

A mechanika, termodinamika és statisztikus fizika kapcsolata (ismétlés / bevezetés)

Osváth Szabolcs

Semmelweis Egyetem

Mechanika

mechanika: a fizikának az az ága, ami a testek mozgásának leírásával, az erők hatásának vizsgálatával foglalkozik



Galileo Galilei (1564 – 1642)

Mechanika rendszerek leírása

determinizmus: a rendszer kezdeti állapota egyértelműen meghatározza a rendszer jövőbeli fejlődését

a rendszer állapota:

$$q, \dot{q}$$

$$q, p$$

időbeli fejlődés:

$$q, \dot{q}, \ddot{q}, L$$

$$q, p, \dot{q}, \dot{p}, H$$



Sir William Rowan Hamilton
(1805 – 1865)

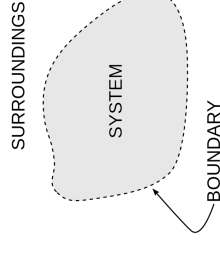
Termodinamika

termodinamika (hőtan): a fizika energiaátalakulásokkal foglalkozó tudományterülete

termodinamikai rendszer: az univerzum egy jól meghatározott makroszkopikus része

környezet: az univerzumnak a termodinamikai rendszeren kívüli része, amely körülveszi a termodinamikai rendszert

A termodinamikai rendszert és a környezetét egy valós, vagy képzeletbeli fal határolja. A falak csak meghatározott típusú kölcsönhatást engednek meg a környezettel (pl. anyagcsere, munka, hőcsere).



Termodinamikai átalakulások

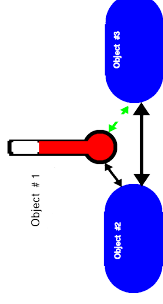
kvázisztatikus átalakulás: az állapot olyan lassan változik, hogy a rendszert minden pillanatban egyensúlyban lévőnek tekintjük

reverzibilis átalakulás: a kezdeti állapotából valamilyen közbülső állapotokon keresztül a végállapotba mozdított termodinamikai rendszer a végállapotból a kezdeti állapotba ugyanazonakon a közbeeső egyensúlyi állapotokon keresztül jut vissza



A termodinamika 0. főtétele

- magára hagyott termodinamikai rendszer egy idő után egyensúlyi állapotba kerül
- egyensúlyban levő termodinamikai rendszer szabadsági foka egyenlő a környezettel lehetséges kölcsönhatások számával
- két termodinamikai rendszer egyensúlyban van, ha a kölcsönhatásukat jellemző intenzív állapothatározók egyenlők
- a termodinamikai egyensúly tranzitív



Termodinamikai állapothatározók

állapothatározók: a termodinamikai rendszer állapotát leíró makroszkopikusan mérhető mennyiségek

extenzív mennyiségek: tartományon értelmezett mennyiségek, termodinamikai rendszerek egyesítésekor összeadódnak (térfogat V, tömeg m, belső energia)

intenzív mennyiségek: pontban értelmezettek termodinamikai rendszerek egyesítésekor kiegyenlítődnek (nyomás p, hőmérséklet T)

állapotegyenletek: az egyensúlyban lévő rendszer állapotfüggvényei között teremtenek kapcsolatot

A termodinamika 1. főtétele

az energiamegmaradás törvénye

zárt termodinamikai rendszer belső energiáját kétféleképpen lehet megváltoztatni: munkavégzéssel és hőközléssel

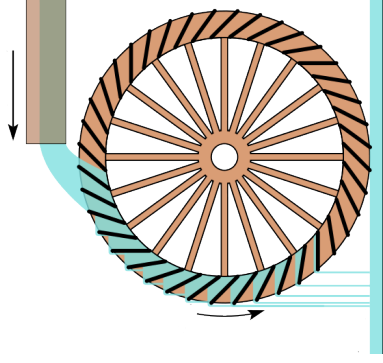
$$\Delta U = Q + W$$

A termodinamika 2. főtétele

a spontán folyamatok iránya

Nincs olyan folyamat, amelynek egyetlen eredménye, hogy hő megy át hidegebb testről melegebbre.

Monotermikus körfolyamat nem végezhet munkát.



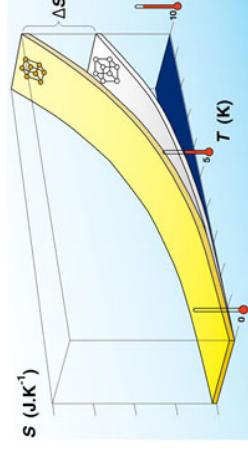
Állapotfüggvények

állapotfüggvények: az állapot-határozók olyan többváltozós függvénye, amelyeknek értéke csak az adott állapottól, megváltozása pedig csakis a kezdeti és végállapottól függ (termodinamikai potenciálok)

A termodinamika 3. főtétele

Az abszolút tiszta kristályos anyagok entrópiája nulla kelvin hőmérsékleten zérus.

