

Konzervatív erőterek

A fizikában kiemelt szerepet játszanak az úgynevezett konzervatív erőterek. Ezek a klasszikus mechanikában fontosak, bár ott inkább csak kivételt képeznek. Viszont az elektromágnesesség, illetve az atomfizika szempontjából ezek válnak alapvetővé.

Az anyagok építőköveiként számon tartott elemi részecskék fizikájában, és így az anyagtudomány megannyi területén kiemelt szerepet kapnak azok az effektív modellek, amelyek a részecskék közötti kölcsönhatásokat potenciál-térben történő mozgásokként értelmezik.

Mint az ebből a kis jegyzetből is kiderül, a konzervatív erőterek, illetve azok potenciálja újra és újra előkerülő fogalmak, és azok számára, akik nem akarnak teljes mélységében belemártózni a kvantummechanika, vagy a kvantumtérelmélet mélységeiben, azok számára az atomi folyamatok, illetve az anyag szerkezetének kialakulásának megértésében kiemelten fontosak.

Jelölések, ábrák

Az összefüggések egyszerűsítése érdekében az egyes parciális derivált jelölések helyett új jelöléseket vezetünk be az alábbi módon:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \partial_x, \quad \frac{\partial}{\partial y} = \partial_y, \quad \frac{\partial}{\partial z} = \partial_z, \quad \frac{\partial}{\partial t} = \partial_t$$

Fontos kiemelni továbbá, hogy az ábrák egy része inkább szemléltető jellegű, nem pontosak. Ennek oka az, hogy ezekkel elsősorban szemléltetni szeretnénk volna az egyes fizikai rendszerek működését. A vállalt pontatlanságok a lényegi tartalmat nem befolyásolják.

Definíció

Első lépésként azonnal kizárjuk az időfüggő erőtereket, vagyis olyan erőhatásokkal foglalkozunk, amelyek expliciten (vagyis formálisan) nem függenek az időtől (természetesen a mozgás koordinátáin, vagy a sebességeken keresztül függhet tőle)

$$\vec{F}(\vec{r}, \vec{v}, t) = \vec{F}(\vec{r}, \vec{v})$$

Ezen túl a Konzervatív erőtér meghatározása többféleképpen is lehetséges. Az általános definíció, amelyet mi is tanítunk a következő:

Meghatározás1: a konzervatív erőtér olyan erőtér, amely esetén igaz, hogy az általa végzett munka csak a pálya két végpontjától függ (a köztük megtett pályától nem)

$$W_{AB} = \int_A^B \vec{F} \cdot d\vec{r} = V(A) - V(B)$$

Praktikus szempontból ez a meghatározás a legfontosabb. Azonban annak eldöntésére, hogy egy meghatározott erőtér konzervatív, vagy sem, mást kell alkalmaznunk. Az alábbi három állítás egyenértékű a fentivel, és egymással is:

Meghatározás2: a konzervatív erőtér olyan erőtér, amelynek a zárt görbe mentén az integrálja minden görbére zérus

$$\oint \vec{F} \cdot d\vec{r} = 0$$

Meghatározás3: a konzervatív erőtér olyan erőtér, amelyhez található olyan $V(\vec{r}, \vec{v})$ potenciális energia, amelynek az erőtér negatív gradiense, vagyis

$$\exists V : \vec{F} = -\text{grad} V$$

Meghatározás4: a konzervatív erőter rotációmentes

$$\text{rot } \vec{F} = 0$$

Bebizonyítható, hogy a négy meghatározás egyenértékű egymással. A bizonyítás hosszadalmas, és egyes lépései eléggé technikásak, néhány egyszerűbb bizonyítást azonban itt bemutatunk, bár azoknak nem minde technikai részletét.

Bizonyítás1: Ha egy erőterre a második meghatározás igaz, akkor automatikusan a harmadik is igaz lesz:

- Legyen V az \vec{F} erőter potenciálja, vagyis

$$\vec{F} = -\text{grad } V = -\begin{pmatrix} \partial_x V \\ \partial_y V \\ \partial_z V \end{pmatrix} \quad \text{ekkor} \quad \text{rot } \vec{F} = \begin{pmatrix} \partial_y F_z - \partial_z F_y \\ \partial_z F_x - \partial_x F_z \\ \partial_x F_y - \partial_y F_x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\partial_y \partial_z V + \partial_z \partial_y V \\ -\partial_z \partial_x V + \partial_x \partial_z V \\ -\partial_x \partial_y V + \partial_y \partial_x V \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

ahol az utolsó lépésben felhasználtuk a tényt, hogy a parciális deriváltak egymással felcserélhetőek.

Bizonyítás2: Ha az 1. meghatározás igaz, abból automatikusan következik a 2. megfogalmazás:

$$\oint \vec{F} \cdot d\vec{r} = W_{AA} = \int_A^A \vec{F} \cdot d\vec{r} = V(A) - V(A) = 0$$

Bizonyítás3: Ha a 2. meghatározás igaz, akkor a negyedik abból kiszámolható a Stokes-tétel segítségével (ezt az első egyenlőségénél fogjuk alkalmazni): egy tetszőleges ν vektorra igaz, hogy ha azt egy g görbe mentén körbeintegráljuk, akkor az integrál átírható egy, a g görbe által körülfogott F felületre vett felületi integrállá az alábbi formában:

$$\oint_g \vec{\nu} \cdot d\vec{r} = \iint_F \text{rot } \vec{\nu} \cdot d\vec{A}.$$

Ha ezt az F erőre tekintjük, akkor

$$\oint \vec{F} \cdot d\vec{r} = \iint \text{rot } \vec{F} \cdot d\vec{A} = 0, \quad \text{és mivel minden görbére a körintegrál zérus, ezért } \text{rot } \vec{F} = 0.$$

És így tovább.

Potenciális energia, potenciál, energia-megmaradás

A konzervatív erőterek egy fontos tulajdonsága, hogy definiálható hozzájuk egy V potenciális energia, amely az erőter energiaviszonyait egyértelműen jellemzi. Sőt, mivel ennek gradiense meghatározza az erő vektorát minden helyen és időpillanatban, ezért ennek segítségével minden megmondható az erőter viselkedéséről.

Megjegyzendő, hogy a különböző kölcsönhatásokhoz meghatározható egy „potenciál” nevű mennyiség is, amelyben a próbatestre ható erők hatását vizsgáljuk. Ekkor a gravitációs erőter potenciálja felírható, mint a potenciális energia és a próbatest tömegének hányadosa, de például elektrosztatikában a töltéssel kell osztanunk, hogy a potenciál fogalmát meghatározhassuk.

Ezen fogalmak egyik problémája (bár nagy előnyük, hogy nem kell a próbatest tulajdonságait is ismernünk), hogy minden kölcsönhatás esetén más és más mennyiséget kapunk, más és más mértékegységgel. A gravitáció esetén ez J/kg , míg az elektrosztatikában J/C . Éppen ezért mi mindenhol a potenciális energiát fogjuk vizsgálni, aminek további előnye, hogy a mindennapi tapasztalatokhoz is közelebb áll.

Többfajta konzervatív erőterrel találkoztunk már a korábbi tanulmányok során, ezek konkrétan:

- súlyerő

- gravitációs erő
- rugóerő
- Coulomb-erő

illetve a Lenard-Jones potenciál mögött is egy konzervatív erőter áll.

Nagyon fontos továbbá a konzervatív erőterek esetén az energia-megmaradásnak a kifejeződése, a mechanikai energia-megmaradás, mely szerint konzervatív erőterben a mozgási és potenciális energiák összege a mozgás során állandó. Ez a munkatételből egyszerűen kiszámolható, a mozgás kiindulópontját A-val, végpontját pedig B-vel jelölve:

$$\left. \begin{aligned} W_{AB} = \Delta E_k &= \frac{1}{2}mv^2(B) - \frac{1}{2}mv^2(A) \\ W_{AB} &= \int_A^B \vec{F} \cdot d\vec{r} = V(A) - V(B) \end{aligned} \right\} \Rightarrow \frac{1}{2}mv^2(B) - \frac{1}{2}mv^2(A) = V(A) - V(B)$$

vagyis

$$\frac{1}{2}mv^2(B) + V(B) = \frac{1}{2}mv^2(A) + V(A)$$

A kinetikus és potenciális energiák összegét nevezzük mechanikai energiának, vagyis

$$E_M = \frac{1}{2}mv^2 + V.$$

A mechanikai energia, a kinetikus és potenciális energiák olyan fogalmi kört adnak, amelyek segítségével a konzervatív erőterben történő mozgás nagyon sok sajátossága megérthető, sőt, nagyon sok tulajdonság konkrétan számolhatóvá is válik anélkül, hogy az erőhatásokat, vagy azokból integrálva a testek pályáját ismernünk kellene.

Súlyerő

Bevezető példaként nézzük meg a legegyszerűbb példát, a súlyerőt! Vegyünk egy Descartes-

koordinátarendszert a térben, a súlyerő mutasson függőlegesen lefelé! Ehhez a $V = mgz$ potenciális energia tartozik. A fentiek alapján az erőhatás: $\vec{F} = -grad V = - \begin{pmatrix} \partial_x V \\ \partial_y V \\ \partial_z V \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -mg \end{pmatrix}$, ahogy azt várjuk.

Vegyük most ennek a rotációját!

