

MŰSZAKI SZEMLE

31. szám, 2005.

A FIZIKA NEMZETKÖZI ÉVE, különszám

**Szerkesztőbizottság elnöke /
President of Editing Committee**

Dr. Köllő Gábor

**Szerkesztőbizottság tagjai /
Editing Committee**

Dr. Balázs L. György – HU,
Dr. Biró Károly Ágoston – RO,
Dr. Csibi Vencel-József – RO,
Dr. Fedák László – UA,
Dr. Kása Zoltán – RO,
Dr. Kászonyi Gábor – HU,
Dr. Majdik Kornélia – RO,
Dr. Maros Dezső – RO,
Dr. Nagy László – RO,
Dr. Péics Hajnalka – YU,
Dr. Pungor Ernő – HU,
Dr. Puskás Ferenc – RO,
Dr. Ribár Béla – YU,
Dr. Szalay György – SK,
Dr. Turchany Guy – CH

Kiadja / Editor

Erdélyi Magyar Műszaki
Tudományos Társaság – EMT
Societatea Maghiară Tehnico-Științifică
din Transilvania
Ungarische Technisch-Wissenschaftliche
Gesellschaft in Siebenbürgen
Hungarian Technical Scientific Society
of Transylvania

Felelős kiadó / Managing Editor

Dr. Köllő Gábor

A szerkesztőség címe / Address

Romania
400604 Cluj, Kolozsvár
B-dul 21. Decembrie 1989., nr. 116.
Tel/fax: 40-264-590825, 594042
Levélcím: RO – 400750 Cluj, C.P. 1-140.

Nyomda / Printing

Incitato Kft.

ISSN 1454-0746

www.emt.ro

emt@emt.ro

Tartalomjegyzék – Cuprins – Content

Nagy László	3
2005 a Fizika Nemzetközi Éve 2005 este Anul Mondial al Fizicii 2005 is the World Year of Physics	
Gábos Zoltán	6
A speciális relativitáselméletről Despre teoria specială a relativității About the Special Theory of Relativity	
Buchwald Péter	16
A molekulaméret szerepe egyszerű szerves folyadékok leírásában Rolul dimensiunii moleculare în descrierea lichidelor organice simple The Role of Molecular Size in the Description of Simple Organic Liquids	
Kádár György, Lovas István	23
Korlátozza-e a precessziós átmágnesezés sebességét a kvantummechanikai bizonytalanság? Este limitată viteza de magnezare precesională de incertudinea cuantică? Does the Quantummechanical Uncertainty Limits the Speed of the Precessional Magnetization?	
Tél Tamás	27
Nemlineáris fizika Fizică neliniară Non-linear Physics	
Darabont Al., Daróczi N., Nemes-Incze P., Kertész K., Sárközi Zs., Koós A. A., Horváth Zs. E., Osváth Z., Vértesy Z., Biró L.P.	36
Szén nanocsövek szintézise folyékony szénhidrogénekből katalizátor jelenlétében Sinteza nanotuburilor de carbon din hidrocarburi lichide în prezența catalizatorilor Synthesis of Carbon Nanotubes from Liquid Phase Hydrocarbons in Presence of Catalysts	

A kiadvány megjelenését támogatta



Illyés Közalapítvány – Budapest

Oktatási és Kutatási Minisztérium – Bukarest



COMMUNITAS
ALAPÍTVÁNY

Communitas Alapítvány – Kolozsvár

2005 a Fizika Nemzetközi Éve

2005 is the World Year of Physics

Nagy László

Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Fizika Kar, Kogălniceanu u. 1 sz., Kolozsvár

Abstract

Celebrating the World Year of Physics is a good opportunity to recall, what were the perspectives of physics at the beginning of the 20th century, and to overveiw these perspectives nowadays. In the present issue of the Technical Review the articles present on one hand the most important of Einstein's achievements, and on the other hand some very new topics in physics.

Összefoglaló

A Fizika Nemzetközi Évének ünneplése jó alkalom arra, hogy felelevenítsük, melyek voltak a fizika kilátásai a XX. század kezdetekor, és melyek ezek a kilátások manapság. A Műszaki Szemle jelen számába összegyűjtött cikkek egyrészt Einstein legfontosabb eredményeit, másrészt pedig a fizika néhány nagyon új témáját mutatják be.

A Fizikai Társulatok 2000. évi Világkonferenciáján több mint 40 fizikai társulat javasolta azt, hogy a 2005-ös év legyen a Fizika Nemzetközi Éve. A javaslatot 2001-ben az Európai Fizikai Társulat (European Physical Society, EPS), 2002-ben pedig az Alap- és Alkalmazott Fizika Nemzetközi Szövetsége (International Union of Pure and Applied Physics, IUPAP) is egyhangúlag elfogadta. A szakmai támogatás hatására 2004. június 10-én az UNESCO javaslatára az ENSZ közgyűlése 2005-öt a Fizika Nemzetközi Évének nyilvánította.

Az ENSZ közgyűlése ezt a határozatot a következőkkel indokolta:

- a fizika a természetmegismerés folyamatának az alapja.
- a fizika és alkalmazásai számos mai műszaki fejlesztés alapját képezik.
- a fizikai műveltség eszközöket biztosít a tudományos kutatásokhoz, ami a fejlődés elengedhetetlen feltétele.
- a 2005-ös év százéves évfordulója Albert Einstein nagyhatású tudományos felfedezéseinek, melyek a modern fizika alapját képezik.

Albert Einstein, az egyik legnagyobb, és kétségtelenül a legismertebb fizikus számára, és rajta keresztül az egész fizika számára is, 1905. „csodás év” (*annus mirabilis*) volt. Ebben az évben a fiatal és szakmai körökben szinte ismeretlen Einstein négy olyan cikket publikált az *Annalen der Physik*-ben, amelyek alapjaiban változtatták meg a fizikát.

Az első a fényelektromos hatás magyarázatát adta meg a fény részecsketermészetének feltételezésével. Evvel a forradalmi elképzelésével Einstein akaratlanul is hozzájárult a kvantummechanika későbbi fejlődéséhez, és elsősorban ezért a felfedezéséért kapta meg jóval később a fizikai Nobel-díjat.



A második cikke a Brown-mozgás elméleti leírását adta meg. Ezt a mozgást a folyadékban szuszpenzióban lévő apró részecskék végzik, a rendezetlen hőmozgást végző molekulákkal való ütközések hatására. Elméletével Einstein nagymértékben elősegítette az atomelmélet kiteljesedését.

A harmadik cikk a leghosszabb, legkomplexebb és hatásaiban a legforradalombibb. „A mozgó testek elektrodinamikájáról” című cikk a speciális relativitáselmélet alapjait fektette le. Ez az elmélet gyökeresen megváltoztatta a térről és időről alkotott elképzeléseket, és összhangba hozta az egymásnak ellentmondó mechanikai és elektrodinamikai elméleteket.

A negyedik cikk a speciális relativitáselmélet egyik következményét, a tömeg-energia ekvivalenciát vezeti be. A két mennyiség közötti egyenértékűséget az $E=mc^2$ képlet fejezi ki (ahol c a fénysebesség légyeres térben), amely képlet azóta minden bizonynyal a fizika legismertebb képletévé vált.

Albert Einstein

Az 1905-ös *annus mirabilis*, és a fizika XX. századi szédületes fejlődése azonban néhány évvel korábban nem volt előre látható. 1900-ban Lord Kelvin, a kor egyik legismertebb és legtiszteltebb fizikusa a Royal Institution-ban (Nagybritannia Királyi Intézetében) a hő és a fény dinamikus elméletéről tartott előadást. Azt a véleményét fejtette ki, hogy a fizikában már nem maradt lényeges felfedeznivaló, a XX. század fizikusai csak a pontosabb mérések, kísérletek megvalósításával lesznek elfoglalva. Mégis, a fent említett beszédében Lord Kelvin felhívta a figyelmet két tényre (amelyeket ő sötét fellegeknek nevezett), melyek beárnyékolják a létező elméletek szépségét, világosságát, belső logikáját. Az első „felhő” a Michelson-Morley-kísérlet negatív eredménye lenne, amely bebizonyította, hogy a fény sebessége a Földhöz viszonyítva állandó, függetlenül a Föld mozgásától. A második „felhő” a feketetest hőmérsékleti sugárzásának kísérletileg észlelt spektruma volt, amelyet nem tudtak elméletileg megmagyarázni.

Lord Kelvin nem tévedett a problémák azonosításakor. Azonban alapvetően tévedett ezen megmagyarázatlan jelenségek fontosságának megítélésében a fizika, és általában a tudomány fejlődésének szempontjából. Az első „felhő” magyarázata a relativitáselmélet kidolgozásához vezetett. A második „felhő” magyarázata pedig a kvantumelmélet alapjait fektette le. Ez a két elmélet nemcsak a XX. századi fizikát forradalmasította, hanem bátran állíthatjuk, az életvitelünkre is jelentős hatással volt.

Most, a XXI. század elején, a múlt század fizikájának hatalmas megvalósításai után, már senki sem mondja, hogy a fizika egy lezárt tudományterület lenne, hogy nincs már mit felfedezni. Ellenkezőleg, minden felfedezés újabb megoldatlan problémákat hoz felszínre.

Több különböző típusú megoldatlan problémáról beszélhetünk. Vannak elsősorban elméleti kérdések, melyek a világról alkotott elképzelésünk alapjait feszegetik. Vannak még megoldatlan gyakorlati feladatok. Végül, vannak olyan témák, melyek csak az utóbbi években vetődtek fel, és rohamosan fejlődnek.

Az első típusba sorolhatjuk az Univerzum keletkezésével és struktúrájával kapcsolatos kérdéseket. Milyen a geometriai szerkezete? Mi sötét anyag illetve a sötét energia? Mi volt az Ősrobbanás előtt, és mi okozta ezt az eseményt? Hogyan valósítható meg minden kölcsönhatás (elektromágneses, gyenge, erős, gravitációs) egységesítése? Itt említhetjük meg az idő irányával és a termodinamika II. főtételével kapcsolatos kérdéseket is.

A második típusba régebbi megoldatlan feladatokat sorolhatunk, mint pl. az ellenőrzött magfúzió megvalósítása energiatermelés céljából, de újakat is, mint a kvantumszámítógépek építése.

A harmadik típusba sorolhatjuk a nemlineáris, kaotikus jelenségeket, amelyeket már 30 éve tanulmányoznak, de szinte folyamatosan meglepetésekkel szolgálnak. Úgy tűnik, hogy a káosznak, vagyis a rendtelenségnek, nagyon szigorú szabályai vannak, amelyek különböző típusú komplex rendszerek esetén egyaránt

érvényesek. A hálózatok elmélete, mely az utóbbi évtizedben alakult ki, még sok új ismerettel szolgálhat, amelyek felhasználása a neuronhálózatoktól az Internet hálózatig terjedhet.

Vagyis a mai fizika problémáját nem a megoldatlan kérdések hiánya jelenti, amelyekből van bőség. Problémát jelenthet az, hogy a társadalom feltette magának a kérdést, mi lehet ezeknek a kutatásoknak az értelme, és érdemes-e ezekre pénzt áldozni. Negatív jelzések sajnos vannak. Az Amerikai Egyesült Államokban leállították egy igen nagy energiájú gyorsító (Superconducting Super Collider) építését, amellyel ellenőrizni lehetett volna a kölcsönhatások egységesítésére vonatkozó létező elméleteket. Országunkban jelenleg a nemzeti bruttó termék kevesebb mint 0,3%-át fordítják tudományos kutatásra. A társadalomban általában tudományellenes hangulat figyelhető meg, sok embert csak a saját anyagi helyzete és esetleg a paranormális jelenségek, a horoszkóp érdekel.

Mégis, az emberek mindennapjaikban használják a tudomány megvalósításait, melyek megkönnyítik az életüket. A műholdas televízió-közvetítések, a mobiltelefonok, a számítógépes hálózatok, a fejlett orvosi diagnosztikai berendezések nem létezhetnének a XX. századi fizika megvalósításai nélkül. Ha most nem áldoz a társadalom (anyagi és humán források biztosításával) alapkutatásra, ezzel a 20-30 év múlva lehetséges technológiai fejlődést akadályozza meg.

A Fizika Nemzetközi Éve jó alkalom arra, hogy felhívja a figyelmet a fizika, és általában a természettudományok fontosságára. Ezért döntött úgy a Műszaki Szemle szerkesztősége, hogy különszámot szentel ennek az eseménynek.

Ebben a számban olyan cikkeket gyűjtöttünk össze, melyek egyrészt Einstein legfontosabb eredményeit, másrészt pedig a fizika néhány nagyon új témáját mutatják be. Gábos Zoltán a speciális relativitáselmélet alapjait ismerteti. Ennek alapján az olvasó meggyőződhet Einstein eredményinek fontosságáról, forradalmi voltáról. Buchwald Péter Einstein 1906-ban megjelent, a molekulák méretének meghatározásával foglalkozó cikkéig nyúl vissza. Írása egyben kitűnő példája annak, hogy a fizikai módszerek hogyan használhatók más tudományágak, jelen esetben a biológia területén. Kádár György és Lovas István cikke elméletileg modellez egy olyan jelenséget, amely a számítógépek műveleti sebességének további növelését teszi lehetővé. Tél Tamás az utóbbi évek egyik legdinamikusabban fejlődő területének, a nemlineáris, kaotikus jelenségek átfogó leírását adja. Végül Darabont Sándor és munkatársai cikke a kísérleti fizika egyik kiemelkedő és sokat ígérő megvalósítását, a szén nanocsövek előállítását mutatja be. A fenti cikkek döntő mértékben eredeti eredményeket tartalmaznak, hiszen a szerzők az illető szakterület világszerte elismert képviselői.

Reméljük, hogy a Műszaki Szemle jelen különszáma hozzájárul a fizika és általában a természettudományok és műszaki tudományok társadalmi megbecsülésének növeléséhez.

A speciális relativitáselméletről

About the special theory of relativity

Gábos Zoltán

Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Fizika Kar, Kogălniceanu u. 1 sz., Kolozsvár

Abstract

By the beginning of the 20th century the physics have accumulated enough knowledge to incorporate this new theory. The theory is based on the works of H. A. Lorentz and H. Poincaré, but the final steps have been made in 1905 by A. Einstein. In this work we present some of the results obtained between 1905 and 1907 by Einstein. In the introduction we recall those facts, which made necessary the appearance of this theory. Further, we present its main results, and at the end we discuss the consequences, applications and experimental evidences of this new theory.

Összefoglaló

A XX. század elején a fizika készen állt az új elmélet befogadására. Útját H. A. Lorentz és H. Poincaré egyengették, de a döntő lépést A. Einstein tette meg 1905-ben. A dolgozatban Einstein 1905-1907. között közölt eredményeiből válogatunk. A bevezetőben azokat a tényeket ismertetjük, amelyek szükségessé tették az új elmélet megjelenését. Ezt követően az elmélet legfontosabb eredményeit ismertetjük. Végül az elmélet következményeivel, alkalmazásaival és a kísérleti bizonyítékokkal foglalkozunk.

A speciális relativitáselmélet megjelenése egy hosszú fejlődési folyamat eredménye. Gyökerei a 17. századba nyúlnak vissza. A tudomány terebélyesedése során elméletek váltják egymást. A régieket újak váltják fel. A váltás nem akadálymentes. A csírában jelentkező új elmélet a régi keretben tör utat magának. Eközben el kell távolítania a régi elméletnek továbblépést gátló merevítőelemeit. Ha ez megtörténik az új elmélet polgárjogot nyer a tudomány világában.

A fizika a 20. század elején készen állt a speciális relativitáselmélet befogadására. Útját H. A. Lorentz és H. Poincaré egyengették, a döntő lépést 1905-ben Einstein tette meg. Neki volt bátorsága ahhoz, hogy eltávolítsa a klasszikus elmélet három merevítőelemét: az abszolút tér és az abszolút idő fogalmakat, valamint az elektromágneses jelenségek hordozójának tekintett hipotetikus anyagot, az „étert”. A következőkben elsőként az elmélet kialakulásával foglalkozunk. Ezt követően Einstein 1905-07. között közölt eredményeiből válogatunk. Végül az elmélet helyességét igazoló kísérleti tényeket ismertetjük.

1. Az elmélet gyökerei

A 17. században jelentős eredmények születtek a mechanika és az optika terén. A gyökereket keresve ezekből kell kiindulnunk.

Elsőként vegyük számba az ún. klasszikus mechanika egyes eredményeit.

Az 1637-ben bevezetett Descartes-féle derékszögű koordináta-rendszer lehetőséget nyújtott az euklideszi geometria eredményeinek hasznosítására. A koordináta-rendszer a vonatkoztatási rendszer szerepét tölti be. Azok a vonatkoztatási rendszerek, amelyekben a külső hatásoktól mentes „szabad” anyagi pont megtartja mozgásállapotát (sebességét) a tehetetlenségi rendszer nevet kapták.

A klasszikus newtoni mechanikában feltételezték, hogy az idő „abszolút”, tehát bármely vonatkoztatási rendszerben a megfigyelő azonos időskálát használhat. I. Newton a teret anyagtól független, végtelen kiterjedésű tartálynak tekintette, amelyik mindenkor változatlan marad. Az „abszolút” térhez kötött K_0 rendszert a tehetetlenségi rendszerek körébe sorolta.

