

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

Osváth Szabolcs

Semmelweis Egyetem

Tudomány

a tudomány az emberiségnek a világ megismerésére és megértésére irányuló vállalkozása



a szökedencsi hétszáz éves hárs

Matematika

„... Ez a könyv a matematika nyelvén íródott...ami nélkül az ember csak hiába bolyong egy sötét labirintusban.”

A matematika alkalmazásának előnyei:

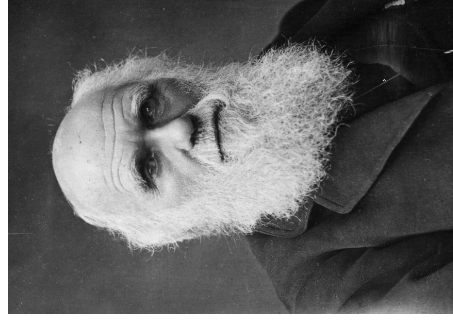
- precíz jósálatok (összevetés egyre kifinomultabb mérésekkel)
- szigorúan levezetések
- absztrakt gondolkodás



Galileo Galilei (1564 – 1642)

Matematika szerepe

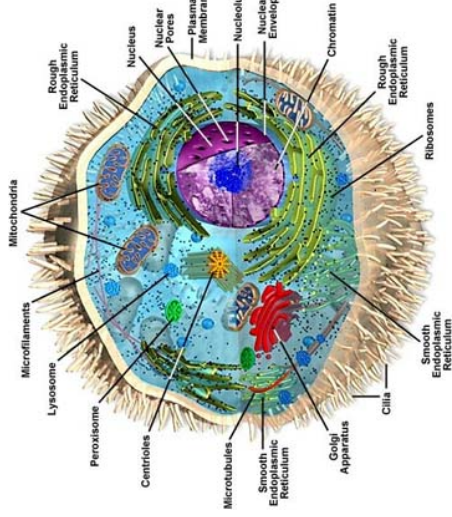
„... in after years I have deeply regretted that I did not proceed far enough at least to understand something of the great leading principles of mathematics, for men thus endowed seem to have an extra sense.”



Charles Darwin (1809 – 1882)

Matematika szerepe

a sejtbológia nagy sikereket ért el matematika alkalmazása nélkül



Matematika szerepe

felismerte a bolygó mozgások törvényszerűségeit – matematikai modellt alkotott



Johannes Kepler (1571 – 1630)

Matematika szerepe

nagy mennyiségű, csillagokra és bolygókra vonatkozó megfigyelést halmozott fel

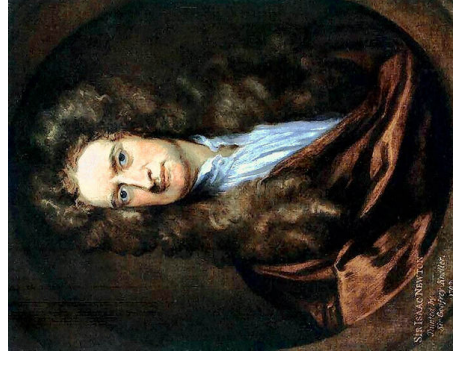


Tycho Brahe (1546 – 1601)

Mechanika

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

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



Sir Isaac Newton (1642 – 1727)

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)



Termodinamikai átalakulások

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

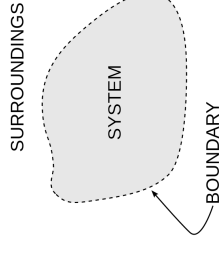
reverzibilis átalakulás: a kezdeti állapotából valamilyen közbülső állapotokon keresztül a végállapotba mozdított termodinamikai rendszer a végállapottól a kezdeti állapotba ugyanazonakon a közbeeső egyensúlyi állapotokon keresztül jut vissza



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 állapothatározók

állapothatározók: a termodinamikai rendszer állapotát leíró makroszkopikusan mérhető mennyiségek

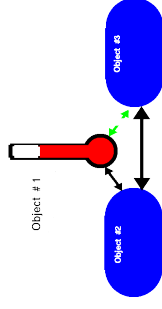
extenzív mennyiségek: tartományon értelmezett mennyiségek, termodinamikai rendszerek egyesítéskor összeadódnak (térfogat V , tömeg m , belső energia)

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

állapotegyenletek: az egyensúlyban lévő rendszer állapotfüggvényei között teremtenek kapcsolatot

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 állapotváltozók egyenlők
- a termodinamikai egyensúly tranzitív

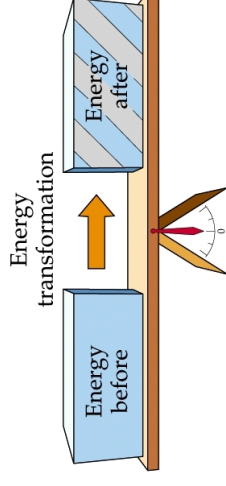


A termodinamika 1. főtétele

az energiamegmaradás törvénye

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

$$\Delta U = Q + W$$

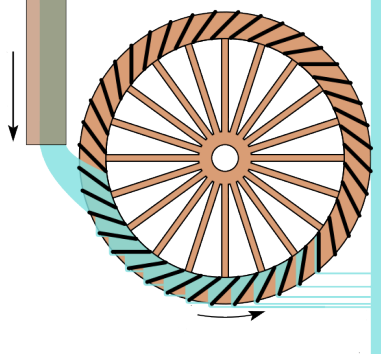


A termodinamika 2. főtétele

a spontán folyamatok iránya

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

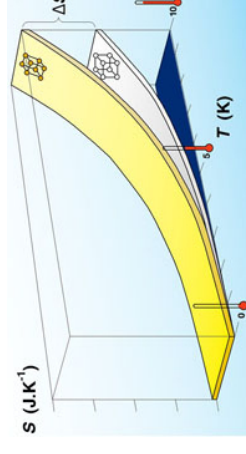
Monotermikus körfolyamat nem végezhet munkát.