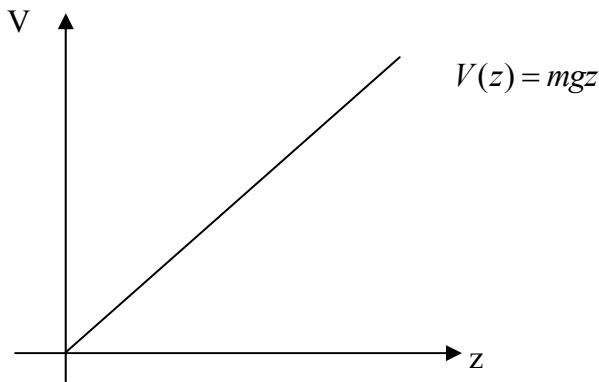
$$rot \vec{F} = \begin{pmatrix} \partial_y F_z - \partial_z F_y \\ \partial_z F_x - \partial_x F_z \\ \partial_x F_y - \partial_y F_x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial_y F_z \\ \partial_x F_z \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Tekintsük a munkavégzést az A és B pontok között, ahol az A pont koordinátái (x_A, y_A, z_A) , a B pont koordinátái (x_B, y_B, z_B) :

$$W_{AB} = \int_A^B \vec{F} \cdot d\vec{r} = \int_A^B (F_x dx + F_y dy + F_z dz) = \int_{x_A}^{x_B} F_x dx + \int_{y_A}^{y_B} F_y dy + \int_{z_A}^{z_B} F_z dz = 0 + 0 - \int_{z_A}^{z_B} mg dz = mg(z_A - z_B)$$

Ebből jól látszik, hogy az integrál értéke csak a két végpont koordinátáitól függ, ahogy az is látszik, hogy a potenciális energia $V=mgz$, és $W_{AB}=V(A)-V(B)$. És persze ebből triviálisan adódik, hogy a körintegrál értéke zérus.

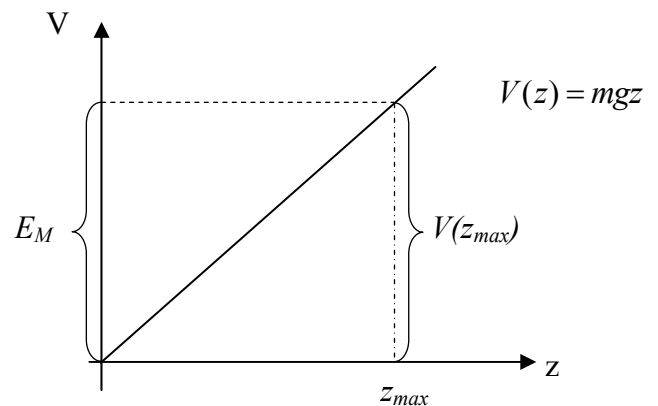
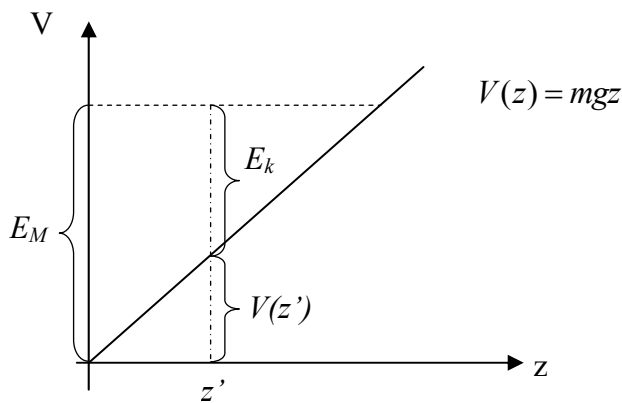
Rajzoljuk most fel a potenciális energiát a z koordináta függvényében!



Az ábra lehetőséget ad arra, hogy egy E_M mechanikai energiával rendelkező test mozgását megvizsgáljuk, és kiderítsük, milyen magasra juthat, vagy éppen adott magasságban mekkora a mozgási energiája, lévén

$$E_M = E_k + V = \frac{1}{2}mv^2 + mgz$$

Továbbá, fontos megjegyezni, hogy mivel a tömeg értéke pozitív, és a sebesség négyzete is az, az E_k mozgási energia mindenképpen nem-negatív kell legyen.



Tekintsünk egy olyan tömegpontot, amely meghatározott E_M mechanikai energiával rendelkezik. A $V(z)$ potenciál ábrájába ezt beírtuk, és ezzel a mozgás több fontos tulajdonságát is fel tudjuk tárni. A legáltalánosabb esetben tekintsük a z' magasságot, és nézzük meg, hogy milyenek itt az energiaviszonyok! Jól látható, hogy a potenciális energiát bemutató görbe és a vízszintes tengely közötti szakasz mutatja meg a potenciális energia konkrét értékét az adott magasságon, a felette lévő rész pedig az $E_k = E_M - V(z')$ értékű mozgási energiát.

Mivel a mozgási energia nem lehet negatív, ezért a fenti módszer ki is jelöli a maximális magasságát ennek a mozgásnak, ez látható a jobb oldali képen. Itt a mozgási energia értéke zérus, az összes mechanikai energia a maximális magassághoz tartozó helyzeti energiával egyenlő, mint azt a feladatok esetén láthatjuk.

Továbbá, jól látszik a mozgás legalacsonyabb pontjának sajátossága is, itt ($z=0$) az összes mechanikai energia a mozgási energiával egyenlő.

Bár a súlyerő esetében ezek triviális eredmények, fontos őket ilyen módon is bemutatni, mert hasonló módszert fogunk alkalmazni a többi erőter megvizsgálása esetében is, hogy meghatározzuk a mozgás néhány jellemző tulajdonságát. És ezen erőterek esetén nem mindig egyszerűek a konkrét számolások, míg egy ilyen vizualizáció segítségével sokat megtudhatunk a kiszemelt potenciáltérben történő mozgás tulajdonságairól.

Centrális erők

A fizikában – ahogy a most bemutatásra kerülő erők esetében is – gyakran találkozunk olyan erőhatásokkal, amelyeknél az erővektor mindig egy meghatározott centrum felé (vagy onnantól elfelé) mutat. Ezeket nevezzük centrális erőknek.

Ezek közé tartoznak a gravitáció, a Coulomb-erő és a részecskék közötti kölcsönhatásokat effektíven leíró modellek erőhatásai is.

Gravitációs erőtér

Első példaként vizsgáljuk meg a gravitációs erőtérét! Ennek előnye, hogy alakilag nagyon hasonlít a legtöbb centrális, konzervatív erőtérre, viszonyt csak vonzó erőhatás. Emellett a csillagászati mérések pontossága lehetővé teszi, hogy nagyon nagy pontossággal értékeljük ki a gravitációs erőtérben való mozgás tulajdonságait.

A gravitációs erő a szokásos newton-i gravitációs erőtörvénnyel írható le (ahol az \mathbf{r} vektor a két testet összekötő vektor, iránya a vonzást kifejtő test felől mutat):

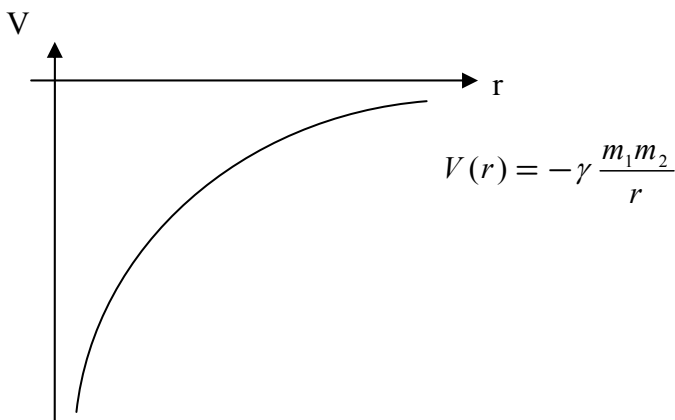
$$\vec{F} = -\gamma \frac{m_1 m_2}{r^2} \frac{\vec{r}}{r}$$

Az ehhez tartozó potenciális energia kifejezése a következő:

$$V(r) = -\gamma \frac{m_1 m_2}{r}$$

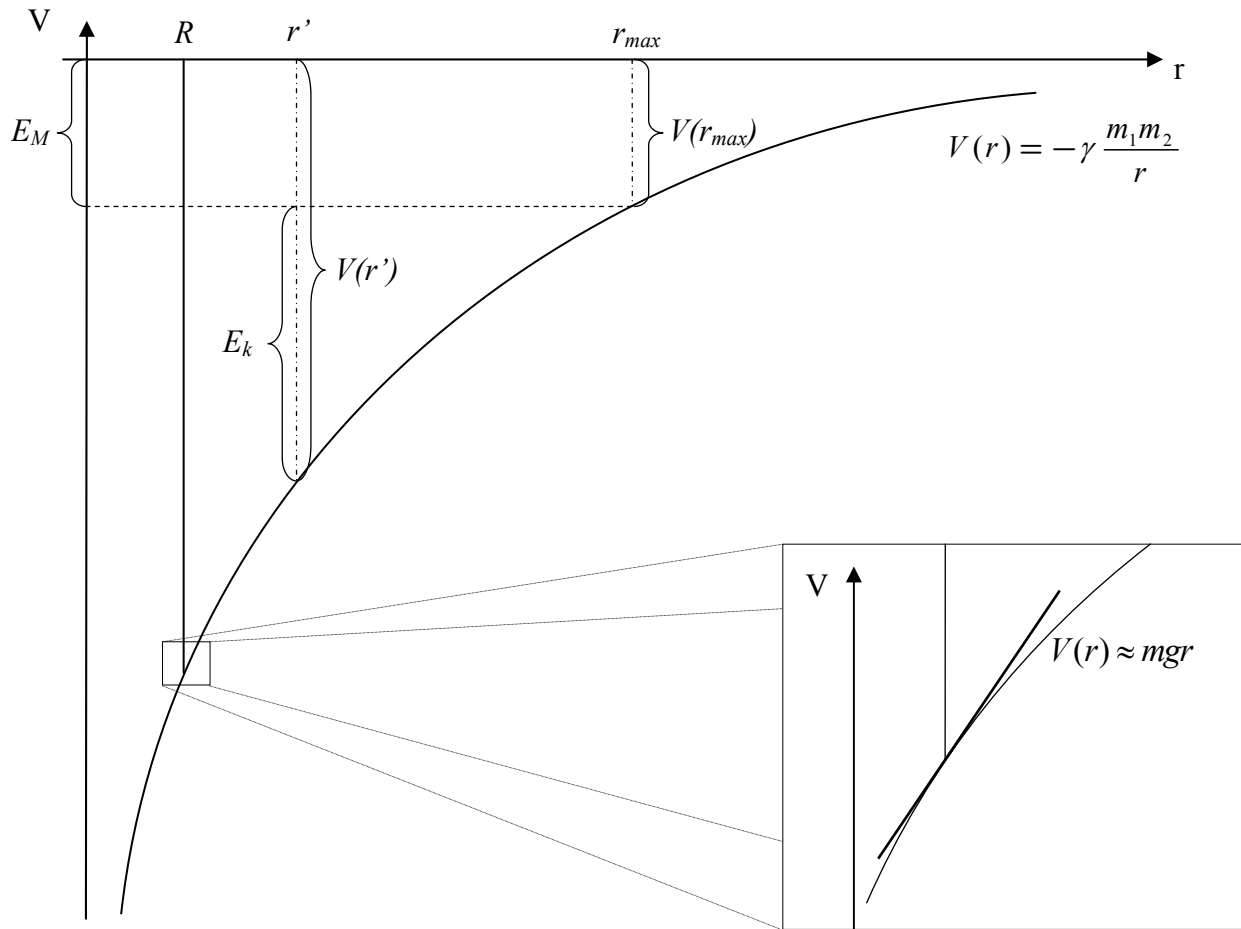
A fenti tételek bizonyítása eléggé technikás ebben az esetben, mert a számolásokat nem az (x, y, z) Descartes-féle koordináta-rendszerben alkalmas elvégezni (tudván, hogy $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$), hanem gömbi koordináta-rendszerben, ez azonban az anyagban nem szerepel.