Nem lehet a 0K hőmérsékletet véges számú lépésben elérni.



Termodinamikai entrópia

$$dS = \frac{\delta Q}{T}$$

állapotfüggvény
nem megmaradó mennyiség

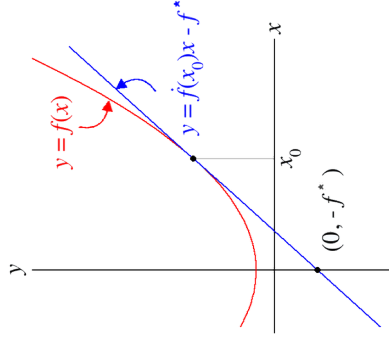


Rudolf Julius Emanuel Clausius
(1822 – 1888)

Legendre transzformáció

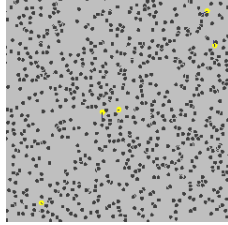
$$f^*(p) = \sup_x (px - f(x))$$

Ha f deriválható, akkor $f^*(p)$ a p meredekségű érintő y tengellyel való metszeteinek negatív értéke.



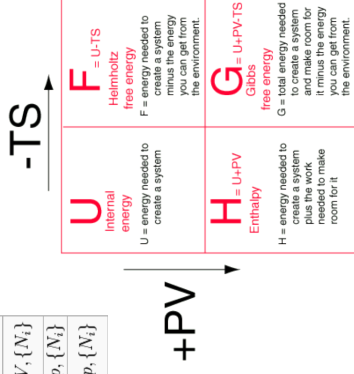
Brown mozgás

Az anyag nem folytonos, hanem részecskékből áll.



Termodinamikai potenciálok

Name	Symbol	Formula	Natural variables
Internal energy	U	$\int (TdS - pdV + \sum_i \mu_i dN_i)$	$S, V, \{N_i\}$
Helmholtz free energy	F	$U - TS$	$T, V, \{N_i\}$
Enthalpy	H	$U + pV$	$S, p, \{N_i\}$
Gibbs free energy	G	$U + pV - TS$	$T, p, \{N_i\}$



Statisztikus mechanika

statisztikus mechanika:

a makroszkopikus rendszerek tulajdonságait értelmezi a valószínűségszámítás és mechanikai eszközeit alkalmazva a mikrovilágra (atomok, molekulák)



Ludwig Eduard Boltzmann
(1844 – 1906)

A mechanika mozgásegyenletei

$$\dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j}$$

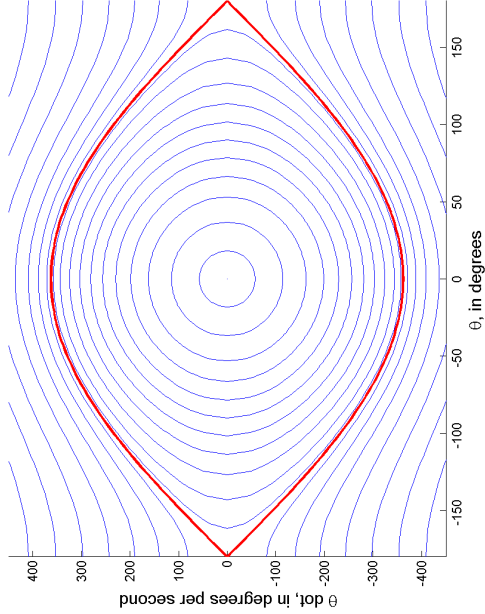
$$\dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j}$$

$$H = K + V$$

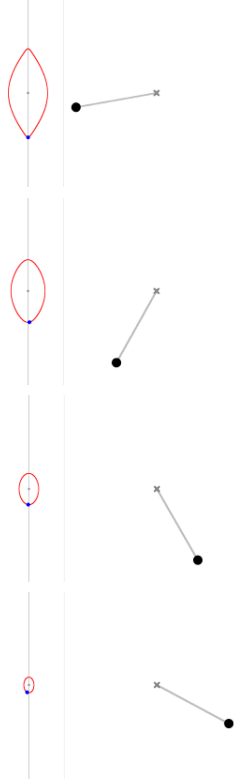
$$K = \frac{p^2}{2m}$$

$$V = V(q)$$

Fázistér



Fázistér



Sokatomos rendszer fázistere

N részecskéből álló rendszer állapotát megadja egy pont a 6N-dimenziós fázistérben q_i koordinátákkal, p_i momentumokkal kifejezve.

