatikus szétcsatolás.

Adiabatikus szétcsatolás ötlete Born és Oppenheimer nyomán alakult ki, akik rámutattak, hogy az elektronokra jellemző sebesség szilárd anyagokban, a Fermi-sebesség ($\approx 10^6 m/s$) lényegesen nagyobb, mint a közegbeli hangsebesség ($\approx 10^3 m/s$), ami az ionok jellemző sebessége. A következtetés tehát az, hogy az ionok szemszögéből az elektronok követhetetlenül gyorsan mozognak, az elektronok pedig úgy érzik, mintha az ionok helyben állnának. Ez igen jelentős egyszerűsítéseket tesz lehetővé, amelyeket a nem csak a szilárdtestfizika de a molekulafizika is gyakran alkalmazni tud.

$$\text{Ionok: } \underline{R}_I; \quad \underline{P}_I = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \underline{R}_I}$$

$$\text{A Hamilton-fv: } \mathcal{H} = - \sum_I \frac{\hbar^2}{2M_I} \frac{\partial^2}{\partial \underline{R}_I^2} + V_I(\underline{R}_I)$$

Azaz az ionokra csak a saját mozgásukat írtuk fel a saját potenciáljukban, ebben a közelítésben az elektronok hatását elhanyagoljuk.

$$\text{Elektronok: } \underline{r}_i; \quad \underline{p}_i = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \underline{r}_i}$$

$$\text{A Hamilton-fv: } \mathcal{H} = - \sum_i \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial \underline{r}_i^2} + v_e(\underline{r}_i) + v_{ei}(\underline{R}_I, \underline{r}_i)$$

Ekkor az elektronokra szintén a saját mozgásuk és az önmaguk által keltett potenciáljuk hat, az ionok hatását egy külön kölcsönhatási potenciálban csatoljuk csak hozzájuk. Ez a két Hamilton függvény adja együtt a rendszer Hamilton-függvényét.

Az egyensúlyi megoldás érdekében írjuk fel a sajátértékegyenletet:

$$\mathcal{H}\psi = E\psi$$

A megoldást pedig keressük szorzatfüggvény alakban:

$$\left[- \sum_I \frac{\hbar^2}{2M_I} \frac{\partial^2}{\partial \underline{R}_I^2} + V_I \phi \right] \varphi + \left[- \sum_I \frac{\hbar^2}{2M_I} \left(2 \frac{\partial \phi}{\partial \underline{R}_I} \frac{\partial \varphi}{\partial \underline{R}_I} + \phi \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \underline{R}_I^2} \right) \right] + \left[- \sum_i \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial \underline{r}_i^2} + v_e \varphi + v_{ei} \right]$$

Az első tag tehát az ionok terében az elektronok problémája (rácsprobléma), a második az elektronok-fononok kölcsönhatási problémájára vezet (Fonon: kvázirészecske, szilárd testek rezgési átmeneteinek energiakvantumai^[3]). A harmadik tag az elektron probléma. Most csak a rácsproblémát, azaz az első tagot tárgyaljuk. Írjuk fel (sok) elektronra a rácsproblémát, álló ionok terében:

$$\mathcal{H}\varphi = E\varphi$$

$$1 \text{ elektronra: } \mathcal{H} = - \frac{\hbar^2 \Delta}{2m_e} + V(\underline{r})$$

$$\text{Sok elektronra: } \mathcal{H} = - \sum_i \frac{\hbar^2 \Delta_i}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \underline{R}_I^2} + \sum_i V(\underline{r}_i) + \sum_{i < j} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\underline{r}_i - \underline{r}_j|}$$

Itt az első tag a kinetikus energia, második az ionok által keltett fix külső potenciál, a harmadik tag az elektronok saját Coulomb-potenciálja. \mathcal{H} -nak invariánsnak kell lennie a rácsperiódusú eltolásra:

$$\mathcal{H}(\underline{r} + \underline{R}_n) = \mathcal{H}(\underline{r})$$

Ez akkor teljesül, ha:

$$\varphi(\underline{r} + \underline{R}_n) = e^{ik\underline{R}_n} \varphi(\underline{r})$$

Ez a Bloch-tétel, ami pedig végeredményül kijött, azt Bloch-függvénynek nevezzük.

A fentiek csak degenerált esetben érvényesek. Nem degenerált esetben az eltolásnál gond van a skalárszorzással, így más (főtengelely transzformáció) módszert kell alkalmaznunk, de így is megkapjuk végeredményül a Bloch-függvényt.

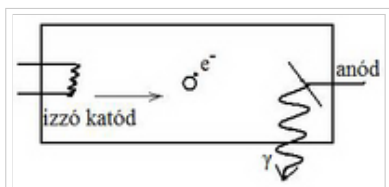
Röntgen- és elektrondiffrakció. Diffrakció, kinetikus elmélet. Ewald-szerkesztés. Bragg-feltétel.

Röntgen-diffrakció

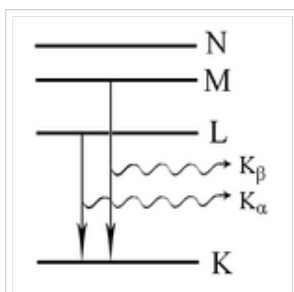
(a) Röntgenső

Karakterisztikus és fékezési sugárzás; Sok fékezési sugárzás, kicsi az energia.

$$eU = \hbar\omega = \hbar ck = \frac{\hbar c}{\lambda}$$



Röntgen cső vázlata



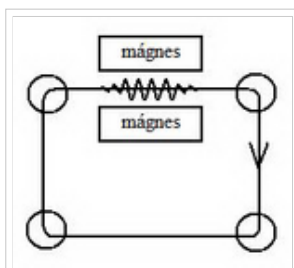
Röntgen-sugárzás esetén a tipikus átmenetek az energianívók közt

(b) Szinkrotronsugárzás

Az elektronokat fölgyorsítjuk, majd „megrázzuk” (csak fékezési sugárzás lesz)

Előnye a röntgensőhöz képest, hogy monokróm és nagy intenzitás, de nagy a mérete és drága.

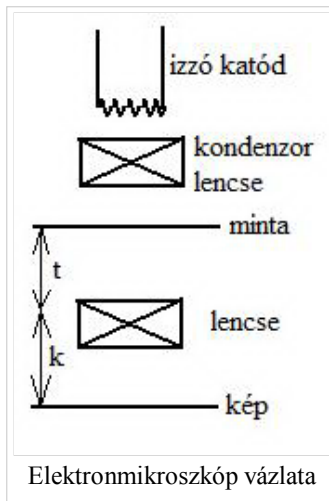
Észlelés: fotólemez, számlálóső, CCD, Imaging Plate



Gyorsító vázlata

Elektronok

Elektronokkal is lehet diffrakciót létre hozni, és ezt vizsgálni (hasonló eljárásokkal, mint a röntgen-diffrakciót), viszont pontosabb és célravezetőbb, ha *elektronmikroszkópot* használunk anyagvizsgálatra:



$$eU = \frac{p^2}{2m}; \quad p = \frac{h}{\lambda}$$

Leképezés: $\frac{1}{k} + \frac{1}{t} = \frac{1}{f}$, ha $k=f$, akkor diffrakció van.

Röntgenhez képest hátrány:

- A lencserendszer miatt numerikus apertúra: $10^{-4} - 10^{-5}$ (ami elég rossz)
- bonyolult mintapreparáció
- feltöltődik a nemfém minta, elektron erősen kölcsönhat az atommal (erős rugalmas és rugalmatlan szórás)
- nem elég pontos pl. rácsparaméterek mérésére

Előny:

- sokmindent látni vele
- szűkíthető látótér
- korlátozott területű diffrakció valósítható meg

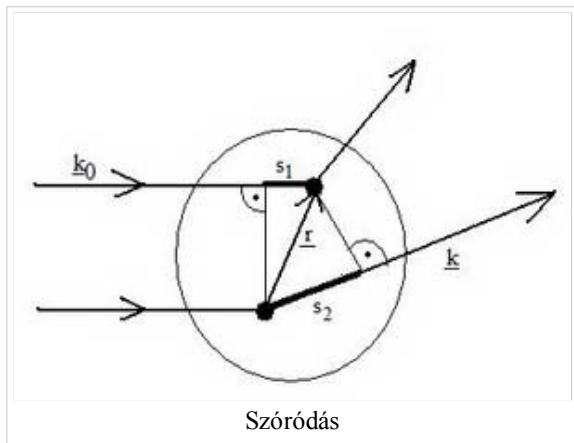
Szórás kinetikus elmélete

Röntgen sugárzás esetén \rightarrow Thomson-szórás

- (1) Rugalmas szórás: λ változatlan, $E_{ki} = E_{be}$
- (2) Koherens
- (3) Gyenge szórás: egyenes szórások...