Azonban belátható, hogy a gravitációs erőtér konzervatív, és az erő alakjából is látható, hogy centrális. Rajzoljuk fel ennek az erőtérnek a potenciális energiáját az r távolság függvényében! Megjegyzendő, hogy a $V=0$ értéket a végtelen távoli pontba vettük fel, itt jól látható, hogy milyen megfontolásból.



Ismét vizsgáljuk meg egy E_M mechanikai energiával rendelkező test mozgását, figyelembe véve, hogy az E_k mozgási energia mindenképpen nem-negatív. Most azonban a mechanikai energia értéke negatív is lehet, vagy pozitív, illetve zérus.

Vizsgáljuk meg először a negatív mechanikai energiájú esetet!



Ismét igaz, hogy tekintve a pálya egy r' helyzetű pontját könnyedén felmérhetőek az energia-viszonyok. Láthatóan ebben a pontban negatív az összes mechanikai energia, ahogy a potenciális energia értéke is. Viszont az is látható, hogy a $E_k = E_M - V(r')$ mozgási energia ez esetben pozitív lesz, vagyis ténylegesen eljut erre a pontra a tömegpontunk.

Az ábrán jól látható, hogy E_M konkrét értéke meghatározza a pálya legmagasabb pontját (r_{max}), azt a pontot, ahol a mozgási energia nullává válik. Ennél magasabbra a test nem juthat (negatív lenne a mozgási energiája), ezért kötött pályán mozog. Centrális erőterben, ha keringésről van szó, ez ellipszispályát jelent, vagy elfajult esetben körpályát. Egyébként pedig különféle hajításokként írhatóak le a mozgások, a testek távolodnak a vonzócentrumtól, majd visszafelé kezdenek esni.

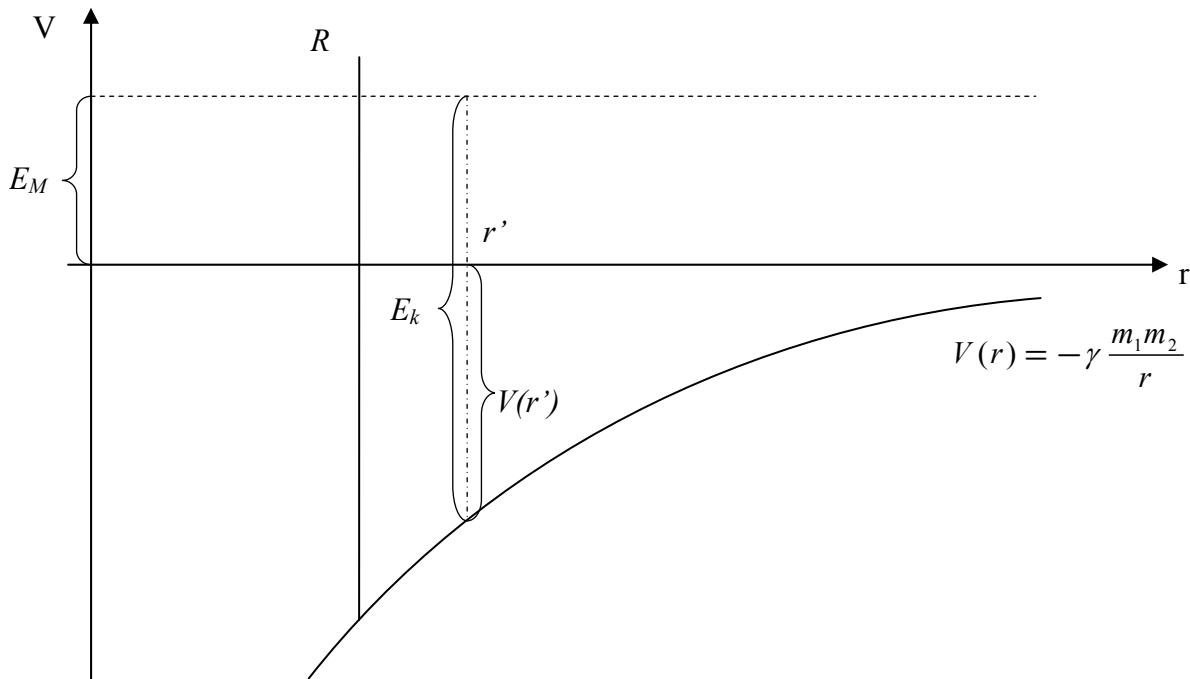
A mozgás többi pontjában pedig mindig felmérhető, hogy a test milyen magasan van, és ahhoz milyen sebesség tartozik.

Fontos kiemelni egy-két dolgot az ábra alapján. Ha a Földről beszélünk, annak a gravitációs vonzását vizsgáljuk, fontos megjegyezni, hogy a felrajzolt potenciálfüggvény csak a Föld felszínéig pontos (ennek helyzetét R sugárral jellemezhetjük), az alatt (mivel a vizsgált tömeg is csökken) másképpen néz ki (valójában ez minden kiterjedt testre így igaz). Ez azonban a vizsgálódásainkat nem befolyásolja, a felszín feletti tartományra szorítkozunk.

Egy másik megjegyzés a súlyerőre vonatkozik. Az ábrán a Föld felszínének közelében a potenciális energiát egy egyenessel közelítjük (lásd kiegészítő ábra). Ez lényegében kis magasságban megfelel a súlyerőhöz tartozó potenciális energia mgh kifejezésének. Jól látható azonban, hogy ez csak egy nagyon kis tartományon lesz igazán jó közelítés.

Fontos kiemelni egy itt fellépő alapfogalmat. Ha egy test nem képes egy vonzó centrumtól tetszőleges távolságba elmenni, akkor azt kötött állapotban lévőnek tekintjük.

Nézzük most azokat a mozgásokat, ahol E_M értéke pozitív!



Az ábrán jól látható, hogy a test mozgási energiája sehol sem nulla, ezért ő nyílt pályán mozog, és bizony, el is távolodik a Földtől (amíg a gravitáción kívül más erő nem kezd hatni rá). Az ilyen testek, ha kívülről érkeznek a gravitációs centrum közelébe, hiperbolikus pályán mozognak el körülötte.

A nyílt pályák speciális esete az, amikor $E_M=0$. Ebben az esetben is nyílt pályán mozog a test, és csak egy elképzelt végtelen távoli pontban lesz a mozgási energiája zérus. Ezek a testek parabolikus pályán mozognak a centrum körül, ha kívülről érkeznek annak közelébe.

Mivel a pozitív mechanikai energiával rendelkező részecskék tetszőleges távolságba elmehetnek a vonzócentrumtól, azokat nem tekinthetjük kötöttnek, szabad részecskéknek hívjuk őket.

Ide tartozó megjegyzésként fontos kiemelni, hogy a fentiek alapján jól látható, hogy ha a gravitáció helyett a súlyerőt vesszük figyelembe, ott mindenképpen csak kötött állapotokat találhatunk. Ez a potenciális energia kifejezésének köszönhető, és azt is megmutatja, miért nem jó ez a modell, ha nagy magasságokban akarjuk értékelni a gravitációs térben történő mozgást.

Végezetül rajzoljuk fel, hogy a potenciális energia kifejezése hogyan változik, ha egyre nagyobb vonzó centrumokat feltételezünk, de ugyanahhoz a próbatesthez!

A Coulomb-erő

Két, egymástól adott távolságra elhelyezkedő ponttöltés közötti erőhatást a Coulomb-erő ír le (ahol az \mathbf{r} vektor a két testet összekötő vektor):

$$\vec{F}_C = k \frac{q_1 q_2}{r^2} \frac{\vec{r}}{r},$$

az ehhez tartozó potenciális energia kifejezése pedig

$$V(r) = k \frac{q_1 q_2}{r}.$$

A konzervatív erőterekre vonatkozó tételek alkalmazásától itt is eltekintünk, a lényegi elem az, hogy a fenti potenciális energia kifejezés jól definiált, az erőtér konzervatív, és már a Coulomb-erő kifejezéséből is jól láthatóan centrális.