Tekintsük a kezdeti időpillanatban egybeeső K és K' derékszögű vonatkoztatási rendszereket. Amennyiben K' \vec{v} sebességgel távolodik K -tól, a newtoni felfogás alapján az időre

$$t' = t, \quad (1)$$

a helyzetvektorokra

$$\vec{x}' = \vec{x} - \vec{v}t, \quad \vec{x} = \vec{x}' + \vec{v}t \quad (2)$$

írható. Ezek a képletek, a Galilei-féle transzformációs képletek nevet kapták.

A (2) alatti képletek alapján állították, hogy végtelen sok tehetetlenségi rendszer van, hiszen a K_0 -hoz képest egyenletes sebességgel távolodó rendszereket is megilleti a tehetetlenségi jelző.

Választ kerestek arra a kérdésre, hogy milyen lehetőség van a K_0 rendszer kijelölésére. Felismerték, hogy erre nincs lehetőség, mivel a tehetetlenségi rendszereket a bennük végzett mechanikai kísérletekkel nem lehet egymástól megkülönböztetni. Ezt a kijelentést a Galilei-féle relativitási elv néven ismerjük.

A relativitáselmélethez vezető úton egy másik kiindulópontot az optika eredményei szolgáltattak. A 17. század közepéig a fénysugarak a fizikusok fontos eszköztárához tartoztak, jóllehet nem tudtak felelni arra a kérdésre, hogy mi a fény. A század második felében két elképzelés jelentkezett. Általában az egyiket Huygens, a másikat Newton nevéhez fűzzük.

A Huygens nevével fémjelzett hullámelmélet hívei egy, a világűrűt kitöltő hipotetikus anyagra, az „éterre” alapoztak. Állították, hogy a végtelen finom éterben a fény úgy terjed, mint a hang a levegőben, és a fényhullámot a fénylő test által rezgésbe hozott éterrészesek indítják el. E mechanikai modellre alapozva longitudinális hullámokról beszéltek.

Newton arra a következtetésre jutott, hogy a fénysugarak a fénylő testek által kilövellt apró testecskek-ből állnak. A fényt és az étert elválasztotta, és azokat kölcsönható partnereknek tekintette. A vízbedobott kő a vízben hullámokat vált ki. Newton a fényrészeseknek a kő, az éternek a víz szerepet szánta.

Mindkét fénymodell számára elfogadható volt az az állítás, hogy a fény az éterben véges sebességgel terjed. Erre 1675-ben elsőként O. Römer adott elfogadható értéket. Az igen ritka közegben mért fénysebesség, amelyet ma c -vel jelölünk, fontos szerephez jutott a speciális relativitáselméletben.

A 18. és 19. században a fény hullámelméletével kapcsolatban sok új eredmény született. Ezek közül csak azokat emeljük ki, amelyek a relativitáselmélet megjelenésében szerepet játszottak.

T. Young 1817-ben arra a következtetésre jutott, hogy a fényhullámok transzverzálisak (az éterrészesek a terjedés irányára merőlegesen végzik rezgésüket).

A 19. század második felében egy új hullámelmélet jelentkezett. J. C. Maxwell 1873-ban a nevét viselő egyenletek alapján az elektromágneses hullámok létezését állította. A hullámok terjedési sebességére számításai a fény esetében nyert $c = 3 \cdot 10^8 \text{ms}^{-1}$ értéket adták. H. Hertz 1887-ben kimutatta a transzverzális elektromágneses hullámok létezését. Kiderült, hogy a fényhullámok láthatóba eső elektromágneses hullámok.

A nyugvó világéter hívei a K_0 abszolút vonatkoztatási rendszert az éterhez rögzítették. Maxwell állította, hogy ebben a kitüntetett rendszerben a fény minden irányban ugyanazon c sebességgel terjed. De mit állíthatunk a többi tehetetlenségi rendszerekkel kapcsolatban? A feleletet keresve Maxwell 1880-ban egy kísérletet javasolt.

A kísérletet elsőként A. A. Michelson végezte el 1881-ben, majd a kísérletet E. W. Morley-el 1887-ben megismételte. Tekintsük a napközéppontú, állócsillagokhoz rögzített, Newton által tehetetlenséginek tekintett K vonatkoztatási rendszert. A földi megfigyelő egy, a Földhöz rögzített K' vonatkoztatási rendszert használ. A mérések rövid időtartama alatt a Föld sebessége gyakorlatilag nem módosul, így a K' rendszer is tehetetlenséginek tekinthető. K' -ben kijelölhető a K -hoz viszonyított pillanatnyi eltolódási sebesség, a \vec{v}_F iránya. A kísérlet meglepő eredményhez vezetett: a \vec{v}_F irányában és az arra merőleges irányban mért fénysebességekre ugyanazon érték adódott. Ez arra utalt, hogy két tehetetlenségi rendszer relatív eltolódási sebességét optikai úton nem lehet megállapítani, és így a K_0 abszolút rendszer kijelölésére a Maxwell-féle elektrodinamika sem ad lehetőséget.

A fényvel kapcsolatos más tények is magyarázatot igényeltek. Ezek közül kettőt említünk. J. Bradley 1728-ban jelezte, hogy az állócsillagok az égbolton egy év alatt kis ellipsziseket írnak le, tehát a kiszemelt állócsillagot követő megfigyelő a távcső tengelyét folyamatosan kell változtassa. Az aberráció néven emlegett jelenséget a Föld Nap körüli mozgásával magyarázzuk.

H. Fizeau 1851-ben az áramló folyadékban az áramlás irányában kibocsátott fény v_f sebességét mérte és azt találta, hogy

$$\frac{c}{n} < v_f < \frac{c}{n} + v, \quad (3)$$

ahol v az áramlási sebesség és n a folyadék törésmutatója.

A felsorolt tények kétségeket támasztottak mind az éterrel, mind a Galilei-féle transzformációs képletekkel szemben.

Transzverzális hullámok nem alakulhatnak ki igen kis sűrűségű közegben. A Michelson-kísérlet arra utalt, hogy a Föld az éter egy részét magával ragadja. Az aberrációt a nyugvó étermodellel lehetett magyarázni. A Fizeau-kísérlet viszont arra utalt, hogy az áramló folyadék csak részben ragadja magával az étert.

A 19. század végén és a 20. század elején egyre nyilvánvalóbbá vált, hogy a klasszikus mechanika egyes eredményei is felülvizsgálatra szorulnak.

Az (1) és (2) alattiak elfogadása azt jelentené, hogy amennyiben a fény a K rendszerben minden irányban ugyanazzal a sebességgel terjed, nem állítható ugyanez a K' rendszerrel kapcsolatban. A Michelson-kísérlet azt is tanúsította, hogy a Galilei-féle transzformációs képletek a fény esetében nem használhatók.

A Maxwell-féle elektrodinamika megtörte a newtoni mechanika egyeduralmát. A fizikusok meggyőződtek arról, hogy nem lehet az egész fizikát Newton mechanikájára alapozni. Ugyanakkor ellenhatásként egy másik irányzat is jelentkezett. Például a Maxwell-elméletet kiegészítő Lorentz-féle elektronelméletben a mechanikai tömeget ún. elektromágneses tömeggel helyettesítették. 1900. után M. Abraham és mások kimutatták, hogy a gömbalakú töltéscsomónak tekintett elektron gyorsítása esetében gyorsítást gátló hatás jelentkezik. Tehát tehetetlenséggel, vagyis tömeggel kell számolni. A számítások azt mutatták, hogy az elektromágneses tömeg a sebesség növelésekor növekszik. Jóllehet ez az út zsákutcának bizonyult, az előrelépést segítette. W. Kaufmann 1901-től a radioaktív anyagok által szolgáltatott nagysebességű elektronok eltérítését vizsgálva, tömegnövekedést tapasztalt. Ez is azt sugallta, hogy a newtoni mechanika a nagy sebességű mozgások esetében módosításra szorul.

2. A speciális relativitáselmélet megalapozása

Az étermodellel kapcsolatos nehézségekből kiutat kellett keresni.

W. Voigt 1887-ben elsőként figyelmeztetett arra, hogy amennyiben megköveteljük azt, hogy a fény terjedési sebessége az összes tehetetlenségi rendszerben minden irányban ugyanakkora legyen, az időt is transzformálni kell. Eredményéről megfeledeztek.

H. A. Lorentz 1904-ben azokat a transzformációs képleteket kereste, amelyek alkalmazásakor a ritka közegre érvényes Maxwell egyenletek alakja nem módosul. Arra az esetre, amikor a kezdeti időpillanatban a K és K' tehetetlenségi rendszerek egybeesnek, és K' az l -es tengely irányában v sebességgel távolodik K -tól, a ma nevét viselő

$$x'_1 = \gamma(x_1 - vt), \quad x'_2 = x_2, \quad x'_3 = x_3, \quad t' = \gamma\left(t - \frac{v}{c^2}x_1\right) \quad (4)$$

képleteket nyerte, ahol

$$\gamma = \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-\frac{1}{2}}.$$

Az inverz képletekre

$$x_1 = \gamma(x'_1 + vt'), \quad x_2 = x'_2, \quad x_3 = x'_3, \quad t = \gamma\left(t' + \frac{v}{c^2}x'_1\right) \quad (5)$$

írható.

A nyugvó éter-modell megmentésével fáradozó Lorentz nem tudta hasznosítani a transzformációs képletei által nyújtott lehetőségeket. Elfogadta G. F. Fitzgerald 1892-ben megfogalmazott állítását, mely szerint a tárgyak mérete az éter hatására, a mozgás irányában megrövidül. A Fizeau-kísérlet esetében nyugvó étert mentő ötletet nem tudott ajánlani.

A vizsgálatokba bekapcsolódott H. Poincaré is, aki a transzformációval kapcsolatos néhány fontos tényre hívta fel a figyelmet. Einsteinnal egyidőben, de tőle függetlenül megállapította, hogy a v paraméter tartalmazó (4) alatti transzformáció esetében csoporttulajdonságok állapíthatók meg.

Rámutatott arra, hogy az

$$x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - c^2 t^2 \quad (6)$$

kifejezés Lorentz-invariáns. Értéke nem módosul, ha a kifejezésbe vesszős mennyiségeket írunk. Az x_4 -icet képzetes negyedik koordináta használatát is javasolta. Poincaré azzal is tisztában volt, hogy a Galilei-féle relativitási elvet egy új, a Lorentz-transzformációra alapozó elvvel kell helyettesíteni.

Poincaré az éter kérdésével nem foglalkozott, figyelmét a transzformációval kapcsolatos matematikai vonatkozások kötötték le. A „Tudomány és föltevés” című könyvében a következőket írta: „tulajdonképpen ez nem más mint egy kényelmes feltevés, mely azonban mindig kényelmes marad, míg előbb-utóbb be fog következni az az idő, amikor az étert mint hasznavehetetlen fogalmat végképpen elvetik.” E lépés megtételére azonban nem vállalkozott.

A továbblépés feladata Einsteinra hárult, aki 1905-ben „A mozgó testek elektrodinamikájáról” című dolgozatában ki merete mondani, hogy éter nincs. E bátor lépés megtételében az ugyanezen évben közzétett új fényelmélete is segítette.

M. Planck 1900-ban arra a következtetésre jutott, hogy a ν frekvenciájú fény (elektromágneses sugárzás) energiája, csak az

$$\varepsilon = h \nu \quad (7)$$

energiaadag egészszámú többszöröse lehet. Einstein 1905-ben továbblépett. Állította, hogy a $h \nu$ energiaadag hordozója egy sajátos tárgy, amelyik hullám és korpuszkuláris tulajdonsággal rendelkezik (az elektromágneses sugárzás kvantuma 1926-ban a foton nevet kapta). Einstein a newtoni úton haladt tovább. Newton a fényrészecskéket elválasztotta az étertől. Einstein az étert kiiktatva a hullámtulajdonságot is a fotonra ruházta. Új fényelméletével Einstein elsőként tudta magyarázni a fényelektromos hatás törvényeit. Einstein eredményeiből hármat emelünk ki:

- Új megvilágításba helyezte a tér és idő fogalmakat;
- Teljesítette a Poincaré által is megfogalmazott feladatot, lerakta a klasszikus mechanikát felváltó új mechanika alapjait;
- Állította, hogy a speciális relativitáselmélet eredményei két alapelvből származtathatók:
 - A tehetetlenségi rendszerek minden fizikai folyamat szempontjából egyenértékűek. Tehát a természettörvények minden tehetetlenségi rendszerben ugyanolyan alakban írhatók.
 - A vákuumbeli fénysebesség valamennyi tehetetlenségi rendszerben, minden irányban ugyanolyan értékű.

A következőkben példaként mutassuk meg, hogy a két alapelv hogyan vezet az ún. speciális Lorentz-transzformáció (4) alatti képleteihez. Keressük a képleteket az

$$x'_1 = b_1 x_1 + b_2 t, \quad x'_2 = x_2, \quad x'_3 = x_3, \quad t' = b_3 x_1 + b_4 t \quad (8)$$

alakban, ahol az együtthatók v függvényei. (8)-ból az

$$x_1 = \frac{1}{D} (b_4 x'_1 - b_2 t'), \quad x_2 = x'_2, \quad x_3 = x'_3, \quad t = \frac{1}{D} (-b_3 x'_1 + b_1 t') \quad (9)$$

inverz képletekhez jutunk, ahol

$$D = b_1 b_4 - b_2 b_3. \quad (10)$$

A K' rendszer origójára $x_1 = vt$, $x'_1 = 0$ írható és így

$$b_2 = -v b_1. \quad (11)$$

A K rendszer origójára $x_1 = 0$, $x'_1 = -vt'$ érvényes, következésképpen

$$b_2 = -v b_4. \quad (12)$$

A kezdeti időpillanatban a közös origóból az 1-es tengely irányában kibocsátott fényjelre a K és K'-beli megfigyelők egyaránt a c értéket adják, tehát $x_1 = ct$, $x'_1 = ct'$ és így

$$c = \frac{cb_1 + b_2}{cb_3 + b_4} \quad (13)$$

írható.

(11),(12),(13) felhasználásával az ismeretlen együtthatók száma egyre csökken és

$$x'_1 = b_1(x_1 - vt), \quad t' = b_1\left(t - \frac{v}{c^2}x_1\right) \quad (14)$$

$$x_1 = \frac{\gamma^2}{b_1}(x'_1 + vt'), \quad t = \frac{\gamma^2}{b_1}\left(t' + \frac{v}{c^2}x'_1\right) \quad (15)$$

adódik.

A második alapelvből

$$x_1'^2 + x_2'^2 + x_3'^2 - c^2t'^2 = 0, \quad x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - c^2t^2 = 0 \quad (16)$$

következik. Az első kapcsolatot, (14), majd a második kapcsolatot felhasználásával

$$b_1 = \gamma$$

nyerhető. Ezzel a (4) és (5) alatti transzformációs képletekhez jutottunk.

3. A tér és idő relativitása

Miután Einstein megfosztotta az abszolút teret utolsó támaszától, az étertől, a fogalom hitelét veszítette. Az abszolút időfogalomhoz ragaszkodó Lorentz-el szemben azt is állította, hogy egységes világidőről nem beszélhetünk. De ennél is többet adott. Felismerte, hogy a Lorentz-féle transzformációs képletek arra utalnak, hogy a tér és idő között elválaszthatatlan kapcsolat van. Ezért a térbeli kapcsolatok megadása az időbeliek pontosítását, az időbeli kapcsolatok megadása a térbeli viszonyok figyelembevételét igényli. Ezért állította, hogy az időtartamok és távolságok mérésekor szigorú utasításokat kell betartani.

Az idővel kapcsolatban előírta, hogy a mérések elvégzése előtt a tehetetlenségi vonatkoztatási rendszeren belül az órákat egyeztetni kell. Tekintsük például a K rendszert. Az origóban elhelyezett órát állítsuk be a $t=0$ időpillanatra. Ebben az időpillanatban az origóból indítsunk el egy fényjelet. Az origótól r távolságra lévő P pontbeli órát a jel megérkezésekor a $t_p = r/c$ időre kell beállítani. Ugyanígy járunk el a K' rendszerbeli órák esetében is. Különböző tehetetlenségi rendszerek esetében az egyeztetést csak egy alkalommal végezhetjük el. Ezt tesszük akkor, amikor a K és K' rendszerek origóban lévő óráit, az egybeesés pillanatában a $t=t'=0$ időre állítjuk be.

Tekintsük a K' rendszerben nyugvó (a rendszerrel együttmozgó) órát. Ekkor $\Delta x'_1 = 0$. Legyen $\Delta t'$ a rendszerben mért ún. nyugalmi időtartam. A K-ban mért ún. mozgási mérőszámra az (5) alatti utolsó képlet alapján

$$\Delta t = \gamma \Delta t' \quad (17)$$

írható. Amennyiben az óra a K rendszerben nyugszik ($\Delta x_1 = 0$), a K és K' rendszerekben mért időtartamok kapcsolatára (4) alapján

$$\Delta t' = \gamma \Delta t \quad (18)$$

adódik. (17) és (18) között nincs ellentmondás, mivel a kapcsolatokat különböző térbeli viszonyokra adtuk meg és mindkét esetben a mozgási mérőszám nagyobb a nyugalmiánál. A mozgó rendszer órái lassabban járnak, mint a nyugvó rendszer órái.