Fraunhofer interferencia:

A bemenő-kimenő hullámszám = $\rho(\mathbf{r})$: ha nagy, nagy a szóródás; ha kicsi, kicsi a szóródás az adott pontban. (Röntgennél elektron-sűrűség, el.-mikroszkópnál el.- pot. sűrűség, neutronnál magsűrűség). A fáziskülönbség:



$$\underline{k}_0 r = |\underline{k}_0| s_1 = \frac{2\pi}{\lambda} s_1 \quad ; \quad \Delta s = s_1 - s_2$$

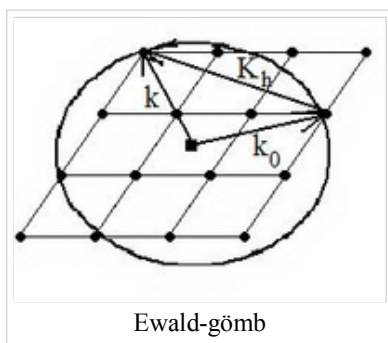
$$\underline{k} r = |\underline{k}| s_2 = \frac{2\pi}{\lambda} s_2 \quad ; \quad \Delta\varphi = \frac{2\pi}{\lambda} (s_1 - s_2)$$

$$\Delta\varphi = (\underline{k}_0 - \underline{k}) r \longrightarrow A(\underline{k}) \simeq \int \rho(\underline{r}) e^{i(\underline{k}_0 - \underline{k})r} d^3 r$$

A(k) a szóródás, nem tudjuk mérni. A fenti integrál a sűrűségfv Fourier-transzformáltja.

Intenzitás: $I(\underline{k}) = |A(\underline{k})|^2$

Bevezetjük az **Ewald-szerkesztést**: reciprokrácson berajzoljuk a beeső nyaláb k vektorát, majd húzunk a k vektor kezdőpontjából egy |k| sugarú gömböt, ez az *Ewald-gömb*.



Jelölés: \underline{R}_n - rácsvektor; \underline{K}_n - reciprokrácsvektor

Míndezt felhasználva, a kristályos anyag elhajlási képe:

$$A(\underline{k}) = \int \rho(\underline{r}) e^{i(\underline{k}_0 - \underline{k})r} d^3 r \quad ; \quad \rho(\underline{r}) = \rho(\underline{r} + \underline{R}_n) = \rho(\underline{r}')$$

A fentiekből:

$$A(\underline{k}) = \int \rho(\underline{r}') e^{i(\underline{k}_0 - \underline{k})(\underline{r}' - \underline{R}_n)} d^3 r = e^{i(\underline{k}_0 - \underline{k})\underline{R}_n} \int \rho(\underline{r}') e^{i(\underline{k}_0 - \underline{k})r'} d^3 r = A(\underline{k}) \cdot e^{i(\underline{k}_0 - \underline{k})\underline{R}_n}$$

Tehát: $A(\underline{k}) \left(1 - e^{i(\underline{k}_0 - \underline{k})\underline{R}_n} \right) = 0$

Azt szeretnénk, hogy A(k) ne legyen 0 (mivel azt keressük). Így a másik tagnak kell 0-nak lennie. Ezekből adódnak a következő tulajdonságok:

$$-(\underline{k}_0 - \underline{k}) \underline{R}_n = 2\pi k; \quad (k \in \mathbb{Z})$$

191/209

$$-(\underline{k}_0 - \underline{k}) = \underline{K}_n$$

- $A(\underline{K}_n) \neq 0 \longrightarrow$ elhajlási irány

- $A(\underline{K}_n) = 0 \longrightarrow$ kioltás

- $A(nem \underline{K}_n) = 0 \longrightarrow$ teljesülnie kell, különben nincs interferencia

Bragg-feltétel

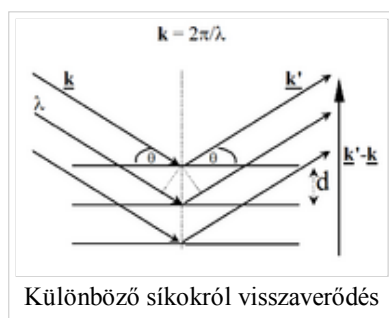
Az Ewald-szerkeztésből tudjuk, hogy $(\underline{k}_0 - \underline{k}) = \underline{K}_n$

Továbbá tudjuk, hogy $\angle(\underline{k}_0, \underline{k}) = 2\vartheta$

Tehát: $\underline{K}_n = 2|\underline{k}_0| \sin \vartheta$

Az ábra alapján pedig látható, hogy: $2 \frac{2\pi}{\lambda} \sin \vartheta = \frac{2\pi}{d} n$

Amelyből átrendezéssel kapható a *Bragg-feltétel*: $2d \sin \vartheta = n\lambda \longrightarrow$ erősítés csak ebben az esetben lesz!



Különbség az elektron- és röntgendiffrakció között

A mai korszerű mikroszkópokban az elektronok energiája kb. 300keV, az elektronok hullámhossza $2.2 \cdot 10^{-3} nm$, ami nagyságrendekkel kisebb, mint a szokásos röntgenhullámhosszak. Ennek az a következménye, hogy a reciproktérben az Ewald-gömb sugara jóval nagyobb, így a Bragg-szög kicsi. A reciprokrács helyén az Ewald-gömb síknak tekinthető, ezért az elektrondiffrakciós felvételeken mindig a reciprokrács egy síkmetszetét láthatjuk, ellentétben a röntgendiffrakcióval, ahol a diffrakció képen köröket, illetve körszeleteket látunk. Azt, hogy tényleg több pont legyen diffrakciós helyzetben, az elektrondiffrakció esetében az biztosítja, hogy a minta vékony, ezért a rácspontok Fourier-térbeli képe kiszélesedik (végtelen rácsnál lenne az pontszerű). Ez a kiszélesedés a röntgendiffrakciónál nem jelentős. Ott a Bragg-feltétel kielégítéséhez több módszer lehetséges. Pl. porszerű mintát használnak így a diffrakciós képen két kör metszéspontja lesz (hiszen a kristályok minden irányba orientáltak, így a reciprokrács is "velük forog"), vagy nem monokromatikus forrást használnak (Laue-elrendezés), hanem folytonos spektrumút, így a különböző hullámhosszak különböző rácsvektorokat hoznak diffrakciós helyzetbe.

Rácsrezgések termikus hatásai.

Debye-féle fajhő

A rács termikus rezgéseit alacsony hőmérsékleten az Einstein-modell nem írja le elég jól, hiszen ez a modell minden atomot független oszcillátornak tekint. (Ezen számítások alapján az összenergia $\exp 0$ -hoz kellene, hogy tartson)

Másik megközelítésben a rács normálrezgéseit a \underline{k} hullámszám-vektorral komponenseivel írjuk le. Minden részecskéhez hozzárendelhető egy ilyen vektor, és minden értékhez tartozik 3 módus (melyeknek más a polarizációs irányuk és ortogonálisak). Tehát egy N részecskéből álló rendszerben $3N$ rezgési módus van

191/209

192/209

(leszámítva a test mozgásából adódó 6 szabadsági fokot), melyeknek energiái kvantáltak ($E_k = n_k \hbar \omega_k$).

Foton: az elektromágneses sugárzási tér energiakvantuma.

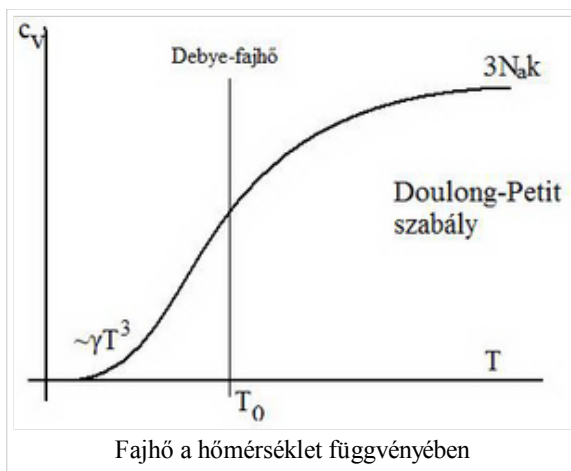
Fonon: a kvantált rugalmas hullám vagy rácsrezgés energiakvantuma (a fotonhoz hasonlóan definiálva).

Debye-közelítésben ω_k és k között a kapcsolatot nem a dinamikai összefüggésekből határozzuk meg, hanem a makroszkópikus kristály mozgásegyenletéből.

A belső energia várható értéke a következőképp adható meg: $\left(\beta = \frac{1}{kT}\right)$

$$\langle E \rangle = E_0 + \sum_i \frac{\hbar \omega_i}{e^{\beta \hbar \omega_i} - 1} = E_0 + \int \frac{\hbar \omega}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} D(\omega) d\omega$$

$\hbar \omega_D = kT_D$, ahol T_D a Debye-hőmérséklet.



Hővezetés

A hővezetőképesség definíció szerint:

$$Q = \kappa \frac{\partial T}{\partial x}, \text{ ahol}$$

Q - a termikus energiaáram

κ - a hővezetőképességi együttható

$\frac{\partial T}{\partial x}$ - a hőmérsékletgradiens

Tehát a termikus energia terjedése sztochasztikus folyamat és diffundálva terjed.