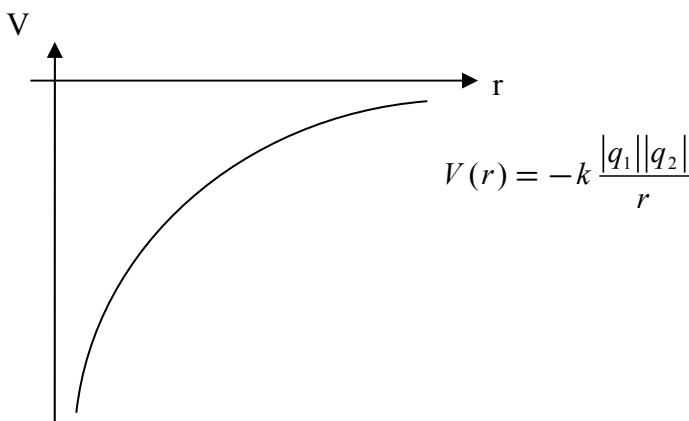
A fenti kifejezés nagyban hasonlít a gravitációs erőtörvénynél tárgyaltakra. Új mozzanat ebben az esetben, hogy a töltések lehetnek pozitívak vagy negatívak, és ettől függően a kölcsönhatás lehet vonzó (ellentétes előjelű töltések esetén), vagy taszító (megegyező előjelű töltések között). Ezt a két esetet külön fogjuk tárgyalni.

Emiatt a kettősség miatt fontos kiemelni még egy dolgot. A potenciál kifejezése csak az egyik töltés előjelétől függ, de a potenciális energia kifejezésében mindkét töltés szerepel, és mivel a kiértékelés során mi a potenciális energiát választottuk, így annak az előjelével fogunk foglalkozni.

Rajzoljuk fel a ponttöltés elektrosztatikus mezejének a potenciális energiáját az r távolság függvényében, abban az esetben, amikor a két töltés ellentétes előjelű, vagyis közöttük a kölcsönhatás vonzó, és a potenciális energia kifejezése

$$V(r) = -k \frac{|q_1||q_2|}{r}.$$

Megjegyzendő, hogy ebben az esetben is a $V=0$ értéket a végtelen távoli pontba vettük fel.



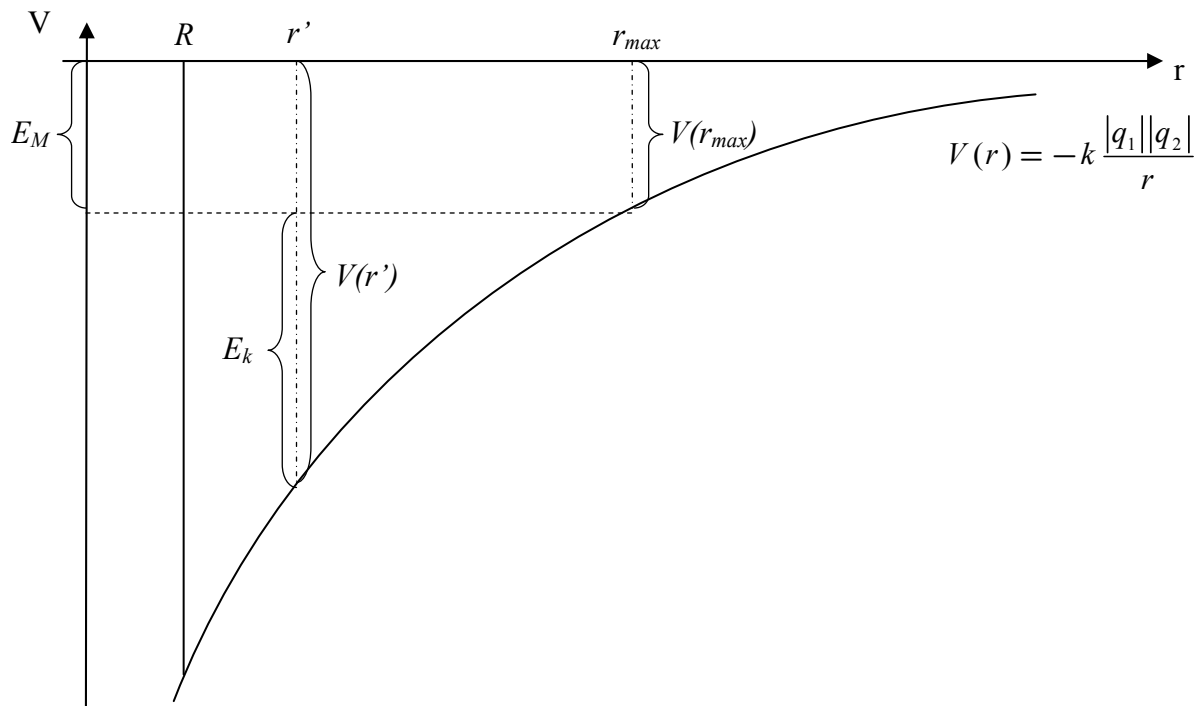
A gravitációs kölcsönhatás esetében elvégzett vizsgálatokat megismételve ugyanazokra a következtetésekre jutunk, ugyanazokat a sajátosságokat tapasztaljuk, mint ott.

Ha a mechanikai energia negatív, kötött állapotot kapunk, a vizsgált töltés nem képes tetszőleges távolságra távolodni a vonzó centrumtól. Létezik egy maximális távolság, ahol a mozgási energia zérussá válik.

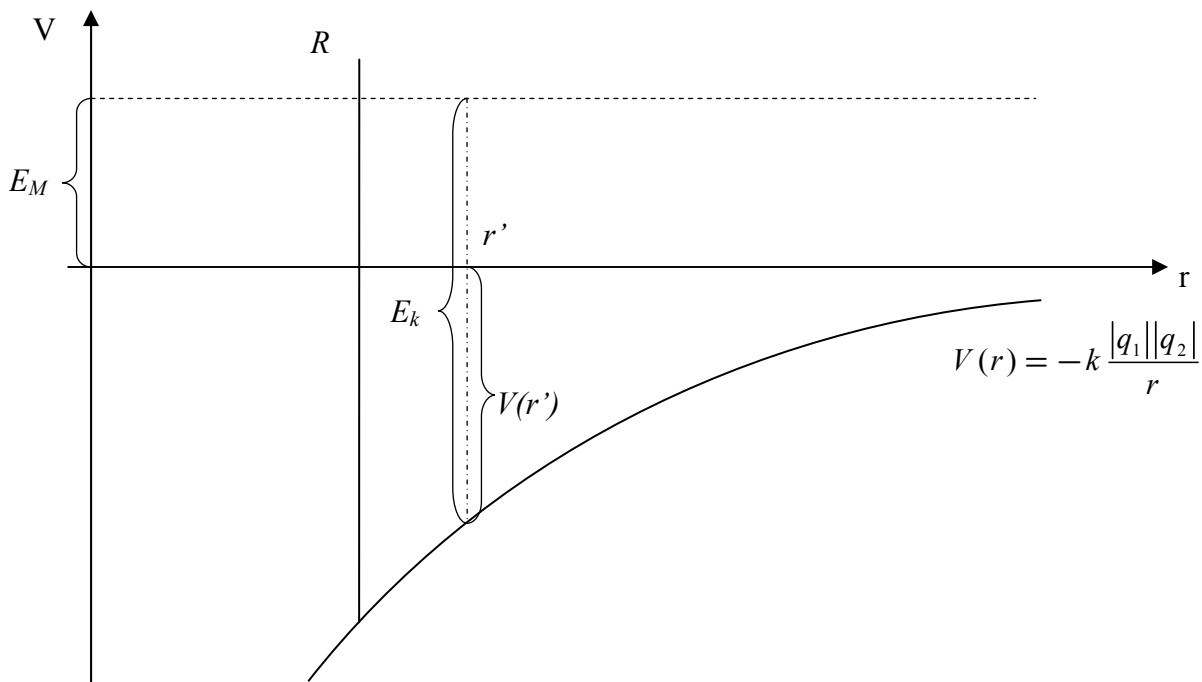
Pozitív (illetve zérus) összenergia esetén a részecske szabadon eltávolodhat a másik töltéstől, mozgási energiája sehol sem zérus (vagy csak egy végtelen távoli pontban válik azzá).

Nézzük a korábbi két ábrát a jelen helyzetre vonatkoztatva!

Negatív energia esetén:



Pozitív energia esetén:

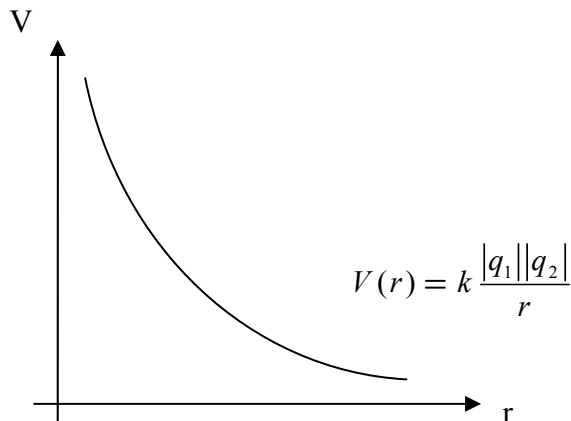


Az ábrákon ebben az esetben is fel lett tüntetve egy határvonal, egy minimális sugár, amely alatt már nem érvényes a Coulomb-erő, pontosabban fogalmazva azt már hatások is befolyásolják. Ha két töltés nagyon közel kerül egymáshoz, akkor a közöttük lévő elektrosztatikus vonzás mellett fellépnek olyan kvantummechanikai hatások is, amelyek taszító jellegűek, és ezek egyfajta „kiterjedést” adnak a részecskének, azok nem eshetnek egymásba. Később ezt a mondatot pontosítani fogjuk, jelenleg az elegendő, hogy az R -rel jelölt sugár a potenciális energia fenti kifejezésének érvényességi határa.