A hosszúságok mérésére Einstein pontos utasításokat adott. A K'-ben nyugvó 1'-es tengelyre fektetett merev rúd hosszát a szokásos módon állapítjuk meg. A rúdhöz mérőrúdat rögzítve leolvassuk a végpontokhoz tartozó beosztásokat. Tehát az ún. nyugalmi mérőszámra

$$L'_1 = \Delta x'_1 \quad (19)$$

írható. A K-beli megfigyelő a hozzá képest mozgó rúd hosszát kell megadja. Mérőrúdját az 1-es tengely mentén rögzíti. A mozgási mérőszám megállapításakor megköveteljük, hogy a végpontok helyzetét K-ban, ugyanabban az időpillanatban kell leolvasni. Mivel $\Delta t = 0$, (4) alapján

$$\Delta x'_1 = \gamma \Delta x_1, \text{ vagy } L'_1 = \gamma L_1 \quad (20)$$

adódik.

Amennyiben a merev rúd a K rendszerben nyugszik, a K'-ben állapítunk meg mozgási mérőszámot, a vesszős és vessző nélküli mennyiségek szerepet cserélnek:

$$L_1 = \gamma L'_1. \quad (21)$$

(20) és (21) között nincs ellentmondás. Mindkét esetben a mozgási mérőszám kisebb a nyugalmi mérőszámnál. A látszólagos ellentmondás egy aszimmetriát is tükröz. A nyugalmi mérőszám megadásakor csak a mérőrúdra és egyetlen megfigyelőre van szükség. A mozgási mérőszám megadása egy mérőrúdat, legalább két órát és két megfigyelőt követel. A mozgás irányára merőlegesen elhelyezett rúdra K-ban és K'-ben ugyanazt a hosszértéket kapjuk:

$$L'_2 = L_2, \quad L'_3 = L_3. \quad (22)$$

A Lorentz-féle transzformációs képletek az események egyidejűségével kapcsolatban is fontos eredményekhez vezettek. Tekintsük a K' rendszerben két különböző helyen bekövetkező egyidejű eseményt. Ekkor $\Delta t' = 0$, $\Delta x'_1 \neq 0$, következésképpen (5) alapján

$$\Delta t = \gamma \frac{v}{c^2} \Delta x'_1 \quad (23)$$

adódik, tehát a K-beli megfigyelő számára a két esemény nem egyidejű.

A K-ban különböző helyeken észlelt egyidejű eseményre (4) alapján

$$\Delta t' = -\gamma \frac{v}{c^2} \Delta x_1 \quad (24)$$

írható. Tehát valahányszor két esemény egyidejűségéről beszélünk, meg kell nevezni azt a vonatkoztatási rendszert amelyben azt megállapítottuk.

A fentiek alapján a következőket állapíthatjuk meg.

A térrel és idővel kapcsolatos adatok megadásánál mindig meg kell nevezni azt a vonatkoztatási rendszert, amelyben ezek az adatok érvényesek. A K-beli adatok csak a K rendszerben használhatók. Abban az esetben, amikor a K-beli információkat egy másik rendszerben kívánjuk hasznosítani, fel kell használni a Lorentz-féle transzformációs képletek által nyújtott átszámítási lehetőségeket.

Einstein, eredményeinek megadásakor, a valós háromdimenziós \bar{x} -teret használta. H. Poincaré egy negyedik koordináta bevezetését és egy négydimenziós absztrakt tér használatát javasolta. Elképzelésit 1908-ban H. Minkowski valósította meg. Minkowski tanúsította, hogy a tér és idő kapcsolatát legtermészetesebb módon az ún. téridő kontinuumban lehet leírni. E négydimenziós térre kidolgozta a vektor- és tenzorszámítás apparátusát.

A téridő egy pontjához az

$$x_1, x_2, x_3, x_4 = ict \quad (25)$$

komponensekkel rendelkező négyes helyzetvektort rendelte. Az ívelemnégyszetre a háromdimenziós euklideszi térre használt kifejezés általánosításának tekinthető

$$ds^2 = dx_1^2 + dx_2^2 + dx_3^2 + dx_4^2 \quad (26)$$

kifejezést használta. A (4)és (5) alatti transzformációs képletek helyett

$$x'_1 = \gamma \left(x_1 + i \frac{v}{c} x_4 \right), \quad x'_2 = x_2, \quad x'_3 = x_3, \quad x'_4 = \gamma \left(-i \frac{v}{c} x_1 + x_4 \right), \quad (27)$$

$$x_1 = \gamma \left(x'_1 - i \frac{v}{c} x'_4 \right), \quad x_2 = x'_2, \quad x_3 = x'_3, \quad x_4 = \gamma \left(i \frac{v}{c} x'_1 + x'_4 \right) \quad (28)$$

írható. Ezek segítségével azonnal belátható, hogy ds^2 invariáns skalár (a K és K'-beli értéke egyezik).

A következőkben Einstein egyes eredményeinek ismertetésekor az egyszerűbb, Minkowski által nyújtott formalizmust használjuk.

4. Alkalmazások és kísérleti bizonyítékok

Einstein 1905-07. között közölt munkáiban az elmélet több olyan következményével foglalkozik, amelyek az elmélet létjogát is tanúsítják. A következőkben ezekből válogatunk.

4.1.. A sebességek összeadása

Egy tehetetlenségi rendszeren belül mért sebességeket a szokásos módon adjuk össze. De hogyan kell eljárunk, amikor két különböző rendszerben mért sebességet akarunk összegezni?

Tekintsük a közös l-es tengely mentén haladó anyagi pontot, amelyre a K'-beli megfigyelő a v' sebességértéket adja. Ugyanerre a mozgásra a K-beli megfigyelő (5) alapján a

$$V = \frac{dx_1}{dt} = \frac{v + v'}{1 + \frac{vv'}{c^2}} \quad (29)$$

sebességértéket adja. E képlet segítségével Einstein feleletet tudott adni arra a kérdésre, amelyik 16 éves korától foglalkoztatta. Milyenek látnának a fényt, ha utol tudnánk érni? Legyen $v'=c$, ekkor $V=c$. Sőt a $v=v'=c$ esetben is $V=c$ adódik. A felelet: a fényt nem lehet utolérni.

A (29) képletet a Fizeau-kísérlet magyarázatára is fel tudjuk használni. A K'-ben mért c/n és a K-ban mért v sebességet összeadva

$$V = \frac{\frac{v + \frac{c}{n}}{1 + \frac{v}{cn}}}{1 + \frac{v}{cn}} = \frac{c}{n} + \left(1 - \frac{1}{n^2} \right) v + \dots$$

adódik. A közelítés során figyelembe vettük, hogy $v \ll \frac{c}{n}$.

4.2. Pontmechanikai alkalmazások

Tekintsük a K' rendszer origójában rögzített anyagi pontot, amelyre a K rendszerben $dx_1=v \cdot dt$ írható. Ekkor (25), (26) és $ds^2=ds'^2$ alapján

$$(v^2 - c^2) dt^2 = -c^2 dt'^2$$

írható. A dt' nyugalmi időtartamra a sajátidő megnevezést és a $d\tau$ jelölést is használjuk. Ekkor a (17)-el egyező

$$dt = \gamma d\tau \quad (30)$$

kapcsolathoz jutunk. (30) helyességét több kísérleti tény igazolja.

E kísérletek két csoportba sorolhatók: a) instabil, nagysebességű elemi részek bomlására vonatkoznak; b) nagysebességű járművek (például repülőgépek) által hordozott atomórákat használnak. Az instabil részek bomlásával kapcsolatban az

$$N = N_0 \exp\left(-\frac{t}{T}\right)$$

képletet használjuk, amelyben T az átlagos élettartamot jelöli. A Földön is észlelhető müonok az atmoszféra felsőbb rétegeiben (16-20 km magasságban) keletkeznek. A müonok élettartamára a táblázatokban a $\tau = 2,2 \cdot 10^{-6}$ s értéket találjuk. Tehát még a c sebességgel mozgó müon is elbomlásáig csak mintegy 0,66 km utat futna be. Azt a tényt, hogy a müonok nagy számban a Földre is eljutnak, B. Rossi 1941-ben azzal magyarázta, hogy τ nyugalmi időtartamot jelöl és a földi megfigyelő a $T = \gamma\tau$ mozgási élettartammal kell számoljon. Ezt a tényt 1963-ban földi körülmények között is igazolták.

R. P. Durbin, H. H. Loar és W. W. Havens 1952-ben a batáviai Fermi-laboratóriumban a töltéssel rendelkező pi-mezonokkal kapcsolatban is ugyanezre a következtetésre jutott. A π^+ , π^- részecskék átlagos nyugalmi élettartama $\tau = (2,60 \pm 0,05) \cdot 10^{-8}$ s. A $v = 0,75 c$ sebességű pi-mezonok esetében a várakozásnak megfelelően a $T = (3,9 \pm 0,3) \cdot 10^{-8}$ s mozgási élettartamot mérték.

1971-ben J. C. Hafele és R. Keating b. típusú igazolást valósított meg. Repülőgépen 15 órán keresztül atomórákat (Cs-órákat) utaztattak, átlagosan 1200 km/h sebességgel. A repülés befejeztekor a sugárhajtóműves repülőgép órája kisebb időt mutatott, mint a repülőtéren maradt másodpéldánya (az atomóra lassabban rezgett). Az atomóra $4,7 \cdot 10^{-8}$ s késése tökéletesen megfelelt az elvárt értéknek.

4.3. Az energia és tömeg kapcsolata

Einstein 1905-ben közölte a „Függ-e egy test tehetetlensége az energia tartalmától” című cikkét, amelyben kimutatta, hogy ha egy test energiát sugároz ki, akkor tömege csökken. A nevével viselő híres képletet 1907-ben közölte. A következőkben e képletet a Minkowski-féle formalizmus segítségével adjuk meg.

Mivel $d\tau$ invariáns skalár segítségével négyes sebességvektort értelmezhetünk:

$$u_1 = \frac{dx_1}{d\tau} = \gamma v_1, \quad u_2 = \frac{dx_2}{d\tau} = \gamma v_2, \quad u_3 = \frac{dx_3}{d\tau} = \gamma v_3, \quad u_4 = ic \frac{dt}{d\tau} = ic\gamma. \quad (31)$$

A klasszikus mechanikában a sebességet tömeggel szorozva az impulzushoz jutunk. Állítva, hogy létezik egy tömegjellegű invariáns skalár, amelyet jelöljünk m_0 -val, négyes impulzus értelmezhető:

$$p_1 = \gamma m_0 v_1, \quad p_2 = \gamma m_0 v_2, \quad p_3 = \gamma m_0 v_3, \quad p_4 = i \gamma m_0 c \quad (32)$$

Foglalkozzunk a p_4 komponenssel. Ha sorbafejtünk v^2/c^2 szerint a

$$p_4 = im_0 c + i \frac{m_0}{2c} v^2 + \dots$$

közelítő kifejezéshez jutunk, amelynek második tagjában megjelenik a c -vel osztott mozgási energia kifejezés. Ezért állíthatjuk, hogy a

$$p_4 = \frac{i}{c} E \quad (33)$$

kifejezésben E energiát jelöl:

$$E = \gamma m_0 c^2. \quad (34)$$

Az

$$m = \gamma m_0 \quad (35)$$

kapcsolatot is gyakran használjuk, amelyben szereplő m_0 -át nyugalmi, m -et pedig mozgási tömegnek nevezük. A fentiek alapján az energia és tömeg kapcsolatát adó Einstein-képlethez jutunk:

$$E = mc^2 . \quad (36)$$

Az energia és hármas impulzus kapcsolatát az

$$E = c\sqrt{\vec{p}^2 + m_0^2 c^2} \quad (37)$$

összefüggés adja.

A (35) alatti tömegképlet érvényességét elsőként nagy pontossággal A. H. Bucherer igazolta 1909-ben.

A relativitáselmélet egyik szimbólumává vált (36) képlet a magfizika és az elemirészfizika nélkülözhetetlen alapösszefüggése.

4.4. A Doppler-effektus

A négyes impulzusra (27) és (28) analógiájára a

$$p'_1 = \gamma \left(p_1 + i \frac{v}{c} p_4 \right), p'_2 = p_2, p'_3 = p_3, p'_4 = \gamma \left(-i \frac{v}{c} p_1 + p_4 \right), \quad (38)$$

$$p_1 = \gamma \left(p'_1 - i \frac{v}{c} p'_4 \right), p_2 = p'_2, p_3 = p'_3, p_4 = \gamma \left(i \frac{v}{c} p'_1 + p'_4 \right) \quad (39)$$

transzformációs képletek írhatók.

Az Einstein-féle fényelméletben (7), $m_0 = 0$ és (37) alapján a fotonra

$$\vec{p} = \frac{h\nu}{c} \vec{n}, p_4 = i \frac{h\nu}{c} \quad (40)$$

írható, ahol \vec{n} a foton mozgásirányába eső egységvektor. Amennyiben $n_3 = 0$ (38) és (40) alapján a

$$v' n'_1 = \gamma v \left(n_1 - \frac{v}{c} \right), v' n'_2 = v n_2, v' = \gamma v \left(1 - \frac{v}{c} n_1 \right) \quad (41)$$

és (39), (40) alapján a

$$v n_1 = \gamma v' \left(n'_1 + \frac{v}{c} \right), v n_2 = v' n'_2, v = \gamma v' \left(1 + \frac{v}{c} n'_1 \right) \quad (42)$$

transzformációs képletek adódnak.

Alkalmazzuk e képleteket két speciális esetre.

Tekintsük a K' rendszer origójában rögzített fényforrást. A K -tól v sebességgel távolodó fényforrásból a K rendszer origója felé kibocsátott fotonra $n_1' = -1$ és (42) alapján

$$v_1 = \gamma v' \left(1 - \frac{v}{c} \right)$$

adódik. Amennyiben K' $-v$ sebességgel közeledik K -hoz, a K -beli megfigyelő a

$$v_2 = \gamma v' \left(1 + \frac{v}{c} \right)$$

frekvenciát állapítja meg. A két frekvenciaérték számtani középértékére

$$\bar{v} = \gamma v' = v' \left(1 + \frac{v^2}{2c^2} + \dots \right) \quad (43)$$

írható. (43) helyességét H. I. Ives, G. R. Stilwell 1938-ban és G. Otting 1939-ben kísérletileg igazolta. Fényforrásként nagysebességű gerjesztett csősugár ionokat használtak.

Rögzítsük a fényforrást a K rendszer kezdőpontjában. Tekintsük a 2-es tengely irányában kibocsátott fotont. A foton mozgási irányára merőleges irányban haladó K'-beli megfigyelő frekvenciaváltozást észlel. A változást transzverzális Doppler-effektusnak nevezzük. A K rendszerbeli ν frekvencia és a K'-beli ν' frekvencia kapcsolatát a (41) alatti harmadik képlet adja:

$$\nu' = \gamma \nu . \quad (44)$$

(44) helyességét a Mössbauer-effektussal igazolták. A fotonforrást kristályos anyagban lévő gerjesztett atommagok képviselték.

4.5. Az aberráció

A (41) alatti képletekből a foton K és K'-beli mozgás irányának kapcsolatára

$$n'_1 = \frac{n_1 - \frac{v}{c}}{1 - \frac{v}{c} n_1}, \quad n'_2 = \frac{n_2}{\gamma \left(1 - \frac{v}{c} n_1\right)} \quad (45)$$

adódik. Tehát az állócsillagból érkező fényt a K és K'-beli megfigyelők különböző irányúnak észlelik.

Abban a speciális esetben, amikor a csillagfény a K rendszerben a 2-es tengely mentén érkezik: (45)-ből $n_1 = 0$, $n_2 = -1$ figyelembevételével a K'-beli fénysugár irányára az

$$n'_1 = -\frac{v}{c}, \quad n'_2 = -\frac{1}{\gamma}$$

egységvektor-komponenseket nyerjük.

Zárjuk a fentieket két megjegyzéssel.

A Lorentz-féle transzformációs képletek olyan kis v/c értékekre, amelyek esetében a v^2/c^2 nagyságrendű tagok már elhanyagolhatók, a Galilei-féle transzformációs képletekkel helyettesíthetők. Ezzel magyarázható, hogy egyes ún. elsőrendű hatásokra (például az aberrációra) miért tudott a klasszikus elmélet kielégítő eredményt szolgáltatni.

A 20. század elején két új elmélet, a speciális relativitáselmélet és a kvantumelmélet alapjait rakták le. Einstein fényelméletével elsőként tudatosította azt, hogy kidolgozhatók olyan elméletek, amelyek mindkét elmélet követelményeit teljesítik. Azt is tudta, hogy a Maxwell-elmélet nem teljes, csak a hullámtulajdonságok leírására alkalmas. Einstein megtalálta a továbblépés útját és megtette az első lépést egy új elmélet, a kvantumelektrodinamika kidolgozása terén. Az új elmélet az elektromágneses mező korpuszkuláris sajátosságainak leírására is alkalmas.

A molekulaméret szerepe egyszerű szerves folyadékok leírásában

The Role of Molecular Size in the Description of Simple Organic Liquids

Buchwald Péter

IVAX Research, Inc.,
4400 Biscayne Blvd, Miami, FL 33137, USA

Abstract

Molecular size has a fundamental role in determining the properties of liquids and solutions. Here, a recently developed, simplified, molecular size-based model for liquids is briefly reviewed and a number of illustrative applications are presented. Within the context of the World Year of Physics, it is also recalled that one of Einstein's famous five articles from his 1905 annus mirabilis (miraculous year) was on the determination of molecular dimensions in liquids.