A kinetikus-gázelmélet alapján:

$$\kappa = \frac{1}{3} C u \Lambda, \text{ ahol}$$

C - az egységnyi térfogatra eső fajhő

u - a részecske átlagsebessége

Λ - részecske szabad úthossza (két ütközés között)

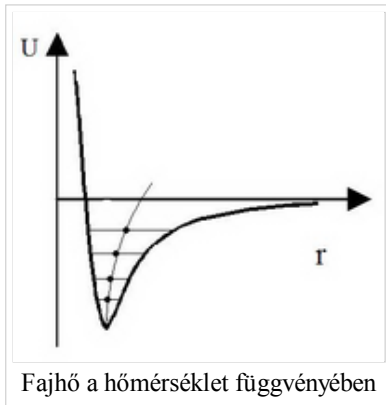
Debye ezt az összefüggést szilárd dielektrikumokra alkalmazta. Ekkor C a rácsrezgésekből (fononokból) adódó fajhő, u a hang terjedési sebessége és Λ a fononok szabad úthossza.

(ρ a vákuum rövid távon rossz, hosszútávon jó hővezető)

Hőtágulás

A hőtágulást a (potenciális energiában szereplő) nem lineáris tagok hozzák létre. (Pl: A kvarc erősen lineáris anyag – kevésbé hőtágul)

Az ábráról jól látható: ahogy nő a hőmérséklet, jobban rezegnek a részecskék, megnő az energia és így eltolódik a középpont, tehát távolabb kerülnek egymástól a részecskék. Ez a hőtágulás.



- ↑ Wikipédiáról: http://en.wikipedia.org/wiki/Bravais_lattice
- ↑ Képforrások: Kojnok József - Kondenzált anyagok fizikája gyakorlat föliáiból (http://szft.elte.hu/~kojnok/szilfiz/szilfiz_gy.htm)
- ↑ Fonon: <http://hu.wikipedia.org/wiki/Fonon>

Záróvizsga tematika

A klasszikus mechanika alapjai | A klasszikus mechanika elméleti tárgyalása | A relativitás elmélet alapjai | Egzaktnak megoldható fizika problémák | Folytonos közegek mechanikája | Fenomenológikus termodinamika | Elektro- és magnetosztatika, áramkörök | Elektrodinamika | Hullámegyenlet és hullámoptika | Geometriai optika és alkalmazásai | A kvantumelmélet alapvető kísérletei | A kvantummechanika elméleti háttere | Atom- és molekulaszervezet | A magfizika alapjai | A termodinamika statisztikus alapozása | Kvantumstatisztikák | Kölcsönható rendszerek, mágneses anyagok | **Kristályos anyagok fizikája** | Nemegegyensúlyi folyamatok leírása | Az asztrofizika alapjai

Tételek

A lap eredeti címe: „http://mafihe.hu/~wiki/wiki/index.php/Krist%C3%A1lyos_anyagok_fizik%C3%A1ja”

- A lap utolsó módosítása: 2009. augusztus 19., 21:04

Nemegyensúlyi folyamatok leírása

A TételWiki wikiből

Tartalomjegyzék

- 1 Irreverzibilis folyamatok
- 2 Master egyenlet, részletes egyensúly.
- 3 Entrópia és szabadenergia
 - 3.1 Irreverzibilis folyamatok
- 4 Ingadozási jelenségek
 - 4.1 Brown-mozgás, Diffúzió, Brown-mozgás potenciálban
 - 4.2 Langevin-egyenlet
- 5 Vezetési jelenségek
 - 5.1 Drude modell
 - 5.2 Kereszteffektusok

Irreverzibilis folyamatok

Az entrópia megváltozásának teljes egyenlete:

$$dS = \frac{\delta Q}{T} + dS_{Spontan} + \frac{\delta W_{irr}}{T}, \text{ ahol}$$

δQ a hőváltozás, $dS_{Spontan}$ a spontán entrópiaváltozás (mindig nagyobb 0-nál), δW_{irr} az irreverzibilis folyamat alatt végezt munká, T a hőmérséklet.

Pl.: Ha veszünk egy zárt rendszert (két kamra: egyikben gáz, másikban vákuum) és elvesszük a falat, akkor a gáz kitölti a másik térrészt is. Ekkor: $Q=0$, $W=0$, $\Delta S > 0!!$

A lényeg, hogy a rendszer önmagával legyen egyensúlyban. A fenti egy spontán irreverzibilis folyamat (kvázisztatikus rendszer folyamat). Egy ilyen során az entrópia keletkezik. Tehát az entrópia nem marad meg, de csak keletkezni "szeret".

További példás spontán S termelődésre (ha zárt rsz. nincs egyensúlyban, akkor S nőni fog):

Pl. Gay-Lussac: vákuummal szembeni tágulás: $\Omega(E, V, N) \rightarrow V \text{ nő} \Rightarrow \Omega \text{ nő} \Rightarrow S \text{ nő} \dots$

Pl2. Eltérő hőmérsékletű tarályok: $E_{össz} = E_1 + E_2 \Rightarrow \Omega(E_1) = \Omega_1(E_1)\Omega_2(E_{össz} - E_1)$ ekkor Ω eléri a max értéket és S spontán nőni fog...

Master egyenlet, részletes egyensúly.

megjegyzés: a jobb olvashatóság érdekében az ábrán szereplő: $n'=m$

Van egy rendszerünk, aminek van n diszkrét állapota, amik között ugrál.

- $p_n(t)$: - annak a valószínűsége, hogy a rendszer az n -edik állapotban van.
- Tegyük fel, hogy tudom, hogy egységnyi idő alatt mi annak a valószínűsége, hogy a rendszer **n -ből m állapotba megy át.**

195/209

Ennek jelölése: w_{mn} . Nem tudunk róla semmit, de tegyük fel, hogy ismerjük az értékét.

- Tegyük fel, hogy az átmenetek folyamata Markov-folyamat, tehát létezik olyan Δt , hogy már csak a t mondja meg, hogy mi történik $t + \Delta t$ -ben. (És tegyük fel, hogy az átmenetek megvalósulnak.)

Ekkor:

$$p_n(t + \Delta t) = p_n(t) - \sum_m w_{mn} \Delta t p_n(t) + \sum_m w_{nm} \Delta t p_m(t)$$

Azt szeretnénk megtudni, mekkora valószínűséggel lesz a rendszerünk az n . állapotban $t + \Delta t$ időpillanatban. Ez szerepel az egyenlet bal oldalán.

A jobboldalon a következő tagok állnak:

- 1. tag: Annak valószínűsége, hogy már t időpillanatban is az n . állapotban volt a rendszer (ezt ismertnek tekintjük)
- 2. tag: Annak valószínűsége, hogy t időpillanatban az n . állapotban volt, és Δt idő múlva ellépett onnan (ezért levonjuk)
- 3. tag: Annak valószínűsége, hogy t időpillanatban az másik állapotban volt, de Δt idő múlva az n . állapotba került.

(w_{mn} és w_{nm} egységnyi időre vonatkozik)

Sorbafejtek Δt körül, így $p_n(t + \Delta t) = p_n(t) + \frac{\partial p_n}{\partial t} \Delta t$

Ezt felhasználva $p_n(t)$ kiesik, majd Δt -vel egyszerűsíthetünk. Ami marad::

$\frac{\partial p_n}{\partial t} = - \sum_m w_{mn} p_n(t) + \sum_m w_{nm} p_m(t)$	A <u>Master-egyenlet</u> diszkrét állapotterben
---	---

Ennek kell, hogy legyen stacionárius megoldása, amihez relaxál: ($p_n^{(e)}$ - egyensúlyi valószínűség)

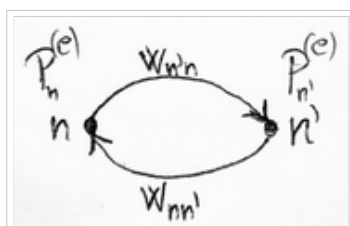
$$p_n^{(e)} = \frac{1}{z} e^{-\beta E_n}, \text{ ahol } E_n \text{ az } n\text{-edik állapot energiája.}$$

Ha ezt helyettesítem be, akkor a bal oldal 0 lesz.

- Tegyük fel, hogy meg tudom úgy adni az átmeneti valószínűségeket, hogy a rendszer beugorjon az egyensúlyi állapotba.
- Hogyan kell megválasztani az átmeneti valószínűségeket?

Az átmeneti valószínűségek megválasztása

- Egyensúlyban időtükrözési szimmetria van.



A rendszer két állapota közötti átmeneti valószínűségek "kimérése"

195/209

Számolom, hogy (irány szerint megkülönböztetve) hányszor megy egyikből a másik állapotba a rendszer.

- Stacionárius állapotban Δt idő alatt az átmenetek száma:

$$\begin{aligned} n\text{-ből } m\text{-be menve: } w_{mn}p_n^e \\ m\text{-ből } n\text{-be menve: } w_{nm}p_m^e \end{aligned}$$

- A **részletes egyensúly** elve azt mondja ki, hogy a két számnak meg kell egyeznie, azaz:

$$\boxed{w_{mn}p_n^e = w_{nm}p_m^e} \quad \text{Megkötés az átmeneti valószínűségek hányadosára}$$

Ha az állapotok száma véges és a rendszer minden pontjából minden másik pontjába el tudok jutni, akkor egyetlen stacionárius állapot lesz, az egyensúlyi.