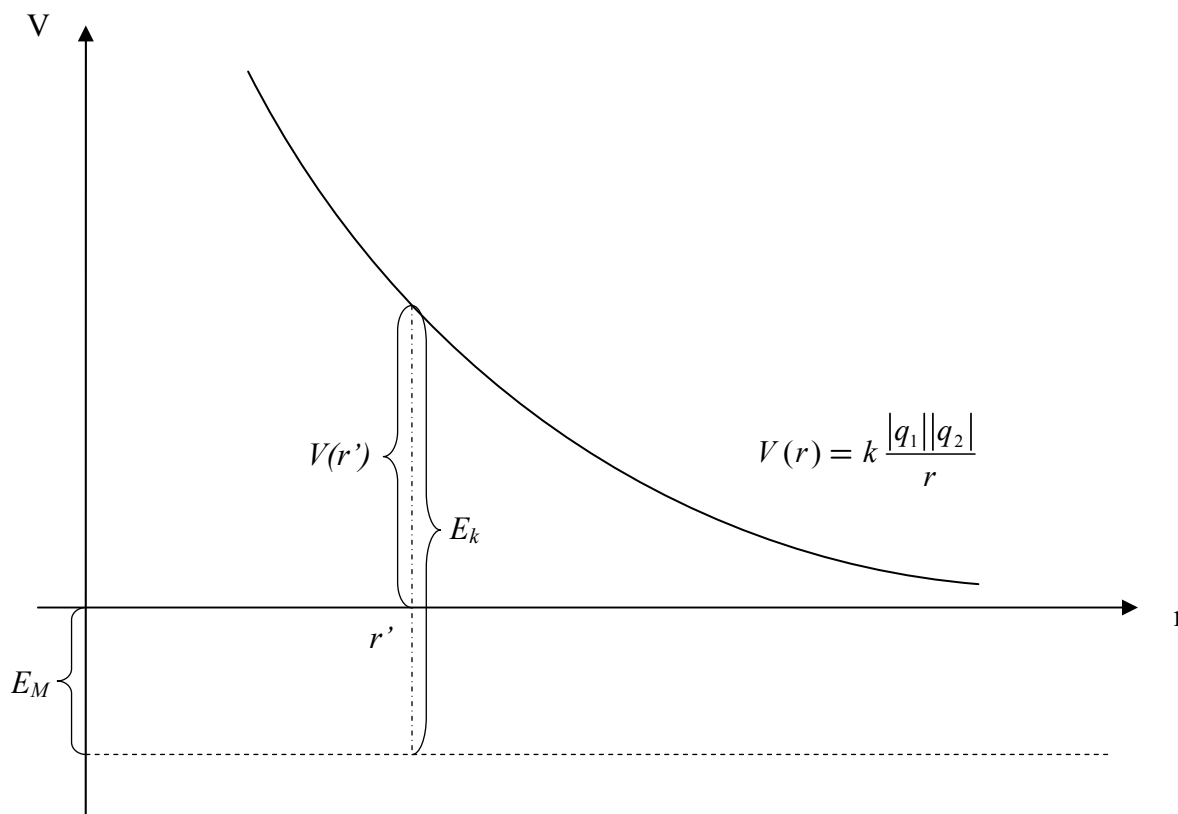
Rajzoljuk fel a potenciális energiát újra, most azonos előjelű töltések esetében! Ekkor a potenciális energia kifejezése

$$V(r) = k \frac{|q_1||q_2|}{r} \quad \text{lesz.}$$

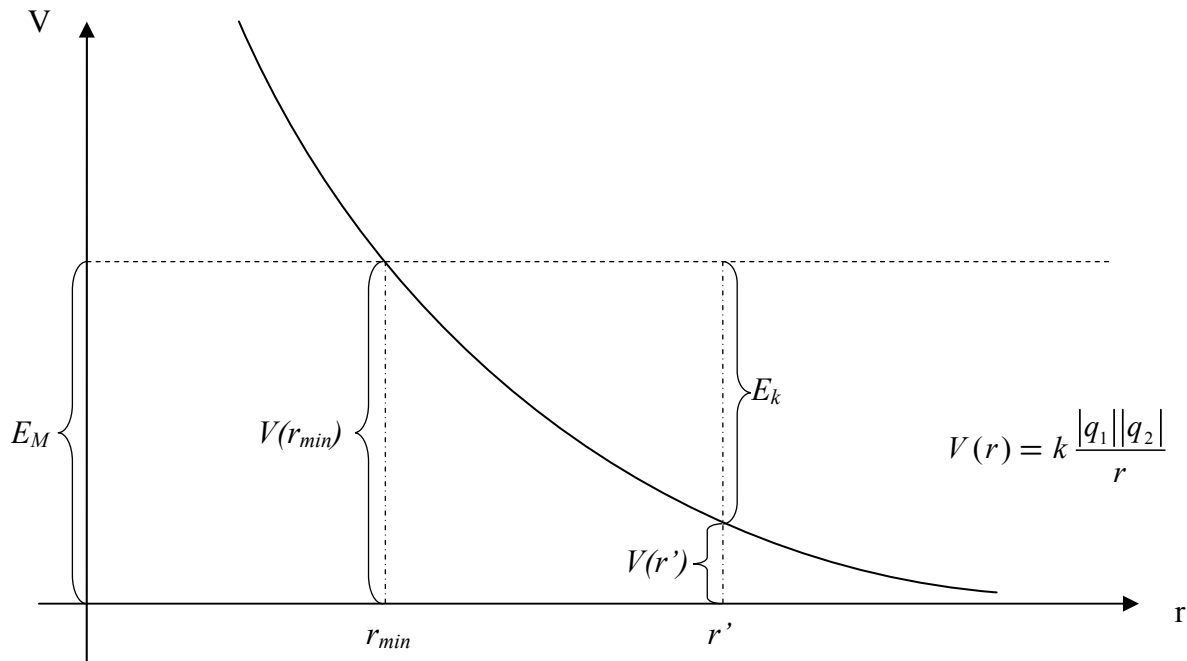
A potenciál $V=0$ értékét ismét a végtelen távoli pontba választottuk.



Nézzük meg, hogy egy negatív E_M energiával rendelkező töltés hogyan mozogna ebben a potenciáltérben.



Jól látható, hogy egy ilyen potenciáltérben nincs negatív energiájú állapot, az energia mindenképpen pozitív. Mivel a potenciális energia mindenhol pozitív, az E_M energia csak akkor lehet negatív, vagy zérus, ha a mozgási energia negatív. Ez azonban nem lehetséges, így csak a pozitív energiájú esettel érdemes foglalkozni.



Ebben az esetben már követhetjük a szokásos menetrendet, és a vonzócentrumtól r' távolságban lévő részecske energiaviszonyait meg tudjuk vizsgálni, ki tudjuk számolni a sebességét.

Jól látható, hogy ez esetben minden pozitív energiájú részecske szabad, bármilyen távolra elmozoghat a centrumtól. Ez persze arra gondolva, hogy taszító kölcsönhatásról van szó, könnyedén megérthető.

Viszont az ábrán is látszik, hogy van egy olyan r_{min} távolság, amelynél közelebb nem kerülhet az E_M energiával rendelkező töltés a másikhoz, mert akkor a mozgási energiája negatívvá válna.

Ezt úgy is megfogalmazhatjuk, hogy az r_{min} távolság a másik töltés által érzékelt sugara a centrumban elhelyezett töltésnek. Jól láthatóan ez függ az összenergiától, de soha nem zérus. Vagyis egyik töltés nem közelítheti meg tetszőlegesen a másikat, előbb-utóbb lepattan annak elektrosztatikus mezejéről.

Végezetül rajzoljuk fel, hogy a potenciális energia kifejezése hogyan változik, ha egyre nagyobb vonzó centrumokat feltételezünk, de ugyanahhoz a próbatesthez (a taszító és a vonzó potenciálokat ugyanazon az ábrán szemléltetjük)!

A Coulomb-erő vizsgálatának haszna kettős. Egyrészt ez írja le az anyagtudományok egyik legfontosabb jelenségét, a két töltés közötti erőhatást. Másrészt az ennél bonyolultabb kölcsönhatások kiértékeléséhez is megadja a szükséges kulcsokat.

Az anyagtudomány legfontosabb elemi kölcsönhatásai mind olyan potenciálokkal írhatóak le, amelyek $1/r^n$ jellegűek, vagy ilyenek összegei/különbségei attól függően, hogy vonzó és/vagy taszító komponenseik milyenek. Ezen potenciálok konkrét matematikai leírása sokszor nagyban különbözhet egymástól, de a görbék jellege mindenhol a fenti két görbééhez hasonló (még ha némely tulajdonságuk nagyon más is). A fentiekben bevezetett fogalmak azok, amelyek segítségével egy összetettebb potenciáltérben történő mozgást is meg tudunk vizsgálni. Ennek alapja az, hogy a konzervatív erőterek potenciáljai (egy-egy részecske potenciális energiái) összeadódnak.

Rugóerő

Mielőtt azonban ezekre rátérnénk, nézzük meg egy, a tanulmányok során rendszeresen előkerülő erőter viselkedését, a rugóerőt. Ez különösen fontos, mert a harmonikus rezgések mind hasonló potenciáltérben történő mozgásként értelmezhetőek, értelmezendőek.

A rezgőmozgás egy egy dimenziós mozgás, amelyben a rugóerő arányos az egyensúlyi állapottól (a rugó nyújtatlan) való kitéréssel, vagyis

$$\vec{F}_R = -D\vec{x},$$

és az ehhez tartozó potenciális energia kifejezés

$$V(x) = \frac{1}{2} Dx^2.$$

A konzervatív erőterekre vonatkozó feltételek ellenőrzését az olvasóra bízunk. Fontos viszont ennek a potenciálnak a kiértékelése. A potenciális energia egy pozitív irányítású parabola, melynek csúcspontja az origó. Ebből adódóan nincs negatív mechanikai energiájú állapot, másrészt minden állapot kötött, a rugó végére erősített részecske semmiképpen sem hagyhatja el a potenciál által határolt teret.