Összefoglaló

A molekulák térbeli mérete alapvető szerepet játszik a folyadékok és oldatok tulajdonságainak meghatározásában. A jelen cikk egy nemrégiben kidolgozott molekuláris térfogatra épülő egyszerűsített folyadékmodell lényegét foglalja össze, és számos alkalmazását szemlélteti. A Fizika Világéve jegyében egyúttal azt is felidézi, hogy Einstein 1905-ös annus mirabilis-e (csodás éve) híres öt cikkének egyike éppen a molekuláris méret folyadékokban történő meghatározásáról szólt.

Kulcsszavak: molekuláris méret (dimenzió), folyadék, víz, ciklodextrin komplex, biológiai hatás

1. Bevezetés

1.1. Anni mirabilis

A tudományok területén kétségkívül kevés olyan megemlékezésre érdemesebb év van, mint az 1905-ös, Einstein *annus mirabilis*-e (csodás éve). Ez volt az az év, amelyben az akkor 26 éves Einstein a berni Szabadalmi Hivatal alkalmazottjaként gyors egymásutánban közölt öt, egyszerűs és jóformán irodalmi hivatkozás nélküli cikket az *Annalen der Physik*-ben, melyek a kvantumfizika hullám-részecske kettőségének kezdetét (fényelektromos hatás) [1], az atomelmélet végleges bizonyítását (Brown-mozgás [2], molekuláris méret folyadékokban [3]), valamint a (speciális) relativitáselmélet alapjait [4, 5] jelentették [6, 7]. A szellemi teljesítmény szempontjából, ez az év csak a tudomány által jegyzett egyetlen másik *annus mirabilis*-hez, Newton 1665–66-ös évéhez hasonlítható. Ekkor ugyanis Newton talán nagyobb áttörést jelentő felfedezéseket tett a differenciál- és integrálszámítás, az optika, a tömegvonzás (gravitáció), valamint a mechanika alaptörvényeinek lefektetésével, igazából mintegy 18 hónap alatt, amikor a cambridge-i pestisjárvány elől szülőfalujába, Woolsthorpe-ba menekült [8]. Viszont Einsteinnel ellentétben, aki gyakorlatilag azonnal leköszölte eredményeit, Newton, aki közismerten nehéz természetű és a titoktartás, meg az aprólékos részletek megszállottja volt, sok felismerésén évekig rágódott, mielőtt nyilvánosságra hozta volna őket. Így például főművét, a *Philosophiae Naturalis Principia Mathematica*-t csak 1687-ben közölte, és akkor is csak Halley nógatasának és pénzügyi segítségének köszönhetően. Newton azonban nem teljesen alaptalanul volt óvatos közléseiben. Amint ez utólag, a huszadik század közepén újból felbukkant jegyzeteiből kiderült, a fizikánál jóval többet – több mint egymillió és teljesen értéktelen szót – írt alkímiáról és valószínűleg ennél is többet az anglikán egyházzal szakító, eretneknek minősülő teológiai fejtegetéseiről [8].

1.2. Molekulák folyadékban

A kvantumfizika és a relativitáselmélet térhódításával mára már kevésbé köztudott, hogy az 1905-ös cikkek egyike [3], amely 1906 januárjában jelent meg és egyben Einstein doktorátusi tézise, valamint hosszú időn keresztül legidézettebb (!) cikke is volt [7], a kinetikus molekula-elmélet folyadékokban való alkalmazásáról szól a molekuláris méret meghatározásának céljával. Az ott bevezetett, mára általánosítottabb alakban Stokes-Einstein egyenletként [9] ismert összefüggés (Einstein eredeti jelölésében [3])

$$D = \frac{RT}{6\pi\eta} \frac{1}{NP} \quad (1)$$

segítségével és a cukor vízben való oldódási adatainak felhasználásával Einstein a cukor-molekula becslött effektív hidrodinamikai sugaraként annak idején 4,9 Å-t ($4,9 \times 10^{-10}$ m-t) kapott, N -nek pedig, elfogadható becslésként $6,56 \times 10^{23}$ mol⁻¹-t. A fenti egyenletben D a diffúziós együttható, η a viszkozitás (szokásos mai jelöléssel általában η), N az Avogadro szám (N_A), R az egyetemes gázállandó, T az abszolút hőmérséklet, és P az effektív hidrodinamikai sugár (r_e , a).

Ahhoz képest, hogy az elmúlt száz évben mi minden történt a többi területen, a közönséges folyadékok molekuláris elmélete terén nem került sor igazi áttörésre [10]. A mai napig az egyik legtöbb gondot okozó probléma éppen az, hogy e fázist még mindig nem sikerült molekuláris szinten igazából jól leírni, annak ellenére, hogy a kémiai és biokémiai folyamatok legnagyobb része éppen folyadékokban vagy azok határfelületén játszódik le. Ez már csak azért is különösen frusztráló, mert a gáz és a kristályos szilárd halmazállapotok ugyanezen a szinten meglehetősen jól leírhatóak és a folyadékok nyilvánvalóan valahol e két fázis „között” találhatóak. Ráadásul, mivel a földi élet bensőségesen folyadékokon alapul és a kémia / biokémia / gyógyszerészet területein a mai napig nagyon sok szempontból érvényes az annak idején az alkímikusok által megfogalmazott tapasztalat, hogy az anyagok hatásaikat csak oldatban fejtik ki (*corpora non agunt nisi soluta*), így az oldatok és folyadékok használható leírása igencsak fontos lenne nemcsak a fizika, de egyéb területek számára is. Az már csak apró gond, hogy az élet (legalábbis az általunk ismert formájában) és mindennapi folyadék-tapasztalataink vízre épültek, márpedig a víz meglehetősen egyedi és sajátos folyadék. A legutóbbi évek számítógépes / molekuláris dinamikai szimulációi ugyan ígéretes fejlődést jentettek, de ezek csak számítástechnikai modellekkel szolgálhatnak és nem olyan áttörő fizikai-kémiai elméletekkel, amelyek elegáns kapcsolatot teremthetnének a folyadékok intermolekuláris kölcsönhatásai és megfigyelhető makroszkopikus tulajdonságai között. Márpedig valamilyen ilyen kapcsolatnak léteznie kellene, ha másképp nem, hát Einstein világképének szellemében mindenképpen, hisz ő volt az, aki még a kvantummechanikával való szakítás árán is ragaszkodott azon elvéhez, hogy *Raffiniert ist der Herr Gott, aber boshaft ist Er nicht* (Az Úr körmönfont, de nem kaján). Saját bevallása szerint értve ez alatt azt, hogy a Természet fenséges és elrejti titkait, de nem rosszindulatú fortélyból – tehát jól feltett kérdésekre igenis van válasza [6, 7].

2. Molekulaméreten alapuló folyadék modell

Az elmúlt évek során a dolgok úgy alakultak, hogy több területen dolgozva is vissza-visszatérő módon nyilvánvalóvá vált számomra a molekuláris méret lényeges szerepe folyadékok és oldatok fizikai-kémiai tulajdonságainak, sőt biológiai hatásának meghatározásában is. Ezen indíttatásból sikerült kidolgozni előbb egy, a molekulák háromdimenziós méretét (felületét és térfogatát) kiszámoló számítógépes programot, majd egy statisztikus mechanikán alapuló megközelítés segítségével egy molekuláris méreten alapuló egyszerűsített modellt, amely olyan szerves folyadékok esetén, amelyek nem tartalmaznak sem hidrogénkötésre-alkalmas, sem erősen poláris szubsztituenseket, képes a fizikai-kémiai tulajdonságok széles skálájának egységesített leírására (párolgáshő, forráspont, Ostwald abszorpciós együttható, felületi feszültség, megoszlási hányadosok, vízdoldhatóság, zárványkomplexek stabilitása).

2.1. Térfogat- és felület-számítási algoritmus

A van der Waals sugár fogalmának gyakorlati sikere jó kiindulási alapot szolgáltat a molekuláris felület és térfogat egyszerű számítógépes megbecslésére annak ellenére, hogy egy egzakt kvantumfizikai leírásban az elektronfelhőnek nincs jól meghatározott határfelülete. Ebben a megközelítésben a molekula valamennyi atomját egy-egy olyan gömb jelképezi, melynek középpontja az atommag egyensúlyi helyzetének felel meg és melynek sugara a megfelelő atom van der Waals sugarával egyenlő (mint ezt a 3. ábra is szemlélteti). A gömbök külső felülete határozza meg a van der Waals felületet és ez határolja az úgynevezett van der Waals térfogatot. Az itt leírt modellek mindegyike ezen v van der Waals térfogatra épült. Más méretjellemzők is használatosak (például az oldószer által hozzáférhető- vagy az érintkezési felületet), de ezek általában elég szorosan

korreláltak egymással ahhoz, hogy megfelelő konvertálás után egymással helyettesíthetők legyenek. A van der Waals felületről kimutatták, hogy jól képviseli azon állandó elektronsűrűségű ($0,001-0,002$ elektron/ a_0^3) felületeket, melyek a teljes elektromos töltés több mint 96%-át tartalmazzák [11], így használatukkal fizikailag is helyes képet kapunk. Mivel e méretjellemzők háromdimenziós paraméterek, pontosabban jellemzik a molekula méretét vagy alakját, mint olyan egyszerű, ám a kémiában sűrűn használatos paraméterek, mint például a szénatomok száma vagy a molekulatömeg.

A számolás egy olyan algoritmus segítségével történik, amely analitikus és numerikus módszereket kombinálva gyorsítja fel a térfogat és felület kiszámítását [12]. Például az individuális atomok hozzájárulásának összegezése után, a szomszédos atom-gömbök felületi átfedését a differenciális geometria Gauss-Bonnet képletével számolják ki, kihasználva azt a tényt, hogy a gömbfelületek Gauss-görcülete és a gömbfelületen levő metszési körök geodéziai görbülete (κ_g) állandó:

$$S = r_k^2 (2\pi - \sum_e \kappa_g^e l_e - \sum_v \beta_v) \quad (2)$$

Itt r_k azon gömb sugara, melyen a megfelelő felület fekszik, az első összegezés a felületet határoló éleken, a második pedig ezen élek metszéspontjain történik; l_e az e él ívhosszúsága, β_v pedig a külső metszésszög a v metszéspontban. A megfelelő térfogat számítása egy, a hármas átfedés térfogatának kiszámítására Rowlinson által leírt képlet felhasználásával történik az egyenlőtlen sugarak esetére való általánosítás után. Szerkezetileg távol eső atomok között aránylag ritkán fordul elő átfedés, de amennyiben az algoritmus egy ilyen átfedést észlel – ahol a többszörös átfedés miatt ezen analitikus képletek nem használhatóak, a megfelelő felületkorrekciót egy gyors, szférikus koordinátákon alapuló numerikus módszer segítségével számolja ki.

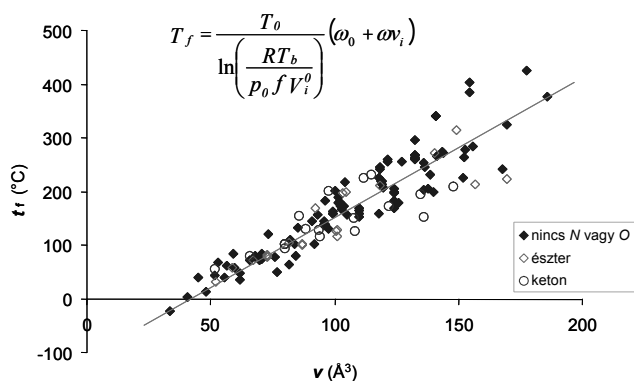
2.2. Egyszerűsített, molekulaméretre alapuló folyadék-modell

A modell részletes leírása megtalálható a szakirodalomban [13-15]. A megfelelő kémiai potenciált egy nagyrészt Ben-Naim által bevezetett [16] statisztikus mechanikai formalizmusban [17] vezették le. Röviden összefoglalva, a három alapvető egyszerűsítő feltevés a következő: (1) A folyadék-fázis teljes térfogata a jelen levő molekulák számának (N_i) és molekuláris térfogatának (v_i) egyszerű lineáris függvénye, tehát például két komponens esetén: $V = a(N_i v_i + N_j v_j)$. (2) A molekulák szabad (transzlációs) mozgásának rendelkezésére álló térfogat a folyadék teljes térfogatának csak egy aránylag kis töredéke: $V^{\text{szabad}} = fV$ ($f < 1$ és számításaink alapján f értéke 2–3% körülire becsülhető a jelen modell alapján). E két feltételezés gyakorlatilag megegyezik Hildebrand-éval [18]. (3) Azon egyszerű szerves folyadékok esetén, amelyek nem tartalmaznak sem hidrogénkötésre alkalmas, sem erősen poláris szubsztituenseket, és amelyekben tehát a nem specifikus van der Waals kölcsönhatásoknak van meghatározó szerepük, a kötődési energia és egyúttal egy rögzített helyzetben levő molekula környezetéhez való kapcsolódási munkája a molekuláris térfogattal lineárisan változóan tekinthető: $W = -w_0 - wv$. Ez utóbbi a jelen modell leglényegesebb egyedi sajátossága.

Összefoglalva tehát a folyadék-fázisban levő molekulákat úgy tekintjük, mintha a teljes folyadék-térfogat saját méretük által ki nem zárt részében szabadon mozoghatnának, egy, a körülöttük levő molekulák által létrehozott átlagolt erőtervonzó hatása alatt, és az egyes molekulák potenciálja a molekuláris térfogattal lineárisan változóan feltételezhető. E feltevések alapján az alábbi $\mu_i^{\text{sol},j}$ kémiai potenciált lehetett bevezetni a j oldószerben levő i oldatmolekula leírására [13]:

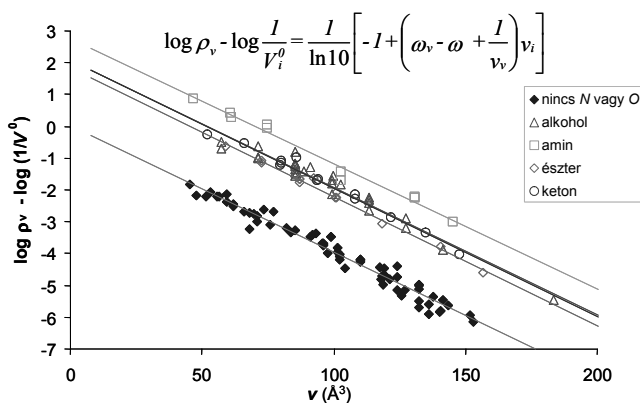
$$\mu_i^{\text{sol},j} = kT \ln \left(\frac{\rho_i}{f} \Lambda_i^3 \right) - \left(w_{ij} + \frac{kT}{v_j} \right) v_i - w_0 + kT \quad (3)$$

A fenti egyenletben k a Boltzmann állandó, T az abszolút hőmérséklet, ρ a részecskesűrűség, Λ a termikus de Broglie hullámhossz, míg w -k a kölcsönhatások leírására használt állandók, melyek hasonló folyadékok esetén feltételezhetően azonos értékűek. Az itt leírt egyszerűsített molekulaméretre alapuló modell $w_0 = 5,39$ és $w = 0,082$ értékeket használva ($w = \omega kT_0$, $T_0 = 298,15$ K), a variáció mintegy 80–90%-át képes megmagyarázni olyan különböző tulajdonságok esetén mint pld. párolgáshő, forráspont, Ostwald abszorpciós együttható, megoszlási hányadosok és vízdoldhatóság [15]. Szemléltetésképpen a forráspont és a vízdoldhatóság adatait a megfelelő képletekkel együtt az 1. és 2. ábrán mutatjuk be. A perspektíva kedvéért érdemes megemlíteni, hogy ez az egyenlet magába foglalja az ideális gáz esetét is [$\mu^{\text{id.gáz}} = kT \ln(\rho \Lambda^3)$], amennyiben feltételezzük, hogy $w = w_0 = 0$ (nincs kölcsönhatás) és $f = 1$ (a teljes térfogat hozzáférhető/szabad). A van der Waals reális gázmodell pedig $V^{\text{szabad}} = V - Nb$ és $W = -aN/V$ -nek felelne meg, az itt használt $V^{\text{szabad}} = fV$ és $W = -w_0 - wv$ helyett.