Csak az átmeneti valószínűségek hányadosára van megkötés, azaz:

$$\frac{w_{mn}}{w_{nm}} = \frac{e^{-\beta(E_m)}}{e^{-\beta(E_n)}} = \frac{e^{-\beta(E_m - E_n)}}{1} = \frac{1}{e^{-\beta(E_n - E_m)}}$$

Ha $E_m - E_n = \Delta E_{nm} > 0$ (azaz az energia nő), az e-adós tag 1-nél kisebb lesz, tehát vehetem azt az átmeneti valószínűségnek. Ha csökken az energia, akkor az energiacsökkenés felé vivő lépést 1 valószínűséggel lépek meg.

Bizonyítás: $\partial_t p_n(t) = -\sum_m w_{mn}p_n(t) + \sum_m w_{nm}p_m(t) = 0$ (egyensúly esetén). Tehát:

$0 = -\sum_m (w_{mn}p_n^e - w_{nm}p_m^e)$ Páronként kioltják egymást. Ezért hívják részletes egyensúlynak, mivel nem csak az egész összeg nulla, hanem az állapotok között páronként van egyensúly. (Ehhez egy összefüggő gráf kell)

Entrópia és szabadenergia

[Ide még jön egy szemléletesebb magyarázat az entrópiára \(pl másik tételben is szerepel.\) Cz](#)

Tulajdonképpen valószínűleg ide a Bércesék által írt *Mechanika II.*-ből a 550-552 oldal környéke a legrelevánsabb. 94.27.225.23 2009. június 22., 09:14 (UTC)

Irreverzibilis folyamatok

Ha egy rendszert például master egyenelttel írunk le, abból is levezethető az entrópia és a szabadenergia. Az entrópia triviálisan felírható az állapotok valószínűségeiből:

$$S = -\sum_i p_i \log_2(p_i)$$

Ebből pedig a szabadenergia:

$$F = \sum_i p_i E_i - T \cdot S$$

Az irreverzibilis szabadenergia mindig nagyobb, mint a reverzibilis folyamatokban. Az entrópiára pedig továbbra is a második főtétel alkalmazható.

Ismétlésül: A termodinamikai entrópia fogalma:

$\delta Q = T \delta S$, ahol Q a hő (azaz két különböző hőmérsékletű rendszer közötti spontán energiacsere), dS pedig az entrópiaváltozás.

$$\text{Átrendezve: } \delta S = \frac{\delta Q}{T}$$

197/209

Állapotjelzők:

extenzív (összeadódik): n , belső energia, V , S intenzív (kiegyenlítődik): p , T , μ A Termodinamika első főtétele: $dU = \delta Q - \delta W + \mu dN$ (egy komponensű elegyre)A Termodinamika második főtétele: $\delta Q = TdS$; $\delta W = pdV$ Fundamentális egyenlet az előző kettőből: $dU = TdS - pdV + \mu dN$

Termodinamikai Potenciálok: Alapvető skalár potenciálok, természetes változóikban állandó rendszer esetén minimumra törekszenek, azaz egyensúlyban minimálisak. U , F , H , G négy termodinamikai potenciál:

- A szabad energia definíciója: $F = U - TS$
- Az entalpia definíciója: $H = U + pV$
- A szabad entalpia definíciója: $G = U + pV - TS = H - TS$

A belső energiára vonatkozó fundamentális egyenletből Legendre transzformációval további Fundamentális egyenletek kaphatóak. Pl:

$$dF = -SdT - pdV + \mu dN$$

A **Boltzmann-féle entrópia** definíciója: $S = k_B \ln \Omega(E)$, ahol $\Omega(E)$ a mikroállapotok száma.

Kanonikus tárgyalásmódban az állapotösszeg: $z = \sum_m e^{-\beta E_m}$

Ezt, az első fundamentális egyenletet és a Boltzmann-entrópi definícióját felhasználva:

$$F = -k_B T \ln z$$

További sűrűn használatos, származtatható összefüggések:

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln z; \quad c_V = \frac{\partial U}{\partial T}$$

Fundamentális egyenletekből:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial U}\right)_{V,N} = \frac{1}{T}; \quad \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_{U,N} = \frac{p}{T}; \quad \left(\frac{\partial S}{\partial N}\right)_{V,U} = -\frac{\mu}{T}$$

$$\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V,N} = -S; \quad \left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{T,N} = -p; \quad \left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{V,T} = \mu$$

Ezekből felírható a Helmholtz-egyenlet: $F = U + T \frac{\partial F}{\partial T}$

Ingadozási jelenségek

Brown-mozgás, Diffúzió, Brown-mozgás potenciálban

Alapfeltevések

1. A részecskék egymástól függetlenül mozognak.

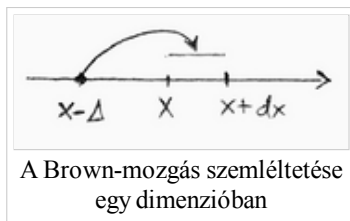
197/209

198/209

- $\tau \ll$ megfigyelési idő minimuma (ezen túl a mozgás az előzőektől függetlennek tekinthető)
- Az elmozdulásnak van egy valószínűségi eloszlása. A mozgás leírható valószínűségi alapon.

Jelölések

- $n\Phi(\Delta)d\Delta$: annak valószínűségét adja meg, hogy n darab részecske Δ -t ugrik τ idő alatt.
- $p(x,t)dx$: annak valószínűsége, hogy t időpontban alatt x -ben van a részecske.



Az Einstein-féle leírás (1905) Annak valószínűsége, hogy a részecske τ idő múlva az x és $x+dx$ közötti tartományban foglal helyet:

$$p(x, t + \tau)dx = p(x, t)dx - \int_{-\infty}^{\infty} p(x, t)dx\Phi(\Delta)d\Delta + \int_{-\infty}^{\infty} p(x - \Delta, t)dx\Phi(\Delta)d\Delta$$

Az egyenlet jobb oldalának első tagja annak valószínűsége, hogy a részecske már t időpillanatban is az x és $x+dx$ közötti tartományban volt. A második tag annak valószínűségét adja meg, hogy τ idő múlva éppen arrébbmegy egy bármekkora Δ ugrással másik helyre. A harmadik tag annak valószínűségét adja, hogy a részecske valamekkora Δ távolságról éppen Δ -t ugorva megérkezik τ idő múlva.

Az egyenletet dx -szel végigoszthatjuk hiszen a dx -ek (és a $p(x,t)$ is) mindegyik integráljellel elé kiemelhetőek, hiszen nem függenek Δ -tól, ekkor:

$$p(x, t + \tau) = p(x, t) - p(x, t) \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(\Delta)d\Delta + \int_{-\infty}^{\infty} p(x - \Delta, t)\Phi(\Delta)d\Delta$$

És mivel $\int_{-\infty}^{\infty} \Phi(\Delta)d\Delta = 1$ (hiszen $\Phi(\Delta)d\Delta$ annak valószínűségét adja meg, hogy egy részecske Δ -t ugrik τ idő alatt, aminek a valószínűsége a teljes térre egy kell, hogy legyen - itt jegyzem meg, hogy $\Phi(\Delta) = \Phi(-\Delta)$), ennek következtében a jobb oldal első két tagja kiejti egymást és az egyenlet a következő alakra egyszerűsödik:

$p(x, t + \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} p(x - \Delta, t)\Phi(\Delta)d\Delta$	Chapman-Kolmogorov egyenlet
--	-----------------------------

A fenti egyenletet τ -ban és Δ -ban sorbafejtjük, az alábbiak szerint:

$$p(x, t + \tau) = p(x, t) + \frac{\partial p}{\partial t}\tau + \dots$$

$$p(x - \Delta, t) = p(x, t) - \frac{\partial p}{\partial x}\Delta + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 p}{\partial x^2}\Delta^2$$

Ekkor a következő egyenletet kapjuk:

$$p(x, t) + \frac{\partial p}{\partial t}\tau = \int_{-\infty}^{\infty} p(x, t)\Phi(\Delta)d\Delta - \frac{\partial p}{\partial x} \int_{-\infty}^{\infty} \Delta\Phi(\Delta)d\Delta + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2} \int_{-\infty}^{\infty} \Delta^2\Phi(\Delta)d\Delta$$

198/209

199/209

Ugyanazon okok miatt, mint a Chapman-Kolmogorov egyenlet levezetésénél, az egyenlet bal oldalának első tagja és jobb oldalának első tagja kiejti egymást, így a következő marad:

$$\frac{\partial p}{\partial t} \tau = -\frac{\partial p}{\partial x} \int_{-\infty}^{\infty} \Delta \Phi(\Delta) d\Delta + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 p(x,t)}{\partial x^2} \int_{-\infty}^{\infty} \Delta^2 \Phi(\Delta) d\Delta$$

A fenti egyenlet jobb oldalán az első tagnál az integrál pont $\overline{\Delta}$ értékét adja meg, míg a második tag integrálját ennek mintájára elneveztük $\overline{\Delta^2}$ -nek. Az egyenlet a következőképp módosul:

$$\frac{\partial p}{\partial t} \tau = -\frac{\partial p}{\partial x} \overline{\Delta} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 p(x,t)}{\partial x^2} \overline{\Delta^2}$$

Ám $\overline{\Delta}$ értéke nulla, mivel a $\Phi(\Delta)$ függvényt teljesen szimmetrikusnak tételeztük fel. Tehát a bal oldal első tagja is kiesik. Ami marad:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\overline{\Delta^2}}{2\tau} \frac{\partial^2 p(x,t)}{\partial x^2}$$

$\frac{\overline{\Delta^2}}{2\tau}$ -et D-nek (azaz diffúziós együtthatónak) elnevezve megkapjuk a **diffúziós egyenlet** általános alakját, mely:

$\frac{\partial p}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p}{\partial (x^2)}$	Dinamikai egyenlet a <u>valószínűség időbeni változására</u> (más néven a <u>Fokker-Planck egyenlet</u>).
---	--

A Fokker-Planck egyenlet megoldásának keresése

A következőkben a Fokker-Planck egyenlet megoldását kerestük a $t = 0$, $x = 0$ kezdőfeltételekhez.