Természetesen ez is közelítés, lévén egy konkrét rugó esetén nem teljesül, hogy végtelenül megnyújtható, vagy összenyomható, ahogy az sem igaz, hogy a direkciónál állandója tényleg állandó. Fontos azonban, hogy az ilyen, négyzetes potenciálokban harmonikus rezgőmozgást végeznek a testek – és ez a rugóra akasztott test modelljétől függetlenül is így van.

Lenard-Jones potenciál

A Fizika tárgy anyagában a reális gázoknál tanultunk a Lenard-Jones potenciálról. Ott érintőlegesen szerepelt csak, háttér-információként arra vonatkozóan, hogy az ideális gáz egyenletéhez képest bevezetett korrekcióknak mi a forrása. Ezt most részletesebben is megvizsgáljuk, egyrészt az ott tanultak alátámasztására, másrészt azért, mert nagyon sok kölcsönhatás viselkedik hasonlóan ehhez a potenciálterhez. Olyannyira, hogy a molekulák és a nemesgázok kölcsönhatásait is ezzel a potenciállal írhatjuk le.

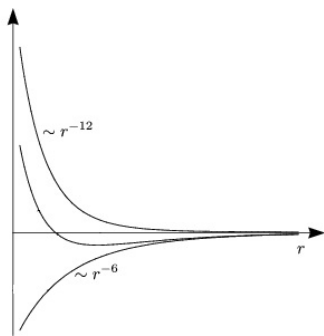
Maga a potenciál egy $1/r^6$ jellegű vonzó és egy $1/r^{12}$ jellegű taszító potenciál összege, vagyis beírva a megfelelő együtthatókat a potenciál alakja

$$V(r) = -\frac{A}{r^6} + \frac{B}{r^{12}}.$$

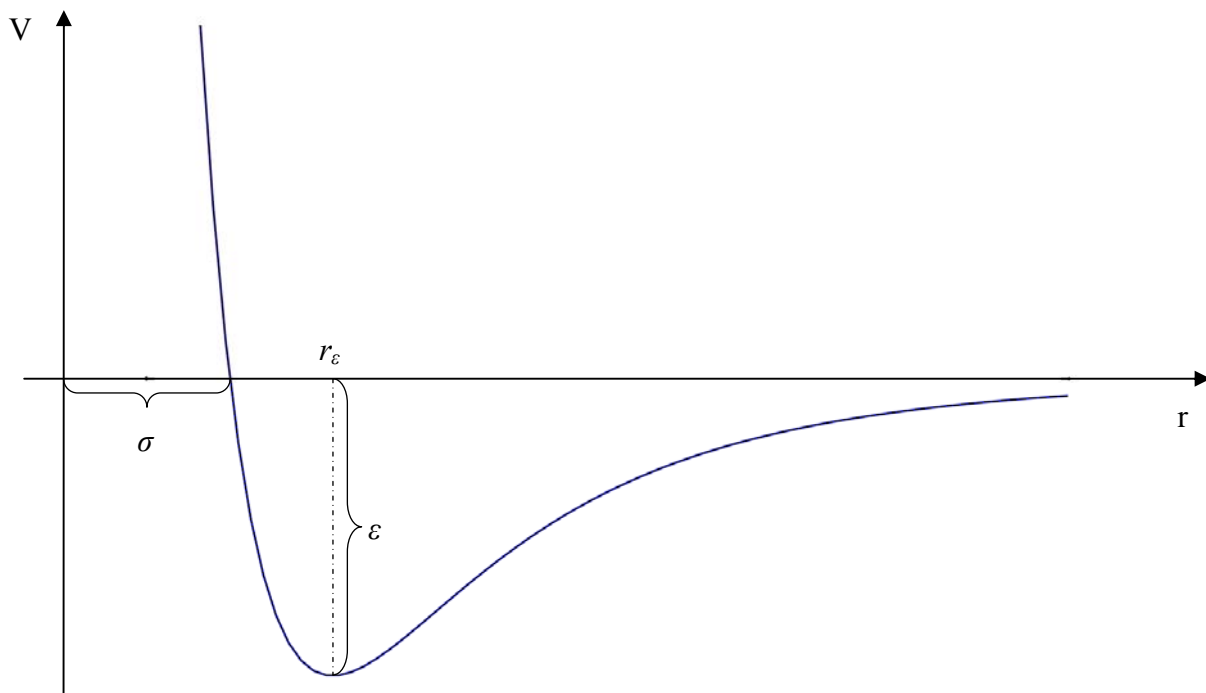
Azonban, ha ennél pontosabbak akarunk lenni, illetve a görbénket pontosabban szeretnénk kiértékelni, a fenti potenciált ebben az alakban kell vizsgálnunk:

$$V(r) = 4\varepsilon \left[-\left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 + \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} \right].$$

A potenciális energia kifejezésének alakja (jelölve a két különálló tag hatásait is) a következő:



Csak a potenciál $V(r) = 4\varepsilon \left[-\left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 + \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} \right]$ görbét ábrázolva:



Jól látható a potenciál szerkezete. Az $r=\sigma$ sugár alatt taszító kölcsönhatás működik, felette vonzó (egyébként σ nem más, mint a $V(r)=0$ egyenlet megoldása. A legmélyebb pontja a potenciálnak $r_\varepsilon=\sigma \cdot \sqrt[6]{2}$ sugárnál található, mélysége ε . Megjegyzendő, hogy az ε és σ értékek különféle anyagokra mérhetőek, ezek közül sok megtalálható a szakirodalomban.

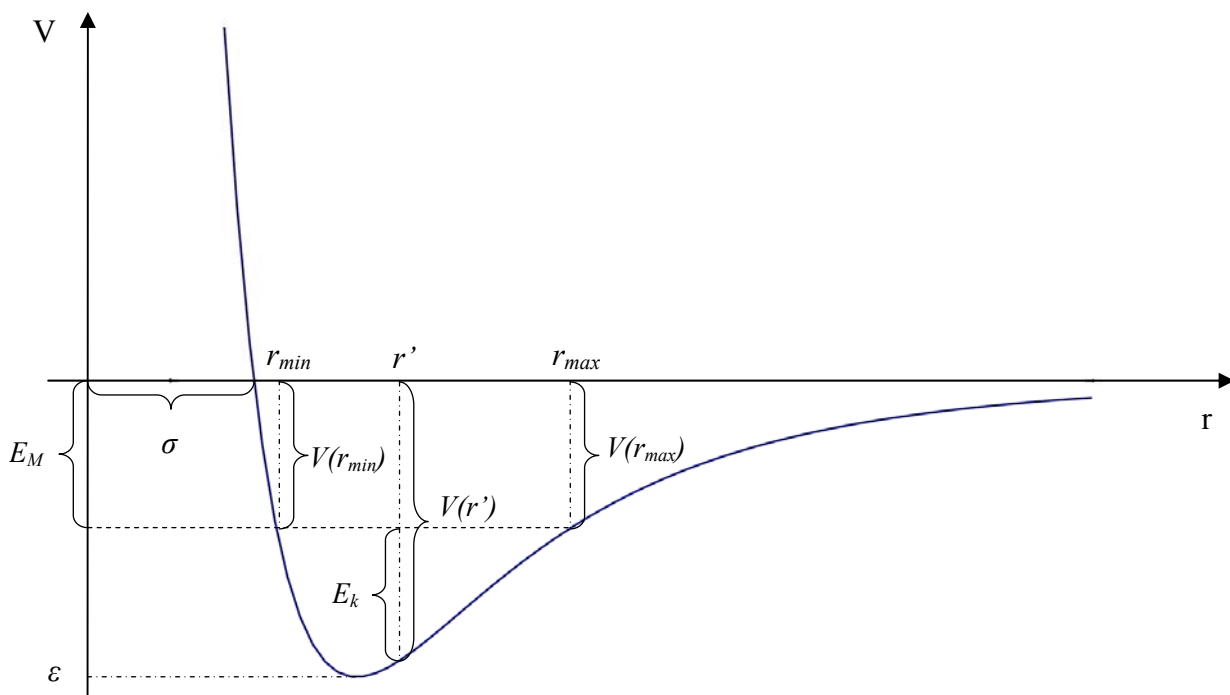
Az alábbiakban az ebben a potenciáltérben való mozgás részleteit fogjuk megvizsgálni minden jól elkülöníthető esetben, illetve megvizsgáljuk, hogy az ezzel modellezett anyagok viselkedése hogyan írható le ennek a segítségével.

Amit külön vizsgálni nem fogunk, az a $E_M < \varepsilon$ eset. Ebben az esetben az összenergia kisebb, mint a potenciálgödör legmélyebb energiaszintje. Itt mindenképpen negatív lenne a mozgási energia értéke, így kizárható ez az eset a vizsgálódásokból. Vizuálisan ez úgy azonosítható be, hogy az E_M energiát képviselő vízszintes egyenes mindig a potenciális energia görbéje alatt található.