1. ábra

A forráspont a molekuláris térfogat függvényeként.
A vonal a modell által számolt értéket jelöli

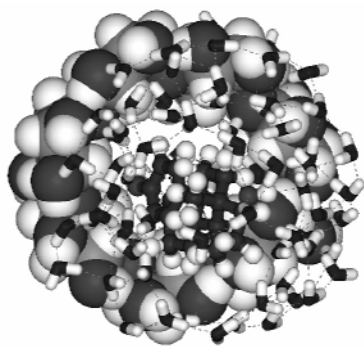


2. ábra

Vízoldhatóság a molekuláris térfogat függvényeként.
A méretfüggés valamennyi csoportban
gyakorlatilag azonos

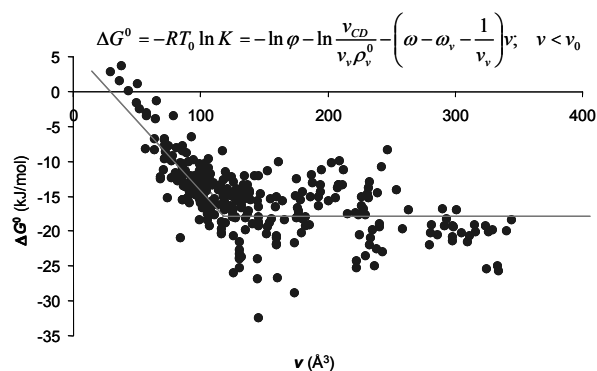
Érdekes módon a víz, annak ellenére, hogy erősen hidrogén-kötött és így igencsak szokatlan folyadék, meglehetősen jól beilleszthető e modell keretei közé mindössze egy megváltoztatott kölcsönhatási állandó segítségével ($\omega_v = -0,070$) [14]. Ez nemcsak jól illeszkedő vízoldhatóságokat (2. ábra) illetve megoszlási hányadosokat ($\log P$) eredményez, hanem jól egyeztethető Muller módosított hidratációs-burok hidrogénkötéses vízmodelljével is [19]. Ez azért is érdekes, mert a víz számos egyedi tulajdonsággal rendelkezik, elsősorban abból adódóan, hogy minden vízmolekula 4–4 hidrogénkötésre képes (2 donor, 2 akceptor) és ezek folyadék fázisban is nagyrészt jelen vannak. A víz olvadás és forráspontja jóval magasabb (t_0 0°C , t_f 100°C), mint az a mérete alapján következne: a hasonló H_2Te (t_0 -49°C , t_f -2°C), H_2Se (t_0 $-65,7^\circ\text{C}$, t_f $-41,3^\circ\text{C}$) és H_2S (t_0 $-85,5^\circ\text{C}$, t_f $-59,6^\circ\text{C}$) sorozatból extrapolálva a H_2O víznek (t_0 -91°C , t_f -73°C) következne, így, hidrogénkötések nélkül, Földi körülmények között nem is kéne folyadékként léteznie. A legtöbb folyadékkal ellentétben a víz fagyáskor kitágul (normál nyomáson és 0°C -on $18,02\text{ cm}^3/\text{mol}$ -ról $19,66\text{ cm}^3/\text{mol}$ -ra); ez csak néhány szerkezetileg hasonló anyag esetében van még így, pld. gyémánt, szilícium, germánium. A víz hőkapacitása (C_p $75,32\text{ J/mol}\cdot\text{K}$, 25°C), valamint olvadás- ($6,01\text{ kJ/mol}$, 0°C) és párolgáshője ($40,66\text{ kJ/mol}$, 100°C) szintén szokatlanul nagy. A víz szobahőmérsékleten is még nagyrészt tetrahedrálisan hidrogén-kötött szerkezetét a 3. ábrán található néhány vízmolekula (sötétebb színben jelölve) is jól szemlélteti (hidrogénkötések: vékony, szaggatott vonalak).

Legújabbban a ciklodextrin zárványkomplexek stabilitását is sikerült ezen egyszerűsített modell keretei közé beilleszteni [20]. A ciklodextrinek (CD) különböző számú α -1,4-kapcsolódó glükóz egységekből felépülő tórusz-alakú oligoszacharidok (6, 7 illetve 8 egység α -, β - illetve γ -ciklodextrinnek felel meg). Az egységek száma határozza meg azon kúpszelet alakú üreg méretét, melynek szélesebb pereme mentén a szekunder, keskenyebb pereme mentén pedig az elsődleges hidroxilcsoportok helyezkednek el (3. ábra). Ezen üregben különböző anyagok illeszkedhetnek be, stabil zárványkomplexeket alkotva. A gazda-vendég zárványkomplex kialakulása általában kovalens kötések kialakulása nélkül, a vendégmolekula egyszerű térbeli zárványképzésével történik. Az elmúlt években a CD-ek széles körben használták fel például az oldhatóság javítása, a hidrolízisre vagy más lebomlásra érzékeny molekulák stabilizálása, a gyógyszerek biológiai elérhetőségének javítása, folyadékok porrá való átalakítása, avagy szag-, illetve íz-jellemzők javítása céljából. A vendégmolekula méretének növekedésével a zárványkomplex stabilitása ($\log K$, K asszociációs konstans) nagyjából lineárisan növekedik egy, a CD-re jellemző felső mérethatár eléréséig, majd innen nagyjából stagnál, egyéb, specifikusabb kölcsönhatások függvényében (4. ábra). Mind az iránytangens, mind a tengelymetszet jól egyezik a modelltől számolt értékekkel, és a komplex képződése által okozott hőkapacitásváltozás is egyezik a modell alapján jósolható értékekkel [20].



3. ábra

Egy β -ciklodextrin–ösztadiol zárványkomplex illusztratív szerkezete néhány körülvevő vízmolekulával együtt



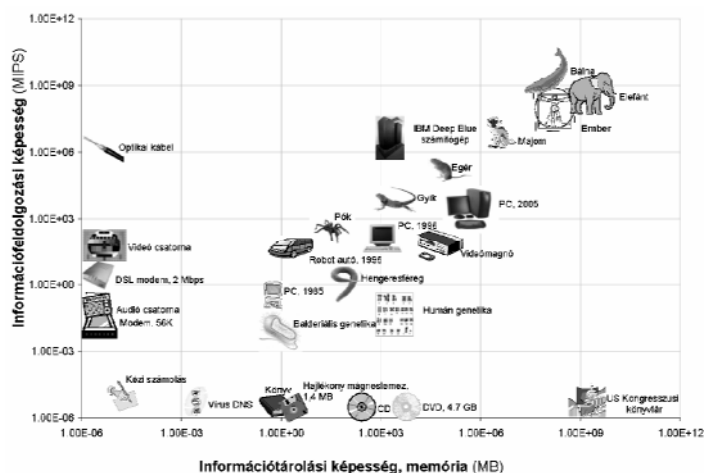
4. ábra

Az 1:1 komplexek standard Gibbs szabad-entalpiájának méretfüggése β -ciklodextrin esetén. A vonal a modellt képviseli

3. Molekulaméret és biológiai hatás

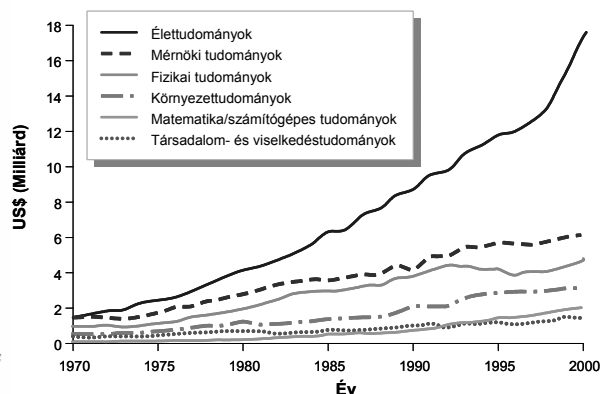
Míg a XX. század kétségkívül mindenekelőtt a fizika és a technika százada volt, a XXI. minden valószínűség szerint a számítógép és az élettudományok (biológia, élettan, genetika, gyógyszerkutatás, orvostudományok) százada lesz. Bár persze könnyű tévedni, hiszen 1905. előtt csupán pár évvel, nem kisebb fizikusok, mint Kelvin és Michelson jelentették ki határozottan, hogy a fizikában új felfedezések már nem várhatóak, csak egyre pontosabb mérések. A technika iszonyatos fejlődése következtében az élet működési mechanizmusai kezdenek egyre világosabbakká válni, és az elmúlt század során az információtárolási és -kezelési képességben elért haladásnak köszönhetően, immár kezdjük megközelíteni azt, amire a földi evolúciónak mintegy négy milliárd évre volt szüksége. Ezt jól szemlélteti a MIPS-ben (*millions of instructions per second*, másodpercenkénti egymillió művelet) mért információ-feldolgozási képesség, valamint a megabyte-okban (MB) mért információtárolási képesség (memória) alapján készült összehasonlítás (5. ábra), amely [21] után készült újabb adatok hozzáadásával. Az ábra mindkét tengelye logaritmusos beosztású, így egy-egy beosztás ezerszeres növekedésnek felel meg. Az élő szervezetekre vonatkozó értékek természetesen becslések, de nagyjából reálisnak tekinthetők. Mindezek alapján várható, hogy ha lassan is, de az élettudományok is egyre szaktabbakká és így egyre sikeresebbekké válnak, hisz ahogy Wigner megállapította: „A természettudományok területén a matematika nyelvezete megmagyarázhatatlanul hatékonyan bizonyul... egy csodálatos ajándék, melyet se nem értünk, se nem érdeklünk”. Másrészt, lehetünk ugyan idealisták, de azt azért kár tagadni, hogy hosszú távon a tudósok és kutatók nagy része (és így a tudomány maga is) végül is a pénzt követi. Ez nem új jelenség. Az emberiség történelme során ez mindig is így volt [22]. Ilyen szempontból, a világ alighanem messze legnagyobb tudományos befektetőjének, az Egyesült Államok szövetségi kormányzatának civil szférára vonatkozó kutatási- és fejlesztési költségvetésének alakulása [23] meglehetősen egyértelmű irányt jelöl ki, egyre nagyobb hangsúlyt fektetve az élettudományokra (6. ábra).

A már említett okokból kifolyólag a molekulaméret viszont az élettudományok területén is sok mindent döntő módon befolyásoló szerepet tölt be. A ma már egyre sűrűbben használt kvantitatív szerkezet-hatás összefüggések (QSAR) területén a molekuláris méret és a hidrogénkötési képesség az a két jellemző, amely a legnagyobb rendszerességgel felbukkan, mint a legkülönbözőbb tulajdonságok befolyásolója. Hely hiányában hadd említsek itt meg épp csak néhány olyan konkrét példát, amellyel saját munkám során találkoztam. Azt, hogy egy a bőr felületére alkalmazott (vagy került) anyag mennyire szívódik fel, a bőrön (vagy más biomembránon) való áthatoló-képessége határozza meg. Az ezen képességet jellemző permeabilitási együttható (φ_b), amely egyébként szorosan kapcsolódik a sokszor pontosan a Stokes-Einstein képlet (1. egyenlet) segítségével jellemezhető D diffúziós együtthatóhoz: $\varphi_b = D_b P_{b/v} / h$, hasonló szerkezetek esetén exponenciálisan növekszik a mérettel. Tehát például alkoholok esetén: $\log \varphi_b$ (cm/s) = $0,020v$ (Å^3) - 7,444 ($n = 12$; négyzetes korrelációs együttható: $r^2 = 0,957$). Egy a hidrogénkötési képességet jellemző paraméter (N) segítségével ezt sikerült általánosítani az anyagok széles körére: $\log \varphi_b$ (cm/s) + $0,723N = 0,0208v$ (Å^3) - 6,25 ($n = 98$; $r^2 = 0,913$) [24].



5. ábra

A számítási teljesítmény (MIPS) és a tárolási képesség (memória, MB) alapján készült összehasonlítás (nagy részét [21] alapján)

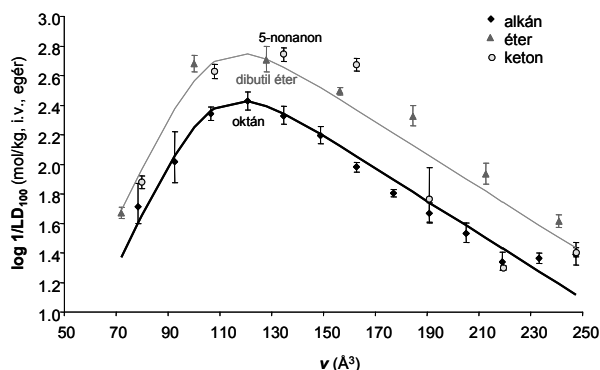


6. ábra

Az USA szövetségi kormányzatának civil szférára vonatkozó K&F költségvetésének alakulása ([23] alapján)

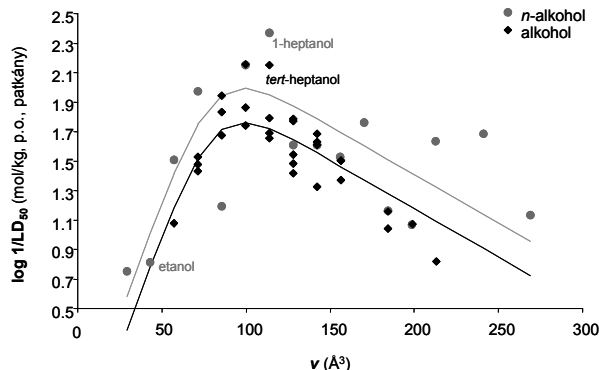
A biológiai hatások (aktivitás és/vagy toxicitás), amelyeket a legtöbbször az egyedek adott (pl. 50%) százalékában bizonyos hatást kifejtő koncentráció segítségével szoktak jellemezni (pl. az effektív vagy a toxikus dózis középértékei: ED_{50} , TD_{50}), szintén gyakran mutatnak (logaritmikus skálán) lineáris méretfüggést. Meglehetősen sűrűn fordul elő egy másik lehetőség is: úgynevezett bilineáris függés egy maximum (vagy minimum) két oldalán. Két ilyen esetet mutat be a 7. és 8. ábra: egyenes-láncú alkánok, ketonok és éterek intravénás toxicitása egerekben [25], illetve alkoholok szájon keresztüli toxicitása patkányokban (LD_{50} adatok a ChemIDplusAdvanced honlapjáról, <http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/chemidheavy.jsp>). Mindkét esetben nyilvánvaló a méret meghatározó szerepe, a bilineáris függés (különösen a 7. ábrán), valamint az, hogy maximális toxicitás egy aránylag jól behatárolt v_0 méret körül várható (kb. az oktán ill. heptanol körül). Az ilyen adatok leírására a QSAR területén sűrűn alkalmazott lineáris regresszió nem használható. A közelmúltban viszont sikerült egy igen általános fizikai-kémiai kereten belül kifejlesztett linearizált biexponenciális (LinBiExp) modellt bevezetni [26] (1. 4. egyenlet; a , b , c , ξ_0 illeszthető paraméterek, $\eta = 1/\ln 10$) amely képes az ilyen adatok megfelelő leírására tetszőleges ξ fizikai-kémiai tulajdonság függvényeként a bilineáris jelleg megőrzése mellett, amint azt a mellékelt 7. és 8. ábrák görbéi is illusztrálják.

$$f(\xi) = -\eta \ln \left[e^{-a(\xi-\xi_0)/\eta} + e^{b(\xi-\xi_0)/\eta} \right] + c \quad (4)$$



7. ábra

Egerekben mért legmagasabb tolerált dózis (LD_{100}) intravénás (i.v.) infúzió esetén, mint a molekuláris méret függvénye



8. ábra

Alkoholok 50%-ban halálos dózisa (LD_{50}) patkányokban szájon keresztüli (per os) adagolás esetén

Irodalom

- [1] Einstein, A. Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt. (On a heuristic point of view about the creation and conversion of light) *Ann. Phys. (Leipzig)*, **1905**, *17*, 132-148.
- [2] Einstein, A. Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen. (On the motion of small particles suspended in liquids at rest required by the molecular-kinetic theory of heat) *Ann. Phys. (Leipzig)*, **1905**, *17*, 549-560.
- [3] Einstein, A. Eine neue Bestimmung der Moleküldimensionen. (A new determination of molecular dimensions) *Ann. Phys. (Leipzig)*, **1906**, *19*, 289-306.
- [4] Einstein, A. Zur Elektrodynamik bewegter Körper. (On the electrodynamics of moving bodies) *Ann. Phys. (Leipzig)*, **1905**, *17*, 891-921.
- [5] Einstein, A. Ist die Trägheit eines Körpers von seinem Energieinhalt abhängig? (Does the inertia of a body depend upon its energy content?) *Ann. Phys. (Leipzig)*, **1905**, *18*, 639-641.
- [6] Clark, R. W. *Einstein: The Life and Times*, Avon: New York, **1972**.
- [7] Pais, A. *Subtle is the Lord: The Science and the Life of Albert Einstein*, Oxford University Press: New York, **1982**.
- [8] Gleick, J. *Isaac Newton*, Vintage: New York, **2004**.
- [9] Silbey, R. J.; Alberty, R. A.; Bawendi, M. G. *Physical Chemistry*, 4th ed., Wiley: New York, **2005**.
- [10] Hirschfelder, J. O.; Curtiss, C. F.; Bird, R. B. *Molecular Theory of Gases and Liquids*, Wiley: New York, **1964**.
- [11] Bader, R. F. W.; Carrol, M. T.; Cheeseman, J. R.; Chang, C. Properties of atoms in molecules: atomic volumes. *J. Am. Chem. Soc.*, **1987**, *109*, 7968-7979.
- [12] Bodor, N.; Buchwald, P. Molecular size based approach to estimate partition properties for organic solutes. *J. Phys. Chem. B*, **1997**, *101*, 3404-3412.
- [13] Buchwald, P.; Bodor, N. Molecular size-based model to describe simple organic liquids. *J. Phys. Chem. B*, **1998**, *102*, 5715-5726.
- [14] Buchwald, P. Modeling liquid properties, solvation, and hydrophobicity: a molecular size-based perspective. *Perspect. Drug Disc. Des.*, **2000**, *19*, 19-45.
- [15] Buchwald, P.; Bodor, N. Simple model for nonassociative organic liquids and water. *J. Am. Chem. Soc.*, **2000**, *122*, 10671-10679.
- [16] Ben-Naim, A. *Solvation Thermodynamics*, Plenum: New York, **1987**.
- [17] Hill, T. L. *An Introduction to Statistical Thermodynamics*, Dover: New York, **1986**.
- [18] Hildebrand, J. H. The entropy of solution of molecules of different size. *J. Chem. Phys.*, **1947**, *15*, 225-228.
- [19] Muller, N. Is there a region of highly structured water around a nonpolar solute molecule? *J. Solution Chem.*, **1988**, *17*, 661-672.
- [20] Buchwald, P. Complexation thermodynamics of cyclodextrins in the framework of a molecular size-based model for nonassociative organic liquids that includes a modified hydration-shell hydrogen-bond model for water. *J. Phys. Chem. B*, **2002**, *106*, 6864-6870.
- [21] Moravec, H. P. *Robot: Mere Machine to Transcendent Mind*, Oxford University Press: New York, **1999**.
- [22] Wilson, E. O. *Consilience: The Unity of Knowledge*, Knopf: New York, **1998**.
- [23] Malakoff, D. Balancing the science budget. *Science*, **2000**, *287*, 952-955.
- [24] Buchwald, P.; Bodor, N. A simple, predictive, structure-based skin permeability model. *J. Pharm. Pharmacol.*, **2001**, *53*, 1087-1098.
- [25] Jeppsson, R. Parabolic relationship between lipophilicity and biological activity of aliphatic hydrocarbons, ethers and ketones after intravenous injections of emulsion formulations into mice. *Acta Pharmacol. Toxicol. (Copenh.)*, **1975**, *37*, 56-64.
- [26] Buchwald, P. General linearized biexponential model for QSAR data showing bilinear-type distribution *J. Pharm. Sci.*, **2005**, *94*, in press.