Ekkor ha $p(x,t=0) = \delta(x)$ akkor ebből a megoldás:

$$p(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \quad (3D\text{-ben az } 1/\text{gyök-ös rész a } 3/2\text{-en van.})$$

A fentiek alapján $\langle x^2 \rangle$ értékére az alábbi összefüggés születik, ahol λ -t konstansnak várjuk:

$$\langle x^2 \rangle = \lambda Dt = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} x^2 e^{-\frac{x^2}{4Dt}} dx = \frac{4Dt}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} y^2 e^{-y^2} dy$$

az utolsó egyelőségénél változó helyettesítés történt: $y = \frac{x}{\sqrt{4Dt}}$

Az integrál értéke innen (http://en.wikipedia.org/wiki/List_of_integrals_of_exponential_functions#Definite_integrals) $\frac{\sqrt{\pi}}{2}$ így: $\langle x^2 \rangle = 2Dt$ (azaz $\lambda = 2$)

Sodródás, Brown-mozgás potenciálban:

A részecskék ebben az esetben valamilyen kitüntetett irányba sodródnak: $\Phi(\Delta) \neq \Phi(-\Delta)$

Az előzőekhez képest annyi a különbség, hogy a következő tag:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Delta \Phi(\Delta) d\Delta = \overline{\Delta} \neq 0$$

Ismét alkalmazva a Kramers-Moyal sorfejtést:

199/209

200/209

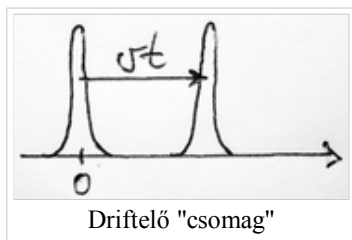
$$p(x, t) + \frac{\partial p}{\partial t} \tau = p(x, t) - \frac{\partial p}{\partial x} \int_{-\infty}^{\infty} \Delta \Phi(\Delta) d\Delta + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \int_{-\infty}^{\infty} \Delta^2 \Phi(\Delta) d\Delta$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\overline{\Delta}}{\tau} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\overline{\Delta^2}}{\tau} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}$$

($\overline{\Delta}$, $\overline{\Delta^2}$: mikroszkopikus hossz, τ : mikroszkopikus idő.)

Ez is a Fokker-Planck egyenlet egy alakja. A fenti egyenlet jobb oldalán az első tag önmagában egy driftet ír le:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -v \frac{\partial p}{\partial x}, \text{ ahol } v = \frac{\overline{\Delta}}{\tau}$$



Például: $p(x, t) = \tilde{p}(x - vt)$. A fenti egyenletbe behelyettesítve és elvégezve: $-v\tilde{p}' = -v\tilde{p}'$

Viszont érdemes megtartani a második tagot, hiszen ha ezt is figyelembe vesszük, akkor azt kapjuk, hogy a "csomag" halad valamerre és közben szétterjed:

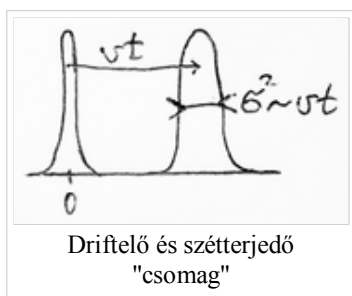
$$\frac{\partial p}{\partial t} = -v \frac{\partial p}{\partial x} + D \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}$$

Bevezetve az $y := x - vt - t$ (vagyis "beleülünk" a driftelő rendszerbe), akkor $\tilde{p}(x - vt, t) = \tilde{p}(y, t) = p(x, t)$.

Ekkor a Fokker-Planck egyenlet a következőképp módosul:

$$-v \frac{\partial \tilde{p}}{\partial y} + \frac{\partial \tilde{p}}{\partial t} = -v \frac{\partial \tilde{p}}{\partial y} + D \frac{\partial^2 \tilde{p}}{\partial y^2} \text{ Vagyis visszakapjuk a drift nélküli összefüggést: } \frac{\partial \tilde{p}}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \tilde{p}}{\partial y^2}$$

$$\text{Tehát: } \tilde{p}(y, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{y^2}{4Dt}} \quad \longrightarrow \quad p(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{(x-vt)^2}{4Dt}}$$



Langevin-egyenlet

Brown-mozgásra az általános Langevin-egyenlet: $m\ddot{x} = -6\pi\tilde{\eta}\dot{x}a + X - \frac{\partial U}{\partial x}$, ahol

- $\tilde{\eta}$ - a viszkozitás
- a - a részecske sugara
- X - egy véletlenszerű erő

200/209

- 201/209
- $\frac{\partial U}{\partial x}$ - egy külső erő (potenciál)

Ha *túlsillapított* esetet vizsgálunk, akkor $0 = -6\pi\tilde{\eta}\dot{x}a + X - \frac{\partial U}{\partial x}$

Ekkor bevezetve a zajt - $\eta = \mu X$ - fogalmát és a $\mu = \frac{1}{6\pi\tilde{\eta}a}$ jelölést, az egyenlet a következőképp fog kinézni:

$$\dot{x} = -\mu \frac{\partial U}{\partial x} + \eta$$

Bevezetve még a $v(x) = -\mu \frac{\partial U}{\partial x}$ jelölést:

$$\dot{x} = v(x) + \eta \text{ lesz a végleges forma.}$$

Ebből jól látni, hogy *túlsillapított* esetben az elmozdulás a $v(x)$ determinisztikus sebesség és az η zaj összege.

Ha feltételezzük, hogy a zaj Gauss-eloszlású, és meghatározzuk az adott helyen tartózkodás valószínűségét, akkor megkapjuk a "driftet tartalmazó" Fokker-Planck egyenletet (lsd. feljebb)

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -v \frac{\partial p}{\partial x} + D \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}$$

Bevezetve a valószínűségi áramot: $J = vp - D \frac{\partial p}{\partial x}$, egyensúlyi esetben ($J=0$) megkapjuk a Boltzmann-eloszlást:

$$P_e = C e^{-\beta U} \quad \left(\beta = \frac{1}{k_B T} \right)$$

Vezetési jelenségek

Drude modell

Az elektromos vezetés jelenségét úgy tekintjük, hogy az elektronok az elektromos tér hatására gyorsulnak, azonban a vezető helyezettőtt atomtörzseinek ütközve energiát veszítenek. Ez igen hamar makroszkópikus egyensúlyhoz vezet, ha a tér nem változik. Ezek a feltevések az alapjai a Drude-modellnek, amelynek eredménye az elektronokra felírható mozgásegyenlet:

$$m\ddot{x} = eE - m \frac{1}{\tau} v$$

amelynek stacionárius megoldása:

$$m \frac{1}{\tau} v = eE$$

Itt τ az ütközések között elteltő jellemző relaxációs idő, v a drift sebesség. A v -re rendezett eredményt a töltéssel (e) és az elektronsűrűséggel (n) beszorozva megkaphatjuk az Ohm-törvényt:

$$j = \frac{ne^2\tau}{m} E$$

azaz az elektromos áramsűrűség egyenesen arányos a térerősséggel, az arányossági tényező a fajlagos ellenállás reciproka, azaz a fajlagos vezetőképesség. A Drude-modell jó leírást ad több effektusra, azonban például az áram

202/209

hőhatását túlbecsli. Kevés jó modell van az elektronok ütközésének leírására, ez a terület ma is aktív kutatás tárgya.

Kereszteffektusok

(* A levezetés csak a kitekintés kedvéért szerepel)

A kereszteffektusok bevezetéséhez a nemegyensúlyi statisztikus fizika eszköztárához kell fordulnunk. Ebben a tárgyalásban most a vezetési jelenségekre korlátozódva jellemezzük a vizsgált rendszerünket az f betöltési függvény, amely a pozíció, idő, és a hullámvektor függvénye. Írjuk fel a teljes idő differenciált, amely a Liouville-tétel értelmében zérus:

$$0 = \frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \dot{\mathbf{r}} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} \dot{\mathbf{k}} - X$$

itt X az ütközések miatti változást jelöli. A felírt egyenlet lényegében Boltzmann-egyenlet, csak impulzus helyett hullámszámmra felírva. A következő feltevéseket tehetjük:

- Egyensúlyban a betöltést a Fermi-Dirac statisztika írja le:

$$f_0(r, k) = \frac{1}{e^{\beta(E(k) - E_F)} + 1}$$

vigyázat, β -ban T függhet a helytől is.