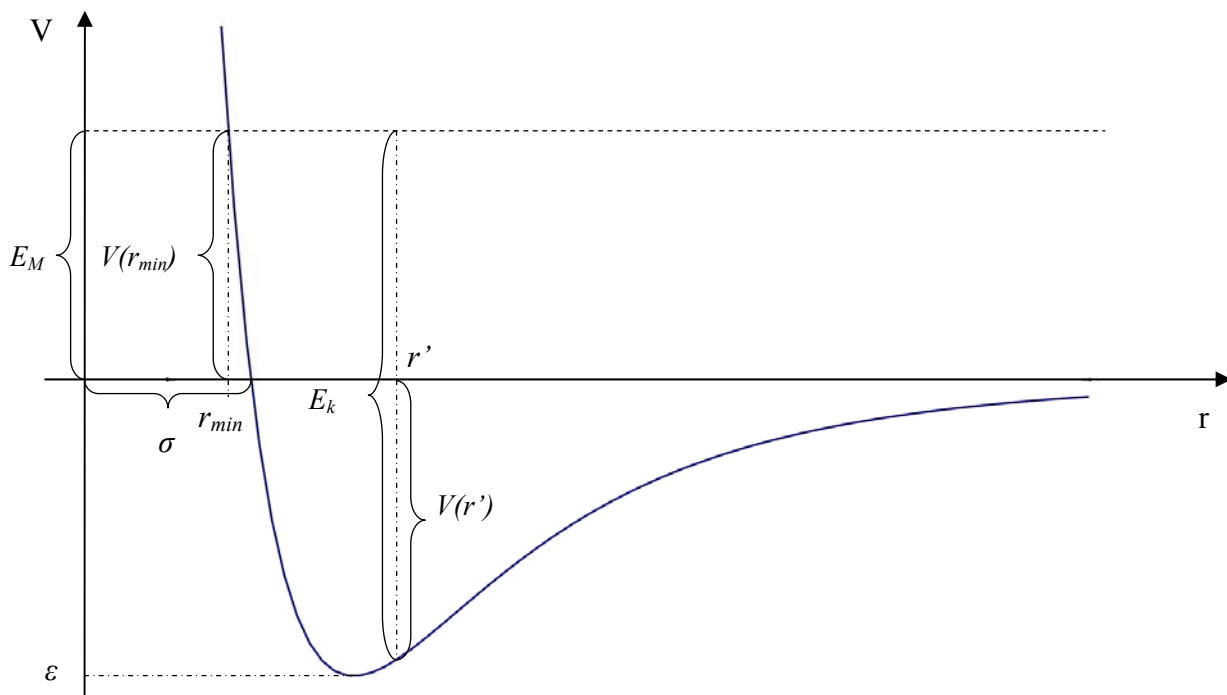
Speciális határeset az, amikor $E_M = \varepsilon$. Ebben az esetben a mozgási energia mindenképpen nulla, vagyis az ekkora energiával rendelkező részecske nem mozog a másik terében, a lehető legkötöttebb állapotban van. Természetesen ez az állapot a valóságban nem igazán valósul meg, a molekula (vagy nemesgáz-atom) a környezetétől mindenképpen kap némi energiát, így az energiája valójában soha nem lesz ilyen alacsony. Az említett pont megfeleltethető az abszolút nulla hőmérsékletnek, aminek elérését a termodinamika második főtétele lehetetlenné teszi.

Van még egy fontos tulajdonsága a potenciálnak. A potenciál minimuma környékén egy parabolával közelíthető, amelynek következtében a minimum környékén a részecske közelítőleg harmonikus rezgést

végez. Azonban az ettől való eltérés már kis energián is megjelenik, ami a részecskék viselkedését alapvetően meghatározza.



Negatív energia esetén jól láthatóan a részecske r_{min} és r_{max} távolságok között mozoghat, vagyis kötött állapotban van. Érdekessége viszont ennek az esetnek, hogy a másik részecskét sem közelítheti meg tetszőlegesen, van egy olyan távolság, aminél közelebb nem juthat. Általánosságban az energia-viszonyokat az r' távolságon mutatjuk be.



Pozitív energia esetén a részecske szabad, de ebben az esetben is van egy olyan minimális r_{min} távolság, amelynél közelebb nem juthat egyik részecske a másikhoz. Megjegyzendő, hogy a nulla energiájú esetben ez a távolság nem más, mint a potenciál σ paramétere.

A fenti két eset vizsgálata egészen összetett fizikai folyamatok bemutatására is alkalmas.

A termodinamikában tanultak alapján az egy részecskére jutó átlagos energia időátlagban a belső energiának a részecskére jutó szegmense. Ez az ekvipartíció tétele alapján egyértelműen kapcsolatban áll a hőmérséklettel. Ha a részecskék „átlagos” viselkedését vizsgáljuk, akkor a különböző E_M energiák egyértelműen megfeleltethetők különböző T hőmérsékleteknek.

A potenciál minimuma környékén, ahol jó közelítéssel parabola alakúnak tekinthető, a hőmérséklet növekedése egyre nagyobb amplitúdójú harmonikus (vagy ahhoz közeli) rezgést végeznek. Azonban már igen korán fontossá válik a potenciál aszimmetriája a parabolához képest. Emiatt a hőmérséklet emelkedésével nem csak a rezgés amplitúdója változik, hanem a részecske helyzetének középértéke is a másikhoz képest növekedni fog. Így a hőmérséklet növekedésével a részecskék átlagosan egyre távolabb kerülnek egymástól, ami a hőtágulás jelensége.

Egy másik jelenségkör ahhoz az átmenethez tartozik, amelyben a részecske kötött állapotból szabad állapotba kerül. Bár a konkrét átmenet leírása sokkal bonyolultabb is lehet, az átmenet előtti és utáni állapotok összehasonlítása a fenti potenciál vizsgálatával is történhet. A hőmérséklet növelésével elérhető, hogy a kötött állapotú részecske szabad állapotba kerüljön, és fordítva: a hőmérséklet csökkenése a szabad részecskét kötött állapotba viheti. Ez megfeleltethető a párolgás, forrás, lecsapódás, vagy éppen a szublimálás jelenségkörre.

A potenciálgörbe ismeretében visszatérünk a Van der Waals-féle reális gázmodellre. Ennek az állapotegyenlete

$$\left(p + \frac{a}{v^2}\right)(v - b) = RT .$$

A szorzat második tagja az egy mól anyagra vonatkoztatott térfogat. A hőmérsékletet azonban valójában nem a gáz térfogata határozza meg, hanem az egyes gázcseppcsek ún. átlagos szabad úthossza (vagyis az „ütközések” között megtett út átlagos értéke). Nyilvánvalóan a gáz teljes térfogatából ehhez ki kell vonni az egyes részecskék saját „térfogatát”.

Ez utóbbit a Coulomb-erőnél tárgyalt módon értelmezzük, vagyis meghatározzuk, hogy egy adott átlagos energiához milyen r_{min} határtávolság tartozik (ahol a mozgási energia nullának adódik), amelynél közelebb a részecske nem kerülhet a másikhoz. A b konstans az ehhez tartozó térfogatjárulékot jelöli.

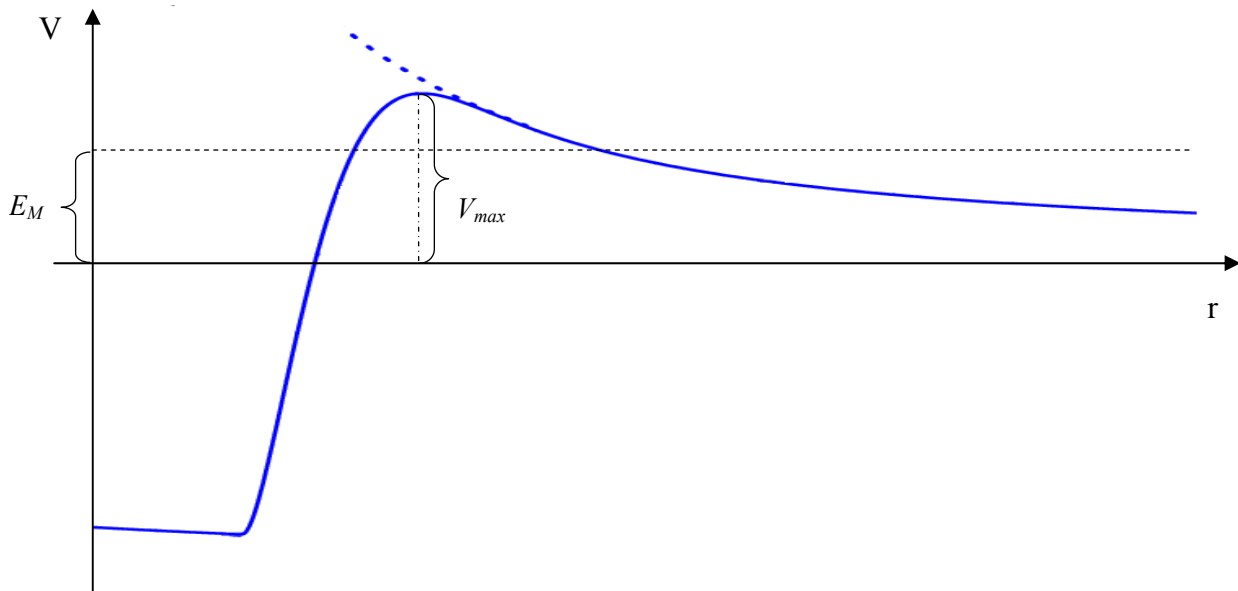
A szorzat első tagja a nyomás korrekcióját tartalmazza. A gáz nyomása mögötti fizikai folyamat a részecskék egymással, vagy a tárolóedény falával való ütközése. Ennek nyilvánvalóan fontos eleme az egyes részecskék átlagos sebessége. Mivel egy adott távolságon túl a vonzó potenciál dominálja a kölcsönhatást, jól láthatóan a nulla potenciálhoz tartozó mozgási energiánál az egyes részecskéknek nagyobb a mozgási energiája ezen a távolságon. Így a nyomás értékét ki kell egészítenünk a vonzó potenciál ezen hatásával is, így jelenik meg az a/v^2 tag a hőmérséklet kiszámításakor.