A termodinamika 3. főtétele

Az abszolút tiszta kristályos anyagok entrópiája nulla kelvin hőmérsékleten zérus.

Nem lehet a 0K hőmérsékletet véges számú lépésben elérni.



Állapotfüggvények

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

Termodinamikai entrópia

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

állapotfüggvény
nem megmaradó mennyiség

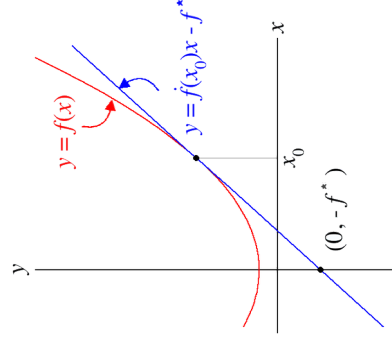


Rudolf Julius Emanuel Clausius
(1822 – 1888)

Legendre transzformáció

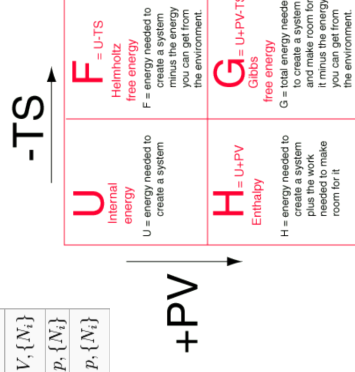
$$f^*(p) = \sup_x (px - f(x))$$

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



Termodinamikai potenciálok

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



A termodinamika 2. főtétele kis rendszerekben

Osváth Szabolcs

Semmelweis Egyetem

Brown mozgás

Az anyag nem folytonos, hanem részecskékből áll.

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

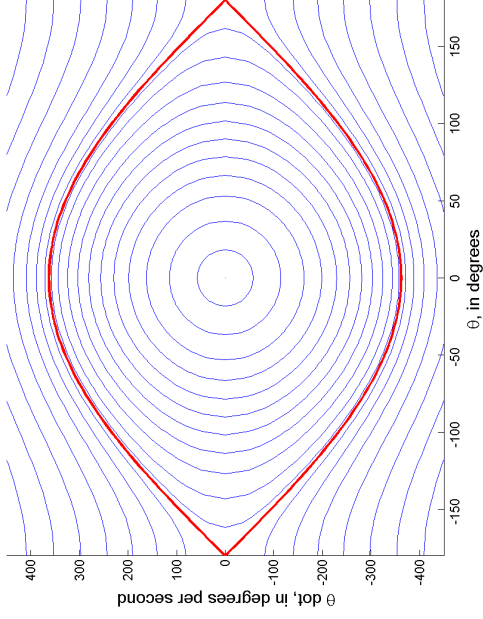
$$\dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j}$$

$$H = K + V$$

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

$$V = V(q)$$

Fázistér



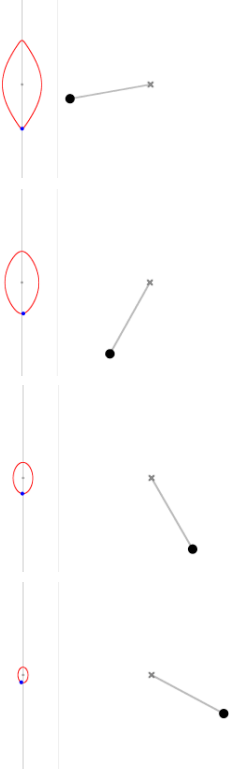
Sokatomos rendszer fázistere

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

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

Fázistér



Liouville egyenlet

$\rho(q, p)$ valószínűség sűrűség függvény a fázistérben

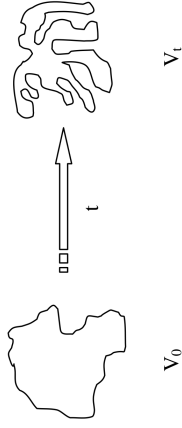
$\rho(q, p)$ $d^n q d^n p$ annak a valószínűsége, hogy a rendszert a (q, p) körütti infinitezimálisan kicsi $d^n q d^n p$ térfogatban találjuk

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

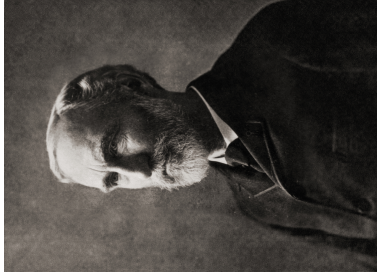
$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum \left(\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) = 0$$

Liouville tétele

Ha a fázistér 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

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

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

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

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

Ergodikus hipotézis

Az izolált rendszert jellemző pont pályája a fázistérben az $E(q_i, p_i) = \text{állandó}$ felszínen (altérben) mozog.

Ergodikus hipotézis:

- Az az idő, amit a rendszer a felszín egy adott tartományában tölt arányos a tartomány térfogatának nagyságával.
- A rendszert jellemző pont pályája a fázistérben az $E(q_i, p_i) = \text{állandó}$ felszínen mozogva véges idő után a felszín minden pontjához tetszőlegesen közel kerül.

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)