- A perturbációk időfüggését elhanyagoljuk, azaz f időderiváltja zérus.
- A rendszerben hullámcsomagokat akarunk leírni. Jó leírást kapunk, ha a sebességre a csoportsebességet vezetjük be:

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}}$$

- Az impulzusmegváltozással analóg tagra írjuk be a klasszikus elektromágneses erőhatást:

$$\dot{\mathbf{k}} = \frac{e}{\hbar} \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{H} \right)$$

- Az ütközési tagra tegyük azt a durva közelítést, hogy az egyensúlytól való eltéréssel egyenesen, és a relaxációs idővel fordítottan arányos:

$$X = -\frac{f - f_0}{\tau(\mathbf{k})}$$

- Az eloszlásfüggvény helyszerinti gradiense a hőmérséklet függésen keresztül is kifejezhető:

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = \frac{\partial f}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}}$$

A fentiek ismeretében a Boltzmann-egyenlet a következő alakra kerül:

$$\mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}} + \frac{e}{\hbar} \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{H} \right) \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} = -\frac{f - f_0}{\tau(\mathbf{k})}$$

A deriválásokat egy \mathbf{D} differenciál-operátorba összevonva az egyenlet:

$$\mathbf{D}f = -\frac{f - f_0}{\tau(\mathbf{k})}$$

202/209

203/209

Ennek a megoldása felírható soralakban, így különböző rendű korrekciók nyerhetőek:

$$f = f_0 - \tau \mathbf{D} f_0 + (\tau \mathbf{D})^2 f_0 \dots$$

Ezt visszahelyettesítve elsőrendben a következő megoldást kapjuk:

$$f = f_0 + \frac{\partial f_0}{\partial E} \tau \mathbf{v} \left[\left(\frac{E - E_F}{T} + \frac{\partial E_F}{\partial T} \right) \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}} - eE \right]$$

A legszembevetőbb eredmény, hogy a mágneses tér kiesett, azaz csak a magasabb rendű korrekciók függenek tőle. Ha bevezetjük az elektromos áramsűrűséget, és a hőáramsűrűséget:

$$j_e = \frac{e}{4\pi^3} \int_{B_z} \mathbf{v} f d^3 \mathbf{k}$$

$$j_Q = \frac{1}{4\pi^3} \int_{B_z} (E - E_F) \mathbf{v} f d^3 \mathbf{k}$$

és bevezetve egy egyesített potenciált: $\mu = E_F + e\Phi$, megkaphatjuk az áramokra vonatkozó egyenleteket:

$$j_e = L^{11} \frac{\partial \mu}{\partial \mathbf{r}} + L^{12} \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}}$$

$$j_Q = L^{21} \frac{\partial \mu}{\partial \mathbf{r}} + L^{22} \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}}$$

Az L együtthatók másodrendű tenzorok, itt most annyi elég róluk, hogy:

- $L^{12} = L^{21}$, ez az Onsager-reláció a termodinamikában,
- Mindegyikük tartalmazza az egyensúlyi eloszlás energia szerinti deriváltját, és τ -t,
- Az L^{11} tenzor ezen felül az elektromos töltést,
- L^{12}, L^{21} tartalmazza $E - E_F$ -et,
- L^{22} pedig $(E - E_F)^2$ -et.

Ezek segítségével kifejezhetőek a következők:

- Homogén anyagban, homogén hőmérsékleteloszlás esetén visszkapjuk az Ohm-törvényt:

$$j_e = \sigma E, \quad \sigma = -eL^{11}$$

- Homogén anyagban, ha nincs elektromos áram visszkapjuk a hővezetés egyenletét:

$$j_Q = -\kappa \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}}, \quad \kappa = \frac{1}{T} (L^{22} - L^{12} (L^{11})^{-1} L^{12})$$

és az elektrokémiai potenciál, valamint a hőmérsékletgradiens kapcsolatát:

$$-\frac{\mu_e}{\mathbf{r}} = S \frac{\partial T}{\partial \mathbf{r}}, \quad S = \frac{1}{T} (L^{11})^{-1} L^{12}$$

Ezek kombinálásával lehet értelmezni a további effektusokat (ekkor már elhagyható a fenti megkötések egy része):

- Seebeck-effektus: a hőmérsékletkülönbség elektromos áramot hoz létre.
- Peltier-effektus: két fém határfelületén átfolyó áram hőmérsékletkülönbséget hoz létre a két fémen.
- Thomson-effektus: áram alatt levő vezető, amelyen hőmérsékletkülönbség van, lehűl, vagy felmelegszik.

Ezen effektusok arányossági tényezői között fennáll a következő két Thomson-összefüggés:

$$\Pi = T \cdot S$$

203/209

204/209

$$\mu = T \frac{dS}{dT}$$

ahol T a hőmérséklet, Π a Peltier-együttható, S a Seebeck-együttható és μ a Thomson-együttható.

Az eloszlásfüggvény további korrekcióinak figyelembevételével megkaphatjuk a másodrendű effektusokat, akkor már a mágneses hatás is beleszól a folyamatokba. Ezek közül a legjelentősebb a Hall-effektus. Itt elektromos áram, és rá merőleges mágneses tér hatására az előző kettőre merőleges elektromos potenciálkülönbség alakul ki a vezetőben.

Záróvizsga tematika

Tételek

A klasszikus mechanika alapjai | A klasszikus mechanika elméleti tárgyalása | A relativitás elmélet alapjai | Egzaktnál megoldható fizika problémák | Folytonos közegek mechanikája | Fenomenologikus termodinamika | Elektro- és magnetosztatika, áramkörök | Elektrodinamika | Hullámegyenlet és hullámoptika | Geometriai optika és alkalmazásai | A kvantumelmélet alapvető kísérletei | A kvantummechanika elméleti háttere | Atom- és molekulaszervezet | A magfizika alapjai | A termodinamika statisztikus alapozása | Kvantumstatisztikák | Kölcsönható rendszerek, mágneses anyagok | Kristályos anyagok fizikája | **Nemegyensúlyi folyamatok leírása** | Az asztrofizika alapjai

A lap eredeti címe: „http://mafihe.hu/~wiki/wiki/index.php/Nemegyens%C3%BAlyi_folyamatok_le%C3%ADr%C3%A1sa”

- A lap utolsó módosítása: 2009. augusztus 19., 21:23

Az asztrofizika alapjai

A TételWiki wikiből

Tartalomjegyzék

- 1 Newton-féle gravitációs erőtvény
- 2 Az ősrobbanás elmélet alapvető feltevései
- 3 Friedmann-egyenletek szemléletes értelme
- 4 Galaxisok kialakulása, morfológiája, Hubble törvény
- 5 A HR diagram és a csillagfejlődés szemléletes képe, kompakt objektumok: fehér törpék, neutroncsillagok, fekete lyukak
- 6 Megfigyelés alapjai: luminozítás, magnitúdó, vöröseltolódás

Newton-féle gravitációs erőtvény

A gravitáció négy alapvető kölcsönhatás egyike az univerzumban, és az egyetlen amely a nagyskálás szerkezetet meghatározza. A legkorábbi kvantitatív megfogalmazása Newton-hoz köthető:

$$F = \gamma \frac{M_1 M_2}{r^2}$$

azaz az elektrosztatikus Coulomb-törvényhez hasonló alakú, reciproknégyzetes lecsengésű erő, amely azonban csak vonzó formában ismert. A Newton-i erőtvény igen jó leírását adta a gravitációs jelenségeknek egészen addig, amíg Einstein általános relativitáselmélete létre nem jött. Ez utóbbi határeseteként tartalmazza a Newton-i erőtvényt.

Az ősrobbanás elmélet alapvető feltevései

A Big Bang modell a kozmológia Standard modellje. Elsősorban megfigyelésekre és az általános relativitáselméletre épül.

- Az univerzum megfigyelések szerint nagy skálán (100Mpc felett) homogén (az anyag eloszlása egyenletes), erre alapul a **kozmológiai elv**, vagyis az a feltételezés, hogy létezik olyan vonatkoztatási rendszer, melyben az univerzum homogén és izotrop(abszolút vonatkoztatási rendszer).
- A Hubble-törvény úgy interpretálható, hogy az univerzum tágul. Ha ezt extrapoláljuk korai időszakokra, akkor az **energiamegmaradás** miatt az univerzumnak korábban nagyobb volt az energiasűrűsége, az univerzum nem sztatikus.
- A tágulásból és az energiamegmaradásból az ősrobbanás még nem következik. Hiszen elképzelhető lenne pl. az is hogy az u energiasűrűség valami véges értékhez konvergál a végtelenben. Mivel az univerzumban az egyetlen ismert nagy hatótávolságú erő a gravitációs erő, ezért annak az elméletéből kell kiindulni, ez pedig az **általános relativitáselmélet**. Ennek az eddigi alapelvekre való alkalmazásából már következik az ősrobbanás.