A Lenard-Jones potenciál (és a hasonlóak) a termodinamikai folyamatok modellezésében és az anyagtudomány effektív elméleteiben kiemelt szerepet foglal el. Bár annak mélyén sokkal összetettebb kölcsönhatások és jelenségek állnak, a legtöbb folyamat leírásának ez egy nagyon effektív módja. A jegyzet azonban ezekhez az elméletekhez csupán rövid bevezetőt, egyfajta érzékeltetést tudott felvállalni.

Magfizikai vonatkozások

Az atommag működésében nem elegendő a Fizika kurzus során részletesen tanult kölcsönhatásokat figyelembe venni, mivel ez esetben nem tudnánk stabil atommagot leírni: a protonok közötti taszító elektrosztatikus erő szétvetné a magokat. Be kell vezetnünk, vagy legalábbis figyelembe kell vennünk olyan magerőket, amelyek legyőzik az elektrosztatikus taszítást, és stabilan kötik egymáshoz a nukleonokat az atommagban.

Ennek hátterével itt nem foglalkozunk, viszont az ehhez tartozó (effektív) potenciál kiértékelése több fontos jelenség bemutatását is lehetővé teszi. A potenciálban megjelenik egy taszító Coulomb-potenciál, ami a mag „határán” túl a magok elektrosztatikus taszításáért felel, illetve kis távolságon egy olyan potenciál, amely a nukleonok kötöttségét írja le.

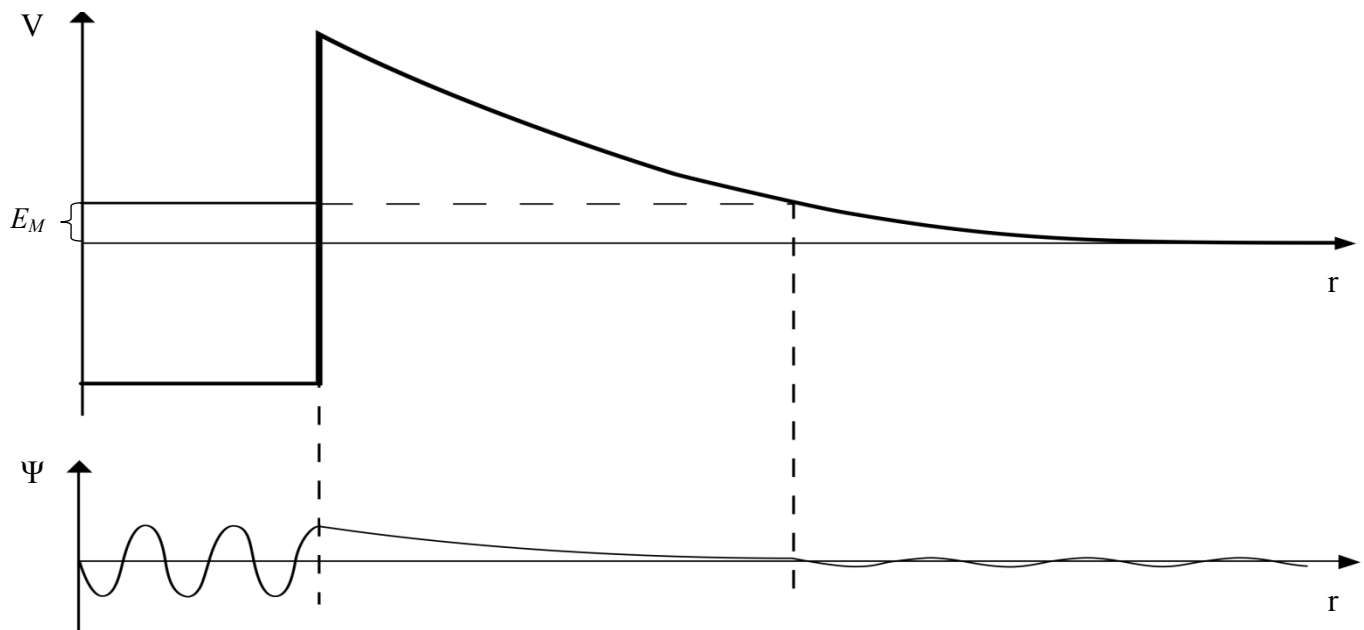


A korábbiak alapján már látható, hogy a maximális potenciálnál nagyobb energiával rendelkező részecskék mindenképpen szabad részecskéknek tekinthetők – azonban az ilyen energiájú nukleonok nagyon ritkák. Ahogy az is látszik, hogy negatív energia esetén mindenképpen kötött a részecske, a magon belül található meg.

Ezeknél sokkal érdekesebb az ábrán jelölt energiaszint. Ilyen energián ugyanis a részecske lehet kötött és szabad is, attól függően, hogy a mag „határán” belül, vagy azon kívül található. Az előbbi esetben a részecske nem juthat át a „potenciálgáton”, a későbbi esetben pedig úgy viselkedik, mint egy pozitív töltésű részecske egy másik pozitív töltésű részecske terében, vagyis szabad állapotban van, de egy adott távolságnál közelebb nem kerülhet a maghoz.

Ami viszont a magon belül található, az nem juthat ki a potenciálgát mögül, csak ha akkora energiát kap, hogy az összes energiája meghaladja a potenciális energia maximumát. Ennek ellentmond a tapasztalat, mivel a radioaktív folyamatok közül az α -bomlás során a magból egy két protonból és két neutronból álló kötött rendszer, az úgynevezett α -részecske kiszabadul – pedig az energiája a szükséges alatt van, kötöttnak kellene maradnia.

Ennek magyarázata a jegyzet klasszikus leírásán túlmutat, csak a modern fizika, konkrétan a kvantumelmélet segítségével magyarázható meg. Röviden összefoglalva, a kvantumelméletben a potenciál nem egy részecske helyét és sebességét határozza meg, hanem ezeknek a mennyiségeknek egy valószínűség-eloszlását. A hely esetében például a kvantummechanika egyenleteiből nem egy részecske helyét, hanem a megtalálhatósági valószínűség-eloszlását tudjuk kiszámolni (ez a $\Psi(r)$ hullámfüggvényből számolható).



A fenti potenciál esetén az α -részecske megtalálhatósági valószínűsége a mag „határán” belül a legnagyobb, azon kívül nagyon kicsi – viszont nem nulla. Így adott valószínűséggel az α -részecske kívül kerül a potenciálgáton, és szabad részecskeként viselkedik az α -sugárzás részeként. Ezt nevezzük alagút-effektusnak (amikor egy kötött részecske a véges magasságú potenciálgáton kívül jelenik meg, mert a megtalálhatósági valószínűsége ott sem nulla). A jelenség konkrét leírása láthatóan túlmutat ezen jegyzet keretein. (A potenciál-gáton belüli, exponenciálisan csökkenő hullámfüggvény nem fizikai állapotot ír le, az α -részecske nem lehet a „potenciálgát belsejében”.)

Megjegyzendő, hogy a hullámfüggvényt is ábrázoló ábrán szereplő potenciálgörbe csak közelítőleg érvényes, az α -részecske alagúteffektusának minél egyszerűbb matematikai leírásához, szemléltetéséhez ezt szokták használni.

A fentiekben tárgyalt konzervatív erők és potenciáljaik adják a fizika legalapvetőbb kölcsönhatásainak effektív leírását. Azonban ezek csupán az alapokat képesek leírni, elegendő csupán néhány részecske együttes hatását vizsgálni, és a konkrét számolások roppantmód elbonyolódnak. Ehhez képest 1 mólnyi anyag ($6 \cdot 10^{23}$ db) leírása más megközelítéseket kell alkalmazzon. Ilyen skálákon a fenti, az energia-megmaradásra nagyban építő leírási mód már nem alkalmazható hatékonyan, még ha az ezekből következő alapelvek továbbra is érvényesek maradnak (például a termodinamika első főtétele).

Még távolabbról tekintve a fizikai rendszerekre látható, hogy aligha vannak zárt rendszerek, amelyekre az energia-megmaradás egzakt formái igazak lennének – innen adódik egy valóságos rendszer leírásában megannyi számolható, vagy csak becsülhető disszipáció.

A modern fizikában pedig mindezt még tovább nehezíti a mikro-rendszerek kvantum (vagyis erőteljesen valószínűségi) viselkedése.

Mégis a potenciális energia, illetve potenciáltérben történő mozgások vizsgálata alapozhatja meg a valós fizikai rendszerek leírását. Erre a tanultak közül a legjellemzőbb példa a Lenard-Jones potenciál, ami nélkül a legegyszerűbb reális gáz modell (a Van der Waals kölcsönhatáson alapuló) aligha lenne értelmezhető. Így válnak ezek a potenciálok a fizikai leírás szerves részévé, így alapozzák meg az anyagtudomány alkalmazásorientált módszereit.

Egyensúly és stabilitás-vizsgálat

A potenciálterek témaköréhez szorosan kapcsolódik még egy fogalmi kör, amelyet most kitekintésként bevezetünk – az egyensúlyi helyzetek vizsgálata. A tanulmányok során rendszeresen foglalkozunk egyensúlyi helyzetekkel, akár kifejezetten az egyensúlyi állapotot keressük (pl. merev testek egyensúlya), akár az alkalmazott módszerek háttérében húzódik meg (pl. elektrosztatika, vagy a kvázisztatikus termodinamikai leírásmód).

A potenciálok vizsgálatával ez is jól kezelhető, illetve jól vizualizálható a különféle egyensúlyi állapotok viselkedése, amelyek alapvetően különböző fizikai viselkedésre vezetnek.

Fontos: nem mindenhol, hanem csak egy pontban!

$V(\mathbf{r}, \mathbf{v})$

$$\exists V : \vec{F} = -\text{grad } V$$

$$\vec{F} = -\text{grad } V = - \begin{pmatrix} \partial_x V \\ \partial_y V \\ \partial_z V \end{pmatrix}$$

- Egyensúlyi helyzetek
 - stabil
 - instabil
 - metastabil
 - neutral