Feltéve, hogy az energia (E) állandó, a jellemző pont a fázistérben egy pályát ír le az

$$E(q_i, p_i) = \text{állandó felszínen.}$$

Liouville egyenlet

(q, p) egy konzervatív rendszer valószínűség sűrűség függvénye a fázis térben

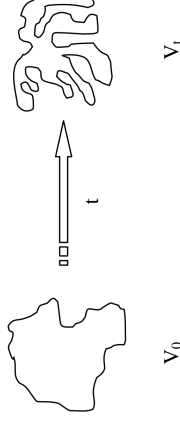
(q, p) $d^n q d^n p$ annak a valószínűsége, hogy a rendszert a (q, p) körüli infinitezimálisan kicsi $d^n q d^n p$ térfogatban találjuk

$(q, p; t)$ -nek a t időbeli fejlődését a Liouville egyenlet adja meg

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum \left(\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) = 0$$

Liouville tétele

Konzervatív rendszerben, ha a fázis tér egy tetszőleges V_0 tartományát, mint kezdeti feltételek halmazát tekintjük, akkor a trajektóriák bármely t pillanatban egy ugyanilyen térfogatú V_t halmazt alkotnak



Josiah Willard Gibbs
(1839 – 1903)

Ergodikus hipotézis

Ergodikus hipotézis: a rendszert jellemző pont pályája a fázis térben az

$E(q_i, p_i) = \text{állandó}$ felszínen mozogva végül a felszín minden pontján keresztül megy.

Kvázi ergodikus hipotézis: a rendszert jellemző pont pályája a fázis térben végül is közel kerül a felszín minden pontjához.

Ergodikus hipotézis

Az ergodikus hipotézis az időre és sokaságra vett átlagolás ekvivalenciáját jelenti. (Egyedi molekula vonatkozások.)

$$\langle f \rangle = \int f d\mu$$

$$\bar{f} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T f(x(t)) dt$$

$$\bar{f} = \langle f \rangle$$

Poincaré visszatérési tétel

Zárt konzervatív rendszerek majdnem minden trajektóriája végtelen sokszor visszatér a kezdőfeltétel tetszőleges ε sugarú környezetébe a fázistérben.



Jules Henri Poincaré
(1854–1912)

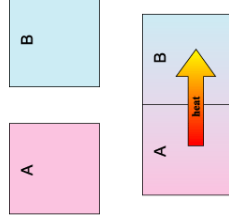
Termodinamikai hőmérséklet

$$\frac{\partial \ln(\Omega_A)}{\partial E} (-dE) + \frac{\partial \ln(\Omega_B)}{\partial E} dE > 0$$

$$\frac{\partial \ln(\Omega_B)}{\partial E} > \frac{\partial \ln(\Omega_A)}{\partial E}$$

$$\beta = \frac{\partial \ln(\Omega)}{\partial E}$$

$$\frac{1}{k_B T} \equiv \beta$$



Termodinamikai hőmérséklet

hőtranszfer iránya a két hőkontaktusba hozott rendszer között

$$P(t_0 + \Delta t) > P(t_0)$$

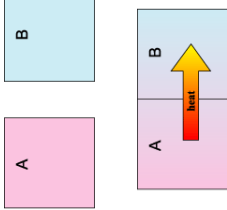
$$\ln(P(t_0 + \Delta t)) > \ln(P(t_0)); P \sim \Omega; \Omega_{AUB} = \Omega_A \cdot \Omega_B$$

$$\ln(\Omega_A(t_0 + \Delta t) \cdot \Omega_B(t_0 + \Delta t)) > \ln(\Omega_A(t_0) \cdot \Omega_B(t_0))$$

$$\ln(\Omega_A(t_0 + \Delta t)) + \ln(\Omega_B(t_0 + \Delta t)) > \ln(\Omega_A(t_0)) + \ln(\Omega_B(t_0))$$

$$\ln(\Omega_A(t_0 + \Delta t)) - \ln(\Omega_A(t_0)) + \ln(\Omega_B(t_0 + \Delta t)) - \ln(\Omega_B(t_0)) > 0$$

$$d \ln(\Omega_A) + d \ln(\Omega_B) > 0$$



Nyomás

Nyomás: a tartály falával ütköző molekulák, a falra erőt fejtenek ki

Az ütközésben a részecske sebességének a falal párhuzamos összetevője változatlan marad, a falra merőleges összetevő iránya ellenkezőjére változik, miközben nagysága ugyanakkora marad.