Friedmann-egyenletek szemléletes értelme

Az univerzum tágulásának tárgyalásakor elengedhetetlen az általános relativitás elmélet kereteiben történő tárgyalás. Tömören összefoglalva a tér-idő távolságokat magábanfoglaló ívelemnégyszet (lásd itt) függ a helytől, és ez a függés kapcsolatban van a tömegekkel. A helyfüggést leíró görbületi tenzor, és az anyag állapotegyenletét magábanfoglaló feszültségtenzor között az Einstein-egyenletek teremtenek kapcsolatot. Ha a tágulást egy skálafaktorral (a) jellemezzük az ívelemben:

$$ds^2 = a(t) \cdot ds_3(k) - dt^2$$

206/209

itt $ds_3(k)$ a háromdimenziós ívelemnézgyet a térkoordinátáktól, ami különböző geometriájú univerzumoknak felel meg, ezeket k paraméterezi. A fenti ívelemmel az univerzum tágulását leíró egyenletek homogén, izotrop közelítésben (az Einstein-egyenletekből 10 egyenlet származtatható (szimmetrikus négyestenzorok...), de az izotrópia miatt a tenzoroknak csak két független komponense lesz):

$$H^2 = \left(\frac{\dot{a}}{a}\right)^2 = \frac{8\pi G}{3}\rho - \frac{kc^2}{a^2} + \frac{\Lambda c^2}{3}$$

$$\dot{H} + H^2 = \frac{\ddot{a}}{a} = -\frac{4\pi G}{3}\left(\rho + \frac{3p}{c^2}\right) + \frac{\Lambda c^2}{3}$$

Ezek a kozmológia alapegyenletei. H a Hubble-állandó, amely az univerzum tágulását jellemzi, G a gravitációs konstans, Λ a kozmológiai konstans, c a fénysebesség, k az univerzum görbületét jellemző mennyiség (sík, gömb, vagy hiperbolikus felület). A kozmológiai állandó olyan, hogy pozitív energiasűrűséghez negatív nyomást rendel. Ezzel magyarázzák ma a gyorsuló tágulást, és ezt tartalmazzák a Friedmann egyenletek legjobboldalibb tagjai.

Az Univerzum fejlődésének az energiamegmaradásra, a kozmológiai elvre és a általános relativitás elvére épülő, $\Lambda = 0$ választással felírt modellje a standard kozmológiai modell. Ekkor az egyenletek:

$$\frac{8\pi G}{3c^2}u = \left(\frac{\dot{a}}{a}\right)^2 + k\frac{c^2}{a^2}$$

$$\frac{d}{dt}(ua^3) + P\frac{d}{dt}(a^3) = 0$$

A $k = \text{sgn}R$ szorzó a téridő általános geometriáját adja meg:

- A $k = +1$ megfelel a pozitív görbületű, zárt térnek, mely határtalan, de véges. Az ilyen geometriájú táguló Univerzum két dimenzióban felfúvódó léggömbbel szemléltethető. Az ilyen térben a háromszög szögeinek összege több, mint 180 fok.
- $k = -1$ esetben negatív görbületű, nyílt, végtelen térről beszélünk, melynek kétdimenziós megfelelője a nyeregfelület. Ilyen térben a háromszög szögeinek összege kisebb, mint 180 fok.
- $k = 0$ -nál sík, euklidészi térről van szó.

A már említett $a(t)$ skálafaktort $|k| = 1$ esetben a következő összefüggés adja meg:

$$ka^2 = \frac{c}{R}$$

Tehát ez a négydimenziós térben adott ponthoz simuló négydimenziós gömb sugara (lokális görbületi sugár). Abszolút vonatkoztatási rendszerben bármely két pont távolsága arányos $a(t)$ -vel. $k = 0$ esetben a fenti definíció nem érvényes, ekkor a -t egyszerűen bármely két, abszolút rendszerben rögzített pont távolságaként határozzuk meg.

Az egyenletet átalakítva relativisztikus és nem relativisztikus esetekben a következő arányosságokat kaphatjuk:

a, Relativisztikus esetben (sugárzás dominálta univerzum) felhasználva, hogy a nyomás és a sűrűség között a $p = 3\rho$ összefüggés áll fenn:

$$\rho \propto R^{-4} \text{ és } R \propto t^{1/2}$$

Ekkor a skálafaktor időfüggése:

$$a(t) = a_0 \left(\frac{t}{t_0}\right)^{1/2}$$

b, Nem relativisztikus esetben (anyag dominálta univerzum) esetén pedig $p = 0$ összefüggés teljesülése mellett:

206/209

$$\rho \propto R^{-3} \text{ és } R \propto t^{2/3}$$

Ebben az esetben a skálafaktor:

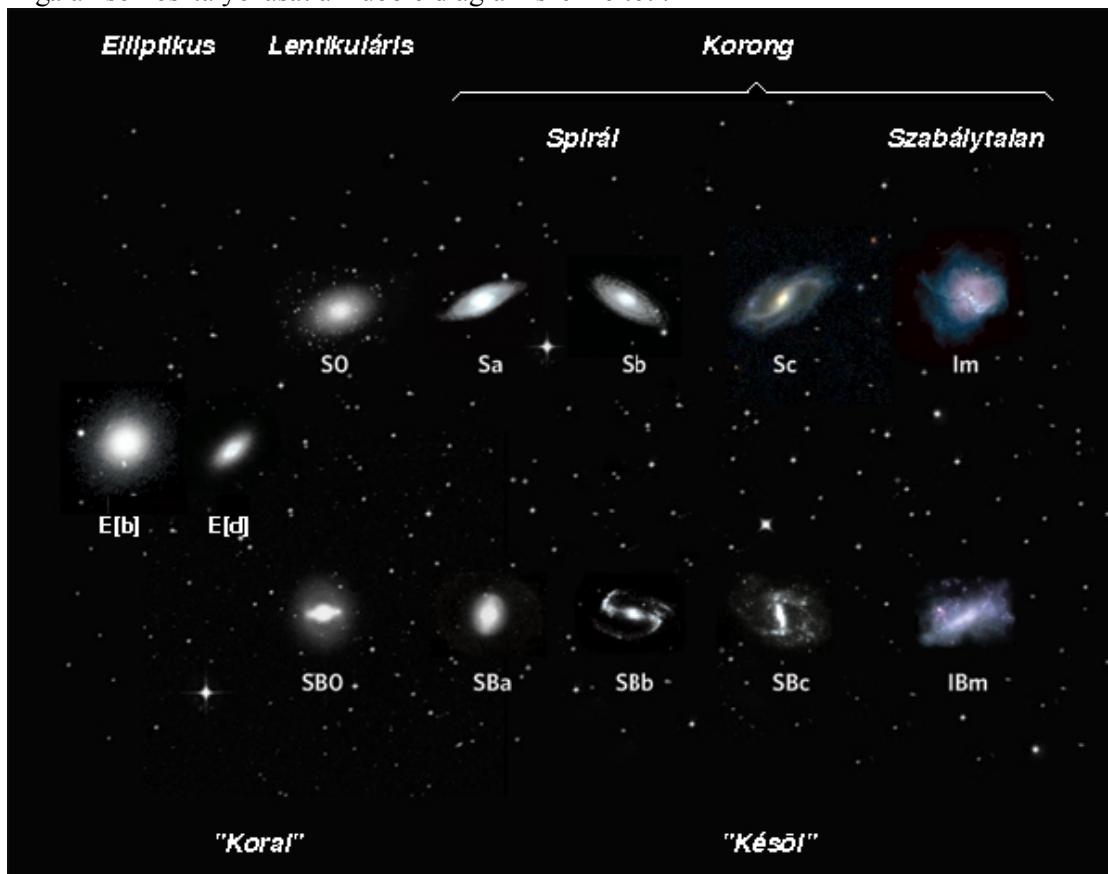
$$a(t) = a_0 \left(\frac{t}{t_0} \right)^{2/3}$$

Definiálhatjuk az Ω sűrűség paramétert. Ez szemléletesen az univerzum időfejlődését paraméterezi, ha 1-nél kisebb az univerzum örökké tágul, ha 1-el egyenlő akkor a végtelenségig lassul a tágulás, ha nagyobb, akkor egy időtán újra összeroppan.