Korlátozza-e a precessziós átmágnesezés sebességét a kvantummechanikai bizonytalanság?

Does the Quantummechanical Uncertainty Limits the Speed of the Precessional Magnetization?

Kádár György¹, Lovas István²

¹Research Institute for Technical Physics and Materials Science,
H-1525 Budapest, POBox 49, Hungary

²University of Debrecen, Department of Theoretical Physics,
H-4032 Debrecen, Egyetem tér 1, Hungary

Abstract

I. Tudosa et al. performed an experiment by the help of electrons of the SLAC in order to investigate the precessional magnetisation process. The result of the experiment was interpreted as the collapse of the ferromagnetic structure due to the too short (2.3 picosec) and too intensive magnetic field. It was concluded that an upper limit of the speed of the precessional magnetization has been reached. In this work we investigate the time dependence of the quantummechanical uncertainty occurring in the experiment.

Összefoglalás

I. Tudosa és munkatársai egy precessziós átmágnesezési kísérletet hajtottak végre a SLAC 28 GeV energiájú elektronjaival. A kísérlet eredményét azzal értelmezték, hogy a túl rövid (2.3 picosec) és a túl intenzív mágneses tér hatására a ferromágneses rendezettség felbomlik. Ebből arra következtettek, hogy elérték a precessziós átmágnesezés sebességének a felső határát. Ebben a munkában megvizsgáljuk a kísérlet során fellépő kvantummechanikai bizonytalanság mértékét, mint az idő függvényét.

Az informatika korának legfontosabb eszköze a számítógép, aminek két alapvető jellemzője a működési sebesség és az információ sűrűség. Ez utóbbi növelését az évtizedek óta folyó méretcsökkentés teszi lehetővé. A működési sebesség növeléséhez egyrészt a processzorok fejlesztésére, másrészt a háttér memória elérési sebességének növelésére van szükség. A mágneses memória működési sebességét, azzal lehet növelni, hogy az átmágnesezést nem a szokásos módon, azaz a mágnesezettség irányával ellentétes irányú mágneses térrel valósítjuk meg, hanem a mágnesezettség irányára merőleges mágneses térrel 180°-os precessziót hozunk létre. Az ilyen precessziós átfordítás sebességét az által növelhetjük, hogy az alkalmazott impulzusszerű mágneses tér időtartamát csökkentjük. Az elmúlt esztendőben egy rendkívül érdekes kísérletet hajtottak végre a Stanfordini Lineáris Gyorsítónál a precessziós átmágnesezés sebességének növelése érdekében. A kutató csoportot I. Tudosa szervezte, aki a romániai Iasiból ment doktori ösztöndíjasnak Stanfordinba. Az átmágnesezéshez szükséges gyors, pulzusszerű, mágneses teret 28 GeV energiájú 2.3 pikoszekundum szélességű elektroncsomag segítségével állították elő. Ezt az elektroncsomagot egy 14 nm vastagságú, CrCoPt összetételű, ferromágneses lemezen lötték keresztül. A lemezt a síkjára merőleges irányban telítésig mágnesezték. Az elektronnyaláb maga körül, a Biot-Savart törvénynek megfelelően, az R távolsággal fordítottan arányos mágneses teret hoz létre, aminek vektora a lemez síkjában helyezkedik el, tehát merőleges a lemez mágnesezettségére.

Ez az elektronnyaláb által létrehozott, pulzusszerű, mágneses tér precesszióra kényszeríti a lemezben lévő mágneses momentumokat. Ha a tér amplitúdója elég nagy, akkor a precesszió szöge meghaladja a 90°-os értéket, és ekkor bekövetkezik a teljes 180°-os átfordulás. Az átfordulást oly módon észlelték, hogy mikroszkóp alatt megfigyelték a mágneses Kerr-effektus következtében fellépő elszíneződést. Az elszíneződés az elektronnyaláb becsapódási helyétől mért R sugár függvényében változott, minthogy az elektroncsomag által létrehozott mágneses tér amplitúdója az R sugárral fordítva arányos. Azt várták, hogy nagy R értékeknél nem lesz elszíneződés, mert a tér még nem érte el a 90°-os precesszióhoz szükséges kritikus értéket. Majd pedig az

elszíneződés ugrásszerűen megjelenik. Akkor tűnik el, amikor a precesszió meghaladja a 270° -ot, minthogy ekkor bekövetkezik a teljes 360° -os átfordulás, azaz visszaáll az eredeti mágneses állapot. Amit vártak tehát, az volt, hogy megjelenik egy éles kontúrú körgyűrű. Ezzel szemben nem ez történt, hanem az, hogy a gyűrű megjelent, de a kontúrja nem volt éles. Ez azt jelenti, hogy az átmágnesezés nem volt egyértelmű. A kísérletet úgy tökéletesítették, hogy egymás után összesen hétszer lötték át a lemezt, és minden átlövés után a bekövetkezett elszíneződés változást lefotografálták. Ha az átmágnesezés tökéletesen valósult volna meg, akkor a fent leírt körgyűrűben az elszíneződésnek minden lövés után meg kellett volna változnia, mégpedig élesen. Ehelyett a körgyűrű kontúrja minden átlövés után egyre elmosódottabb lett. A gondosan megismételt ellenőrző kísérletek eredményét abban foglalták össze, hogy egy sztochasztikus jellegű bizonytalanság jellemzi az átmágnesezést.

Ennek a bizonytalanságnak az okát nem tudták pontosan meghatározni. Magyarozatképpen azt tételezték fel, hogy a túl nagy intenzitású, túl rövid időtartamú mágneses tér hatására a minta ferromágneses rendezettsége, amit a kicserélődési kölcsönhatás tart fenn, megbomlik.

Mi ebben a munkában feltételezzük, hogy a Tudosa és társai által feltételezett magyarázat helytálló. Valóban a ferromágneses rendezettség bomlik meg. De ennek az okát is meg akarjuk keresni. Nevezetesen, feltételezzük, hogy a túl rövid ideig létrejövő állapot kvantumfizikai eredetű energiabizonytalansága az, ami az átmágnesezési folyamatban tapasztalható sztochasztikus bizonytalanságot előidézi.

Az átmágnesezés leírására szolgáló kvantummechanikai egy-részecske modell Hamilton-operátorát a következőképpen definiáljuk:

$$\hat{H} = -\vec{\mu}(\vec{H}_p + \vec{H}_a + \vec{H}_d),$$

ahol

$$\vec{\mu} = -|\gamma|(\hbar/2)(\hat{\sigma}_x \vec{e}_x + \hat{\sigma}_y \vec{e}_y + \hat{\sigma}_z \vec{e}_z)$$

az elektron mágneses momentum operátora, a bombázó elektronok által keltett pulzusszerű mágneses teret H_p -vel, az egytengelyű, z irányú anizotrópia teret \vec{H}_a -val, és végül a csillapodást előidéző, effektív mágneses teret \vec{H}_d -vel jelöltük.

Az elektron csomag által létrehozott pulzusszerű tér időfüggése a

$$H_p(t) = e_y H_p^0 \exp(-0.5(t/T_w)^2)$$

alakú képlettel írható le. A lemez síkjára merőleges, anizotrópia tér, szelfkonzisztenciát tételezve fel, a

$$H_a = -e_z H_a^0 \langle \hat{\sigma}_z \rangle$$

alakban írható. A csillapodást előidéző effektív tér a klasszikus Landau-Lifshitz-Gilbert modellt alapul véve [5], arányos a spin vektor várható értékének idő deriváltjával:

$$\vec{H}_d \sim \left\langle \frac{d\vec{\sigma}}{dt} \right\rangle.$$

Az elektron $\psi(t) = \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(t) \\ \psi_\downarrow(t) \end{pmatrix}$ spin függvényének időfüggése a

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} = \frac{\hbar}{2} \left(\omega_p(t) \hat{\sigma}_y - \omega_a^0 \langle \hat{\sigma}_z \rangle \hat{\sigma}_z + \frac{\alpha}{\sqrt{3}} \left(\left\langle \frac{d\hat{\sigma}_x}{dt} \right\rangle \hat{\sigma}_x + \left\langle \frac{d\hat{\sigma}_y}{dt} \right\rangle \hat{\sigma}_y + \left\langle \frac{d\hat{\sigma}_z}{dt} \right\rangle \hat{\sigma}_z \right) \right) \psi(t)$$

alakú Schrödinger-egyenlet megoldásával határozható meg, ahol bevezettük a Larmor frekvenciát az $\vec{\omega} = |\gamma| \vec{H}$ definícióval.

A feladat tehát megoldani a szelfkonzisztens

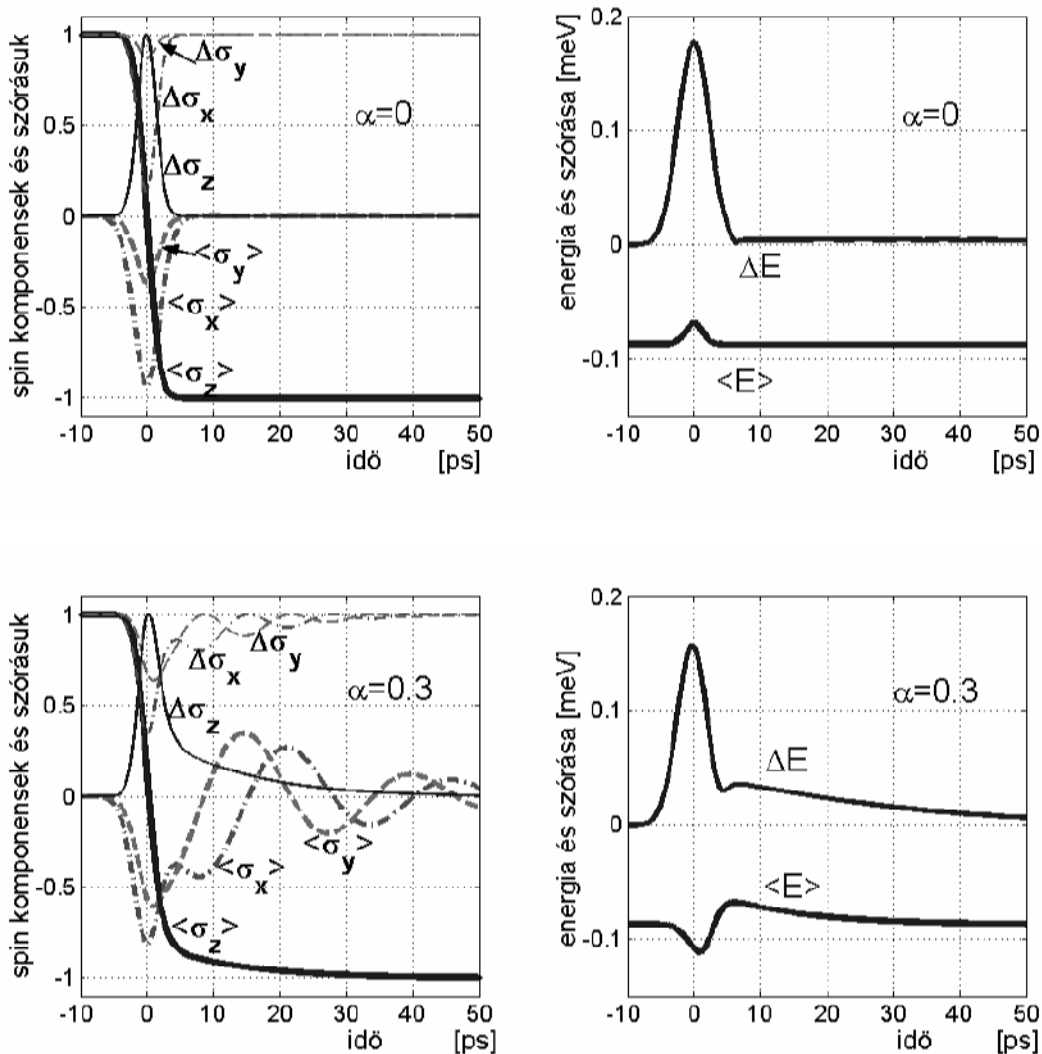
$$\dot{\psi}_{\uparrow}(t) = -\frac{i}{2} \left(\omega_a^0 \langle \dot{\sigma}_z \rangle - \frac{\alpha}{\sqrt{3}} \langle \dot{\sigma}_z \rangle \right) \psi_{\uparrow}(t) + \frac{1}{2} \left(\omega_p(t) + \frac{\alpha}{\sqrt{3}} \left(i \langle \dot{\sigma}_x \rangle + \langle \dot{\sigma}_y \rangle \right) \right) \psi_{\downarrow}(t)$$

$$\dot{\psi}_{\downarrow}(t) = -\frac{1}{2} \left(\omega_p(t) - \frac{\alpha}{\sqrt{3}} \left(i \langle \dot{\sigma}_x \rangle - \langle \dot{\sigma}_y \rangle \right) \right) \psi_{\uparrow}(t) + \frac{i}{2} \left(\omega_a^0 \langle \dot{\sigma}_z \rangle - \frac{\alpha}{\sqrt{3}} \langle \dot{\sigma}_z \rangle \right) \psi_{\downarrow}(t)$$

alakú egyenlet rendszert a $\psi_{\uparrow}(t)$ és $\psi_{\downarrow}(t)$ függvényekre, a

$$\psi_{\uparrow}(0) = 1, \psi_{\downarrow}(0) = 0 \text{ (azaz a } \langle \dot{\sigma}_z \rangle = 1)$$

kezdőfeltételek mellett. A szelfkonzisztens megoldás iterációval nyerhető. A stanfordi kísérletnek megfelelően [1] a paramétereket a következőképpen rögzítettük: $H_a^0 = 1200 \text{ kA/m}$ (azaz $B_a^0 = 1.51 \text{ T}$, avagy $\omega_a^0 = 0.265 \text{ GHz}$) és $T_w = 2.3 \text{ ps}$. Ha a $\omega_p^0 = 0.575 \text{ GHz}$ választással élünk, akkor éppen egy 180° -os precesszió következik be csillapítás nélkül ($\alpha = 0$).



1. ábra

A spin komponensek és az energia várható értékei, valamint a spin komponensek és az energia bizonytalansága, mint az idő függvénye, az $\alpha = 0$ és az $\alpha = 0.3$ esetre

Egy korábbi munkánkban [6] megkerestük a fenti egyenletrendszer megoldását abban a speciális esetben, amikor nincs csillapítás ($\alpha = 0$) és sikerült demonstrálni, hogy az átmágnesezést előidéző pulzus időtartama alatt a rendszer energiabizonytalansága sokkal nagyobb, mint a rendszer energiája. A jelen munkában sikerült figyelembe venni a csillapodást is. A kapott eredményeket az alábbi ábrán mutatjuk be.

A spin komponensek várható értékének $\langle \hat{\sigma}_x \rangle$, $\langle \hat{\sigma}_y \rangle$, $\langle \hat{\sigma}_z \rangle$, valamint a rendszer $\langle E \rangle = \langle \hat{H} \rangle$ energiájának az időfüggésén kívül kiszámítottuk a spin komponenseknek $\Delta \hat{\sigma}_x$, $\Delta \hat{\sigma}_y$, $\Delta \hat{\sigma}_z$ és az energiának a $\Delta E = \sqrt{\langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2}$ bizonytalanságát is, az $\alpha = 0$ és az $\alpha = 0.3$ esetre.

Az eddigiekben leírt modell pontosan azt reprodukálja, amit a Tudosa-csoport várt a kísérlet elvégzése előtt, vagyis azt, hogy a bombázó elektronnyaláb keltette pulzusszerű mágneses tér egy éles kontúrú körgyűrűben idéz elő átmágnesezést. A kontúr sztochasztikus elmosódottsága nem jelentkezik. Ez természetes, mert a modell, annak ellenére, hogy számot ad a rendszerben kialakuló nagymértékű kvantumfizikai bizonytalanságról, nem ad keretet arra, hogy ez a bizonytalanság megnyilvánulhasson. A modellt tovább kell fejleszteni úgy, hogy képes legyen a ferromágneses rend részleges felbomlásáról számot adni.

Jelenleg a modellnek ezt a továbbfejlesztését úgy próbáljuk megvalósítani, hogy a Hamilton operátorba bevezetünk egy újabb, nem hermitikus tagot. Feltételezzük, hogy ez az unitaritást sértő imaginárius potenciál a kvantummechanikai bizonytalansággal arányos. Ez a tag a szelf konzisztens egy-elektron modell Hilbert teréből való „kifolyást” írja le, ami a kicserélődési kölcsönhatás által fenntartott ferromágnesesen rendezett állapot normájának a csökkenését szimulálja. Feltevésünk szerint a kicserélődési kölcsönhatás által fenntartott rendezett állapotból való részleges „kifolyást” tehát, a kvantumfizikai rendszer rövid ideig fennálló állapotának bizonytalansága idézi elő.

Befejezésül hangsúlyozzuk, hogy arra nem találtunk bizonyítékot, hogy a kvantumfizikai bizonytalanság lenne az oka a megfigyelt jelenségnek. Sőt, már arról sem vagyunk meggyőződve, hogy a megfigyelt jelenség magyarázata valóban a ferromágneses rend felbomlásában keresendő. Ezért lehetségesnek véljük azt is, hogy a precessziós átmágnesezés sebessége tovább növelhető.

Köszönetnyilvánítás

Azt a támogatást, amit a magyar Országos Tudományos Kutatási Alapprogram ehhez a munkához nyújtott, megköszönjük. (OTKA T046696).

Irodalom

- [1] Tudosa, I. *et al.*, “The ultimate speed of magnetic switching in granular recording media”, *Nature* **428**, 831-833 (2004)
- [2] Back, C.H. *et al.*, “Magnetism with picosecond field pulses”, *J. Magn. Magn. Mat.*, **151** L8-L12
- [3] Gerrits, Th. *et al.* “Ultrafast precessional magnetization reversal by picosecond magnetic field shaping”, *Nature* **418**, 509-511 (2000)
- [4] Schumacher, H. W. *et al.* “Quasiballistic Magnetization Reversal”, *Phys Rev. Letters* **90** 017204 (2003)
- [5] Aharoni, A. “Introduction to the theory of ferromagnetism”, Oxford University Press, New York, 2000
- [6] Kádár Gy. and Lovas I. „The quantum-mechanical uncertainty of magnetic precessional switching.” *Acta Universitatis Debreceniensis*, XXXVI, 63 (2004)

Nemlineáris fizika

Non-linear Physics

Tél Tamás

ELTE Elméleti Fizikai Tanszék, Budapest

Abstract

Non-linear phenomena turned out in the last decades to have new and surprising features. The mathematical tools proved to be so powerful in the linear world, break down here. Thus, e.g., the simple form of an equation of motion (if non-linear) does not imply at all the simplicity of the motion itself.

We review some basic non-linear aspects also related to everyday phenomena: non-linear oscillations, bifurcations, and chaos in low dimensional systems. They are compared with their spatio-temporal counterparts: non-linear waves (solitons, tsunamies), hydrodynamical instabilities, and turbulence.

Our aim is to call the attention to the practical relevance of nonlinear phenomena and of their understanding.

Összefoglalás

A nemlineáris jelenségekről az utóbbi évtizedekben kiderült, hogy új és meglepő vonásokkal rendelkeznek. A lineáris világban oly hatékonyak bizonyult matematikai módszerek itt csődöt mondanak. Így pl. a mozgásegyenlet egyszerű alakjából (amennyiben nemlineáris) egyáltalán nem következik, hogy a mozgás maga is egyszerű.

Bemutatunk néhány alapvető nemlineáris jelenséget, melyek a mindennapi élettel is kapcsolatosak. Az alacsony szabadsági fokú rendszerekben nemlineáris rezgéseit, bifurkációkat és kaotikus mozgásokat. Ezeket összehasonlítjuk a térben kiterjedt rendszerekben nekik megfelelő jelenségekkel, a nemlineáris hullámokkal (szolitonok, cunamik), a hidrodinamikai instabilitásokkal és a turbulenciával.

Célunk az, hogy felhívjuk a figyelmet a nemlineáris jelenségek és megértésük gyakorlati fontosságára.

A természetben semmi sem lineáris, legalábbis egzaktul nem az. A klasszikus fizika fejlődése során mégis hasznosnak bizonyult az a feltevés, hogy bizonyos mennyiségek egyenes arányban vannak egymással, mint például a rugóerő a megnyúlással. Ez az egyszerűsítés sok jelenség alapvető fogalmi (és matematikai) megértését tette lehetővé, mely a harmonikus oszcillátortól kezdve, a hullámjelenségeken keresztül elvezetett a molekularezgések leírásáig. Ma már tudjuk azt is, hogy a Kepler-probléma egzakt megoldása azért volt lehetséges, mert a probléma megfelelő transzformációval leképezhető a harmonikus oszcillátorra [1]. A klasszikus elektrodinamika és a kvantummechanika is lineáris elméletnek bizonyult, s közös kiterjesztésük vezetett el a sugárzások megértésére. Még nemlineáris, erősen kölcsönható rendszerekben is sokszor hasznos az a kép, miszerint az energia-felvétel lineárisan viselkedő elemi gerjesztések megjelenésével jár. Így jutottunk el a szilárdtestek rácsrezgéseinek, a szupravezetés és szuperfolyékonyság makroszkopikus tulajdonságainak megértéséhez. A sikerek láttán nem csoda, hogy évszázadokon át tartotta magát az a nézet, hogy a nemlineáris jelenségek a lineárisak kissé módosított változatainak bizonyulnak majd, s csak némileg lesznek bonyolultabbak.

Az utóbbi néhány évtizedben kiderült azonban, hogy ez egyáltalán nem így van: a nemlinearitás számos új és szokatlan jelenséget hordoz. Ráadásul a lineáris világban jól működő matematikai módszerek érvényüket veszítik. Egy nemlineáris mozgásegyenlet egyszerű alakjából például egyáltalán nem következik, hogy maga a mozgás is egyszerű lesz. A nemlineáris jelenségek nem részei a középiskolai fizika tananyagának és az egyetemi oktatás is csak alig érinti azokat. Mivel azonban számos – köztük több hétköznapi – jelenséggel is kapcsolatosak, érdemes a legfontosabbakat áttekintenünk, abban a reményben, hogy egyszerű tárgyalásban az oktatásban is megjelenhetnek.

Először a csak időbeli változást mutató, kis szabadsági fokú rendszerek legfontosabb nemlineáris jelenségét tekintjük át, s azután térünk át a térben is kiterjedt, nagy szabadsági fokú rendszerek jelenségeire, a meg-

felelő eseteket párhuzamba állítva. Példáinkat az első csoportban a pontmechanika, a másodikban a hidrodinamika területéről vesszük.

1. Kis szabadsági fokú rendszerek

A kis szabadsági fokú rendszerek helyzete néhány változóval megadható, az ilyen rendszerek állapotváltozását tehát néhány időfüggvény írja le. Ezek a rendszerek alapvetően csak időtől függő jelenségeket mutatnak, még akkor is, ha mozgásuk térben történik. Dinamikájukat *közönséges* differenciálegyenletek írják le.

1.1. Nemlineáris, nagy amplitúdójú rezgések

Hajlamosak vagyunk természetesnek tekinteni, hogy a rezgések periódusideje független az amplitúdójuktól. Ez azonban csakis a lineáris rezgések esetén van így. Azt szokás mondani, hogy „*kicsiben minden lineáris*”, vagyis elegendően kis amplitúdó esetén minden rezgés lineáris. Annak meghatározására azonban, hogy pontosan mit is jelent az, hogy „elegendő”, csak akkor válunk képessé, ha a legfontosabb nemlineáris korrekciókat – melyek az amplitúdó nem elhanyagolható mivoltából adódnak – meg tudjuk állapítani.

Az l hosszúságú, légüres térben lengő fonálinga esetében ismert [1,2], hogy a rezgésidőnek a kezdeti φ_0 (radiánban mért) szögkitérésben első korrekciós tagját figyelembe véve a periódusidő

$$T = 2\pi \sqrt{\frac{l}{g}} \left(1 + \left(\frac{1}{16} \right) \varphi_0^2 \right).$$

Innen leolvasható, hogy az inga lengése akkor tekinthető jó közelítéssel lineáris rezgésnek, ha a φ_0 amplitúdóra fennáll, hogy $(1/16) \varphi_0^2 \ll 1$. Konkrétan, a hagyományos, $T = 2\pi \sqrt{l/g}$ amplitúdó-független rezgésidő-kifejezés 1 ezrelékre pontos, ha $(1/16)\varphi_0^2 < 1/1000$, azaz ha $\varphi_0 < 0.13$ radián, vagyis 7,5 fok. A fiatal Galilei a pisai dóm csillárjának lengését figyelve, az időt saját pulzusával mérve, fedezte fel a lengési időtartamok azonosságát különböző mértékű kitérések esetén [3]. Ez vezetett el később az ingaóra feltalálásához.

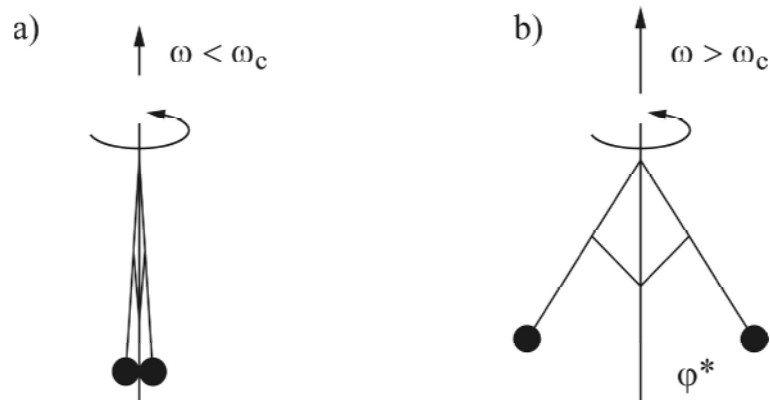
A kezdeti kitérést 7,5 fok fölé növelve, a rezgésidő egyre határozottabban függ az amplitúdótól. A fenti, első korrekciót tartalmazó képlet maga is csak $\varphi_0 = 42$ fokig érvényes 1 ezreléknyi pontossággal, ezután az amplitúdó negyedik, hatodik stb. hatványai is egyre nagyobb súllyal szerepelnek, $\varphi_0 = 360$ fok felé közeledve pedig a lengésidő végtelenhez tart (a fejjel lefelé induló hajóhinta esete). A lineáris, $T = 2\pi \sqrt{l/g}$ rezgésidő-kifejezéstől tehát egyre távolabb kerülünk az amplitúdó növelésével.

Általánosan igaz, hogy minden, nem egészen kis amplitúdójú rezgés a nemlineáris tartományban zajlik (ahol a visszatérítő erő már a lineárisnál bonyolultabban függ a kitéréstől). Úgy is mondhatjuk, hogy „*nagyban minden nemlineáris*”. A rezgések periódusideje tehát általában függ az amplitúdótól, s azon keresztül az összenergiától. Az amplitúdó-független rezgésidő, kizárólag egy speciális eset, a lineáris erőtvény sajátosága.

1.2. Bifurkációk

A nemlineáris rendszerek paramétereik változása következtében elveszíthetik stabilitásukat. Az eredetileg stabil állapot instabillá válik, de megjelenik helyette rendszerint két új stabil állapot [4].

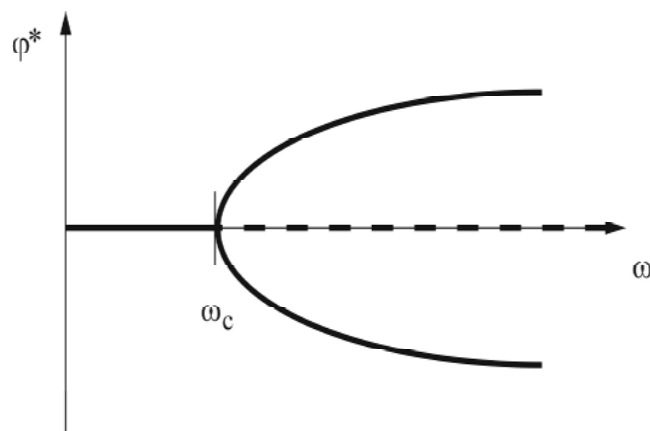
Erre egyszerű példa az ún. centrifugális szabályozó, egy matematikai inga, melynek felfüggesztési pontja a függőleges tengely körül ω szögsebességgel forog. Kis φ szögkitérések esetén a szokásos $-mgl\varphi$ visszatérítő forgatónyomatékon kívül hat a centrifugális erőből származó kifelé mutató $ml^2\omega^2\varphi$ nyomaték is. E két hatás versengése határozza meg, hogy mi történik. Az eredő nyomaték mindaddig negatív, amíg a forgás eléggé lassú, pontosabban $\omega < \sqrt{g/l}$. Az inga egyetlen lehetséges nyugalmi helyzete a zérus kitérésű állapot: $\varphi^* = 0$. Az $\omega_c = \sqrt{g/l}$ kritikus értéknél gyorsabb forgatás esetén bármilyen kis kezdeti szögkitérésből kifelé mozdul az inga, a függőleges állapotba nem tér vissza. Az eredeti nyugalmi állapot instabillá vált. Az új egyensúlyi állapot a véges szögkitérés esetén érvényes $-mgl \sin \varphi$ visszatérítő és $ml^2\omega^2 \sin \varphi \cos \varphi$ kifelé forgató nyomaték egyensúlyából adódóan $\varphi^* = \arccos(g/l\omega^2)$, egy véges φ^* érték vagy ennek ellentettje. Ezek az állapotok stabilak, tehát a rendszer kis fluktuációktól nem távolodik el tőlük.



1. ábra

*A centrifugális szabályozó bifurkációja a forgatási szögsebesség függvényében.
A gyakorlatban megépített centrifugális szabályozók két, közös síkban mozgó ingát tartalmaznak.
a) a kritikus forgatási szögsebesség alatt csak a függőlegesen lógó állapot valósulhat meg.
b) felette viszont a regulátor kinyílik, és egy új stabil állapot jelenik meg*

Számos más esetben is előfordul, hogy valamely paraméter változtatásakor egy stabil állapot hirtelen instabillá válik és mellette új stabil állapotok születnek. Az állapotok x^* helyzetét a μ -vel jelölt paraméter függvényében ábrázolva gyakran villa-szerű rajzolatot kapunk (2. ábra), ezért hívjuk ezt a jelenséget bifurkációnak, a rajzolatot bifurkációs diagramnak. A nemlinearitás elválaszthatatlan társa tehát az instabilitás. (Az egész jelenség hasonló a termodinamikai fázisátalakuláshoz, még hozzá a másodrendű fázisátmenethez, de ne feledjük, hogy ott nem egyetlen anyagi pont, hanem Avogadro-számnyi részecske szerepel.)



2. ábra

Bifurkációs diagram: a centrifugális szabályozó φ^ egyensúlyi szögkitérése az ω szögsebesség függvényében. A szaggatott vonal instabil állapotot jelöl.
A bifurkációs diagram általában a stacionárius állapotok x^* helyzetét és stabilitását mutatja valamely μ paraméter függvényében*

Általánosan, minden nemlineáris rendszerben várható, hogy a paraméterek valamely változtatására bifurkációk következnek be. A bifurkációk tehát igen gyakori jelenségek. Egy műszaki gyakorlatból ismert másik példa a hosszirányban terhelt rudak egyik vagy másik irányba történő kihajlása, mely egy kritikus terhelés elérésekor hirtelen történik meg.

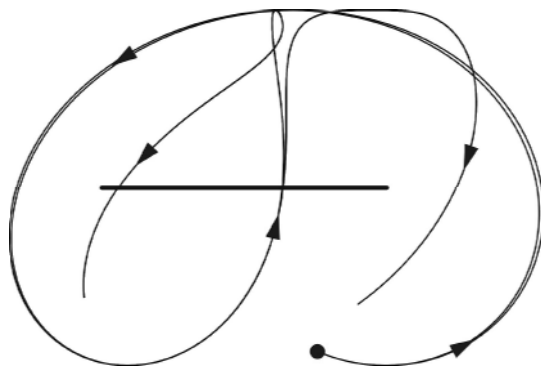
Nemcsak nyugalmi állapot, hanem egy adott mozgástípus is elveszítheti stabilitását. A gerjesztett nemlineáris oszcillátornak például a rezonancia-frekvencia közelében két különböző amplitúdójú rezgése lehetséges (melyek különböző kezdőfeltételekből érhetők el), és létezik egy instabil rezgés is közöttük, mely a gya-

korlatban sohasem valósul meg [2]. A két stabil rezgés közötti átmenet a frekvencia változtatásakor hirtelen következik be. Ez jól megfigyelhető a háztartási centrifugák bekapcsolásakor, melyek először mély erős, hangot adnak, majd átválnak halk, de magasabb bűgásra. Kikapcsoláskor pedig, amikor forgási szögsebességük egy kritikus érték alá esik, egyszer csak mély, zörgő hangot hallatnak, s így állnak meg.