$$\Omega = \frac{8\pi G\rho}{3H^2}$$

Galaxisok kialakulása, morfológiája, Hubble törvény

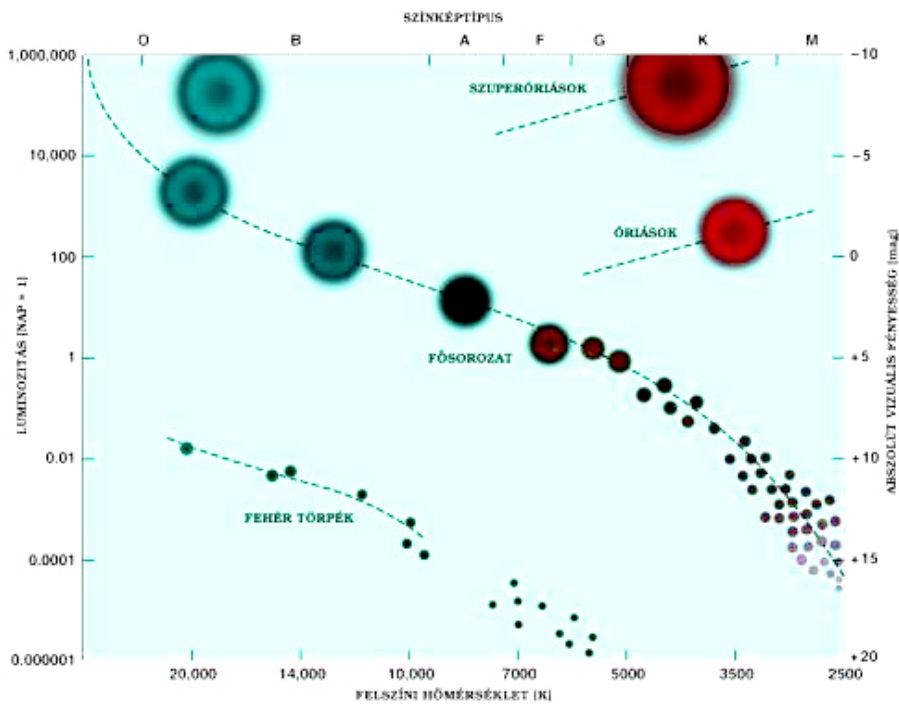
A galaxisok osztályozását a Hubble diagram szemlélteti:



Hubble-törvény: $v = Hr$ ahol H a Hubble-állandó (74 km/s/Mpc)

A HR diagram és a csillagfejlődés szemléletes képe, kompakt objektumok: fehér törpék, neutroncsillagok, fekete lyukak

A Hertzsprung-Russel Diagram (HRD) a csillagok hőmérsékletét és a hozzá tartozó fényességet szemlélteti. A diagramon kirajzolódó ágak azokat a csillagfejlődési állapotokat mutatják, ahol a csillagok huzamosabb időt eltöltenek. A csillagok fejlődésük során változtatják a helyüket a HRD-n, attól függően, hogy kis ($< 8 M_{Nap}$), vagy nagytömegű ($> 8 M_{Nap}$) csillagokról beszélünk, más-más fejlődési utat járnak be.

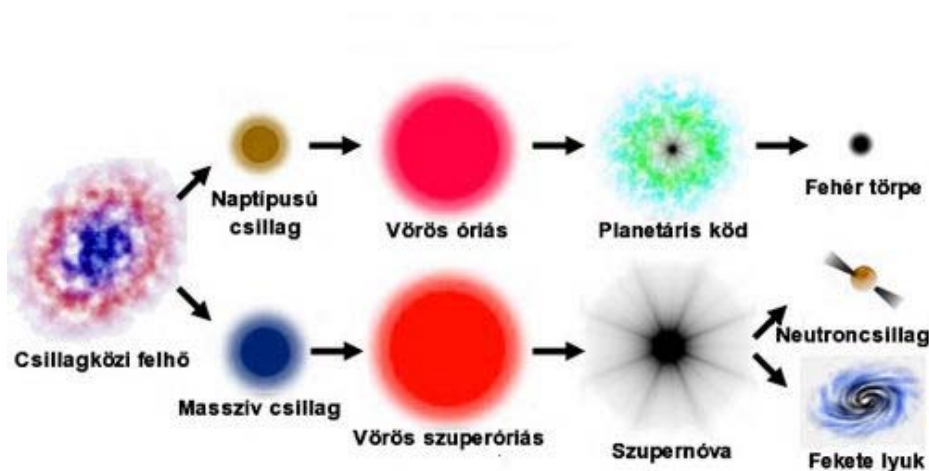


A főágon tartózkodó csillagokban H-fúzióval történik az energiatermelés, amikor viszont a H elfogyott, nehezebb elemek fúziója kezdődik meg, a csillag vörös-óriássá válik, és átkerül az óriás ágra.

A HRD vízszintes tengelyén a színképosztályok is szerepelhetnek például, ezeket a hőmérséklet alapján osztották fel. A legfőbb osztályok: O, B, A, F, G, K, M. Ezeneken belül 0-tól 9-ig vannak alosztályok is felvéve. A Nap a G2-es osztályba tartozik.

Ha egy kistömegű ($<8 M_{Nap}$) csillag elfejlődik, akkor vörösóriássá válik, majd ledobja légkörét egy planetáris ködöt hagyva maga után, illetve a csillagból fehér törpe lesz, ami lassacskán kihűl. Amennyiben a csillagnak volt társa, a fehér törpe anyagot szippázhat el társcsillagáról, és amikor a tömege eléri a Chandrasekar-határt (1,4 naptömeg), akkor Ia típusú szupernóvarobbánsban felrobban.

Ha nagytömegű ($>8 M_{Nap}$) csillag elfejlődik, akkor vörös szuperóriás lesz belőle. A csillag magjában az egyre nehezebb elemek fúziója kezdődik meg, egészen a vasig (ez van a potenciálgödör mélyén, eddig mehet a fúzió). A fúzió leállása miatt a hidrosztatikai egyensúly felborul, neutrínók visszapattannak a vasmagról, lökéshullám keletkezik, és II. típusú szupernóva robbanás következik be. A maradvány csillag lehet egy neutroncsillag, vagy fekete lyuk, tömegtől függően (ált. 30-50 naptömeg feletti csillagokból lesz fekete-lyuk, ezalatt pedig neutroncsillag). A neutroncsillagok egy gyorsan forgó változata a pulzár, ahol nem esik egybe a forgástengely és a mágneses tengely.



Általánosságban igaz, hogy minél nagyobb a csillag tömege, annál gyorsabban elfejlődik, élettartama annál rövidebb.

A fehér törpéket és a neutroncsillagokat a degenerált Fermi-gáz nyomása stabilizálja, ez áll ellen a gravitációnak.

Megfigyelés alapjai: luminozítás, magnitúdó, vöröseltolódás

Pogson képlet:

$$m_1 - m_2 = -2,5 \log \frac{F_1}{F_2}$$

Ez adja még két csillag fluxus-arányából (F_1 és F_2) a fényesség-arányukat (m_1 és m_2).

Magnitúdó: csillagászati fényességskála egysége: $m = -2.5 \log F$, ahol F a fluxus. $F = \frac{l}{4\pi r^2}$ ahol l a luminozítás. Ez

utóbbi pedig az égitest által kisugárzott energia minden irányban: $l = \frac{dE}{dt}$

A magnitúdóskála fordított, tehát minél fényesebb egy csillag, annál kisebb szám a magnitúdója. Létezik relatív és abszolút magnitúdó. Előbbi a Földről nézve egy objektum fényessége, utóbbi 10 parszekről nézve. Egy csillag abszolút fényessége és látszó fényessége között a következő összefüggés áll fent (a Pogson-képletből):

$$m - M = 5 \log r - 5$$

$m - M$ a távolságmodulus, r a csillag tőlünk mért távolsága pc-ben. Tehát, ha valamilyen módon meghatározhatjuk az objektum abszolút fényességét, akkor a képlet segítségével kiszámolhatjuk a távolságot (a látható fényesség mérhető). Az abszolút fényesség meghatározására több módszer is létezik (periódus-fényesség reláció Cefeidákra és RR Lyr-ekre, SN-k, stb...).

Vöröseltolódás: ld. Doppler-effektus. Akkor lép fel, ha egy objektum távolodik tőlünk, színe egyre vörösebb lesz, a színeképvonalai a hosszabb hullámhosszak felé tolódnak el. A világegyetem távolodása miatt a kozmikus objektumnál ez a jelenség lép fel, és természetesen minél távolabb van egy objektum, annál nagyobb a vöröseltolódása. Ezen a jelenségen épp ezért távolságmeghatározási módszerek is alapulnak. A vöröseltolódás ellentettje a kékeltolódás, amikor egy égitest közeledik felénk (pl. Androméda-galaxis, a Tejútrendszer spirálgalaxis szomszédja).

Záróvizsga tematika

Tételek	A klasszikus mechanika alapjai A klasszikus mechanika elméleti tárgyalása A relativitás elmélet alapjai Egzaktnál megoldható fizika problémák Folytonos közegek mechanikája Fenomenologikus termodinamika Elektro- és magnetosztatika, áramkörök Elektrodinamika Hullámegyenlet és hullámoptika Geometriai optika és alkalmazásai A kvantumelmélet alapvető kísérletei A kvantummechanika elméleti háttere Atom- és molekulaszervezet A magfizika alapjai A termodinamika statisztikus alapozása Kvantumstatisztikák Kölcsönható rendszerek, mágneses anyagok Kristályos anyagok fizikája Nemegyensúlyi folyamatok leírása Az asztrofizika alapjai
----------------	---

A lap eredeti címe: „http://mafihe.hu/~wiki/wiki/index.php/Az_asztrofizika_alapjai”

- A lap utolsó módosítása: 2009. augusztus 19., 21:25