1.3. Káosz

Az energiabefektetés növelésével a rendszerek olyan bifurkációkon mennek keresztül, melyek során mozgásuk egyre bonyolultabb lesz. Ennek a sorozatnak egy lehetséges végállapota az ún. káosz [4,5]. Ez sokáig tartó mozgás, mely azonban mégsem ismétli önmagát.

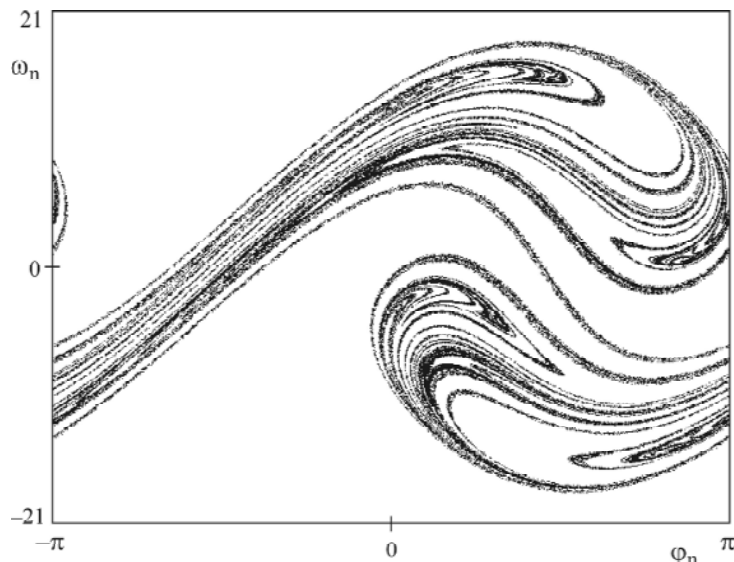
Amennyiben egy inga felfüggesztési pontját a vízszintes síkban periodikusan mozgatjuk, gerjesztjük, a mozgása rendszerint kaotikussá válik: a $\varphi(t)$ szögkitérés-idő függvény szabálytalanul változik, benne semmilyen periodicitás sem ismerhető fel. A mozgás ugyanakkor törekeny abban az értelemben, hogy formája nagyjában függ a pontos kezdeti állapottól, vagyis kis kezdeti különbségek gyorsan felerősödnek (3. ábra). A kaotikus mozgás alapvető sajátossága – szemben a megszokott, szabályos esetekkel –, hogy időbeli lefolyása érzékenyen függ a kezdőfeltételektől.



3. ábra

Kaotikus mozgás: két, közeli állapotból indított gerjesztett inga végpontjának pályája a függőleges síkban [4]. A kezdeti helyzetek olyan közel esnek, hogy a pályáknak megfelelő vonalak eleinte nem különböztethetők meg, utána azonban gyorsan szétválnak: a mozgás érzékeny a kezdőfeltételekre. Az inga felfüggesztési pontja az ábrán látható vízszintes szakaszon mozog

A kaotikus mozgás tehát nem jelezhető hosszú távon előre, hiszen a kezdeti bizonytalanságok jelentős eltérésekre vezetnek az eredetileg közlelről induló pályákban. A káosz ezért *valószínűségi módszerekkel* írható csak le helyesen. A véletlenszerűség azonban nem terjed ki az összes elképzelhető állapotra (mint a hagyományos zaj esetén). Ha például a súrlódásos gerjesztett inga mozgásáról úgy veszünk mintát, hogy a szögkitérés és szögsebesség koordinátákat a gerjesztés periódusának egész számú többszöröseiben ábrázoljuk, akkor egy érdekes mintázatot kapunk (4. ábra). Az ilyen alakzatokat fraktáloknak nevezik, nulla a területük, s tört, nem egész dimenzióval jellemezhetőek. A mozgás során a pontok ezen a fraktálon ugrálnak látszólag szabálytalanul. Az előrejelezhetetlen, véletlenszerű viselkedés csak erre a tartományra terjed ki. Az állapotot jellemző pont tehát bolyong, de e bolyongás bizonyos állapotok között történhet csak (az ábrán fehéren maradt pontokba sohasem jut el). A káoszbeli valószínűségi viselkedés tehát strukturált, s ráadásul fraktál jellegű. Vagyis a káosz olyan hosszantartó mozgás, mely szabálytalan, nem jelezhető előre, de megfelelő ábrázolásban alacsony dimenziós fraktál-szerkezetet mutat.



4. ábra

A káosz geometriája: súrlódásos gerjesztett inga kaotikus mozgásának képe, a szögkitérés-szögsebesség állapotsíkon (fázistéren) az inga állapotát periódusidőnként ábrázolva [4]. Egy megszokott, szabályos periodikus mozgás ugyanebben az ábrázolásban egyetlen pontként jelenne meg!

Lineáris rendszer nem mutathat kaotikus viselkedést. A nemlinearitás viszont a káosz révén a klasszikus fizikán belül is elvezet a véletlenszerű viselkedéshez és olyan más szokatlan vonásokhoz, melyek egy lineáris világban elképzelhetetlenek lennének.

A káosz gyakori előfordulását mutatja, hogy szinte bármely középiskolából vagy bevezető egyetemi előadásról ismert feladat kaotikus viselkedésre vezet, ha bizonyos megkötéseit feloldjuk (az inga felfüggesztési pontja példánkban nem rögzített, hanem periodikusan rezeghet).

A káosz számos hétköznapi jelenségben is megfigyelhető. A motorok, autók és repülőgépek első kerekei könnyen berezegnek, vagyis kaotikus kilengéseket mutatnak. A téstagyúrás folyamatában az egyes anyagszemcsék gyors elkeveredése utal kaotikus mozgásukra. A turmixgép akkor hatékony, ha kaotikusan kever. Általában a szennyezések környezeti elterjedése is kaotikus folyamat.

A Naprendszer mozgása több vonatkozásban is kaotikus. A kisbolygók, aszteroidák közül nem tudjuk pontosan, melyik közelíti meg a Földet annyira, hogy belépve légkörébe hullócsillagként elégjen, vagy esetleg becsapódjon a felszínre. A 2004 MN4 jelű, 400m átmérőjű aszteroidára vonatkozó számítások 2004. végén még arra utaltak, hogy a kisbolygó 2029-ben ütközhet a Földdel. A pontosított adatok alapján elvégzett szimulációk ennek ellenkezőjét mutatják. A körülbelül évente történő későbbi megközelítések közül azonban a 2044, 2053-ban esedékesekről nem zárható ki, hogy ütközés történik. A szimuláció addigra már csak egy esemény-sokaságot jelez, melyek között szerepel az ütközés lehetősége, ennek esélye azonban csekély. Minél távolabbra igyekszünk tehát előrejelzést tenni, annál kevésbé pontosak kijelentéseink, amely az aszteroida kaotikus mozgására utal.

2. Térben kiterjedt rendszerek

A térbeli kiterjedéssel is rendelkező rendszerek, a folytonos közegek úgy tekinthetők, mint végtelen sok elmozdulásra képes, egymással kapcsolatban levő pont összessége. Az ilyen, végtelen szabadsági fokú rendszerek nemlineáris jelenségei a kis szabadsági fokúakénál jóval gazdagabbak, hiszen a térbeli viselkedés új vonásokat hoz be. Az ilyen rendszereket *parciális* differenciálegyenletek írják le, melyek végtelen sok közös differenciálegyenlet rendszerének feleltethetők meg. Ennek ellenére néhány vonásuk szoros párhuzamba állítható a csak időfüggő rendszerek nemlineáris jelenségeivel.

2.1. Nemlineáris hullámok

A nagy amplitúdójú hullámok legegyszerűbb példái a szolitonok [6]. Ezek a folyadékfelszín púp alakú kidudorodásai. A hagyományos szóhasználat szerint tehát nem a periodikus síkhullámok, hanem a csomagok

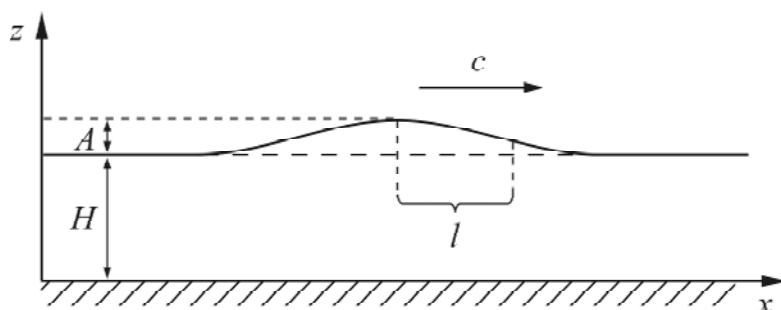
megfelelő. A szolitonok fontos tulajdonsága, hogy c sebességük függ a kidudorodás A amplitúdójától és a H vízmélységtől, méghozzá a

$$c = \sqrt{gH} \left(1 + (1/2)A/H\right)$$

szabály szerint. Ez arra a legtöbbször előforduló esetre vonatkozik, amikor az amplitúdó ugyan jóval kisebb, mint a vízmélység: $A \ll H$, de azért nem elhanyagolható. A kidudorodás oldal irányú kiterjedése, felszélessége (fél hullámhossza) ugyanekkor

$$l = H \sqrt{3H/4A},$$

ami $H/A \gg 1$ miatt jóval nagyobb, mint a vízmélység: $l \gg H$. A folyadék ezért a szoliton szempontjából mindig sekély. Érdeemes emlékeztetni arra, hogy az elhanyagolhatóan kis amplitúdójú, lineáris hullámok sebessége sekély folyadékokban [1,2] $c_0 = \sqrt{gH}$ (ami a fenti képletből is következik az A tart 0 határesetben). A nemlineáris hullám tehát mindig gyorsabban terjed, mint a megfelelő lineáris hullám.



5. ábra

*Szoliton-hullám jellegzetes alakja H átlagos mélységű folyadékban.
A szoliton jellemző adatai: A amplitúdó, c sebesség, l felszélesség*

A szolitonok sebessége függ tehát az amplitúdójuktól, és ráadásul még a hullámhosszuk is. Így végső soron a c/l frekvencia is függ az amplitúdótól! Ez a szokásos lineáris hullámok világában elképzelhetetlen. Gondoljunk arra, milyen lenne a hang, ha frekvenciája amplitúdó-függő lenne (magassága függne pl. a hang erősségétől!). A jól ismert hang tehát lineáris hullám. A levegőben robbanásakor keletkező lökeshullámok viszont már nagy amplitúdójúak, nemlineárisak, ők felelnek meg a hangterjedés nemlineáris hullámainak. A nemlineáris hullámok frekvenciájának szokatlan amplitúdó-függése *analóg* a nemlineáris rezgések periódusidejének amplitúdó-függésével (amit az I.1 pontban tárgyaltunk).

A szolitonok, szemben az ugyanolyan mélységű folyadékban terjedő lineáris hullámokból képzett hullámcsoportokkal, sohasem folynak szét. Ha ütköznek, az átfedési időszak után visszanyerik eredeti alakjukat. Erre a részecskeszerű tulajdonságra utal a nevükben szereplő „on” végződés. Fontos eltérő tulajdonságuk az is, hogy haladásuk irányába megmozgatják a víztömegeket (a lineáris hullámok csak rezgőmozgást hoznak létre, eredő elmozdulás nélkül). Ráadásul a vízben terjedő nagy kiterjedésű szolitonok (mint minden hosszú hullám) rendkívül lassan csillapodnak, gyakorlatilag ideálisként viselkedik ilyenkor a folyadék.

Ezek a tulajdonságok együttesen vezetnek arra, hogy a földrengés által keltett szoliton tulajdonságú tengerhullámok, tsunamik, nagyon veszélyesek lehetnek. Szomorú aktualitást adott a témakörnek a 2004. december 26-ai tsunami az Indiai-óceánban, mely rendkívüli károkat okozott. A nyílt tengeren a tsunami amplitúdója mindössze körülbelül egy méter volt: $A = 1m$. A $H = 5km$ átlagos vízmélységgel számolva, képleteinkből $c = 800km/h$ és $l = 300km$ adódik. A nyílt tengeren a hullám tehát alig vehető észre, de hatalmas víztömeget érint és igen gyorsan halad (Szumátrától Indiáig 2 óra alatt ért el). Ez a víztömeg torlódik fel a sekély vízben és okoz hullámtörés közben jelentős pusztítást.

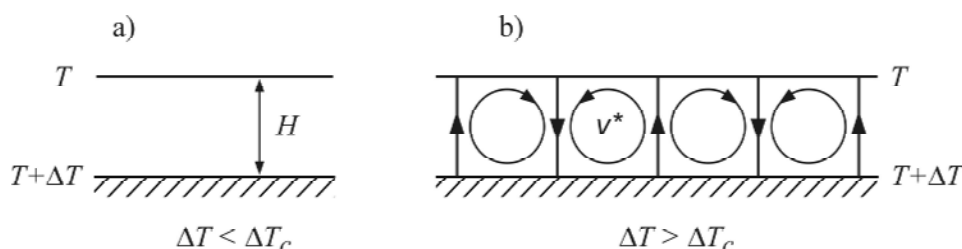
A szolitonokon kívül sok más, alakjukban és jellegükben különböző nemlineáris hullám is létezik, mint például az óceáni dagály megérkezésével járó torlól hullámok, vagy a különböző sűrűségű közegek mozgása során kialakuló frontok (a légköri hidegfront vagy a lavina mozgása) [6].

2.2. Instabilitások

Energia-befektetés hatására az áramlások mintázatai megváltozhatnak. Az eredeti áramlás instabillá válik, és helyette új áramlási minta (vagy minták) alakul(nak) ki. Ezt a jelenséget nevezzük hidrodinamikai instabilitásnak.

Különösen meglepő az az eset, amikor a kiindulási állapotban nincs is áramlás. Ekkor ugyanis egy kritikus mértékű energia-befektetés mellett hirtelen megmozdul a folyadék, és a keletkező áramlás ráadásul valamilyen szabályos mintázatba rendeződik.

A legegyszerűbb példa a konvekció (fel-, és leáramlás) beindulása alulról fűtött folyadékban, lefelé mutató gravitációs térben. Tartsuk a folyadék alját a külső felszínnél ΔT -vel magasabb hőmérsékleten. Amíg ΔT kicsi, a folyadék nyugalomban marad, a befektetett hő kizárólag hővezetés útján terjed a nyugvó közegben. Az alul felmelegedett folyadék ugyan könnyebb a felette levőnél és rá felhajtóerő hat, az azonban még nem eléggé nagy ahhoz, hogy legyőzze a viszkozitásból adódó fékező erőt. E két erőhatás versengése dönti el, hogy beindul-e áramlás. A ΔT hőmérséklet-különbség emelésével a felhajtóerő egyre erősebb, ezért létezik egy ΔT_c kritikus hőmérséklet-különbség, melynél megmozdul az alsó folyadékréteg. Feláramlás kezdődik, de az anyagmegmaradás miatt oldalirányú és lefelé mutató mozgás is kialakul. Ez egységes és megdöbentően szabályos módon szerveződik áramlási képpé [7,8,9]. Igen nagy kiterjedésű közegben a fel és leáramló vízoszlopok a H vízmélységgel összemérhető távolságokon szabályosan követik egymást. A köztük levő tartományokban a folyadék körkörös mozgást végez vízszintes tengelyű párhuzamos hengerek mentén. A szomszédos hengerek egymással szemben forognak. A porral megfestett áramlást felülről szemlélve párhuzamos csíkozattal megjelenésének vagyunk tanúi [7,8,9].

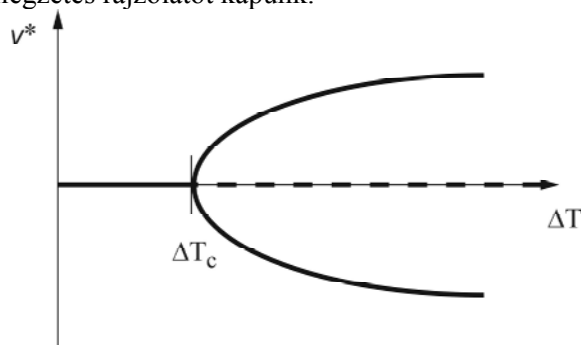


6. ábra

A konvekció, a Rayleigh–Bénard-instabilitás. Alulról melegített széles folyadékréteg.

- A hőmérséklet-különbség kisebb a kritikusnál, a folyadék nem mozog.*
- A kritikusnál magasabb hőmérséklet-különbség esetén konvekció indul meg, az áramlás időtől független és párhuzamos hengerek mentén zajlik*

A kritikus érték körül lezajló jelenséget instabilitásnak nevezzük, a konkrét esetet első leíróiról Rayleigh–Bénard-instabilitásnak. Ha az áramlás jellegzetes v^* sebességét (a kritikus pont fölött egy adott henger lehetséges körbeforgási sebességét) és az állapot stabilitását ábrázoljuk a ΔT hőmérséklet-különbség függvényében, akkor ismét jellegzetes rajzolatot kapunk.



7. ábra

A Rayleigh–Bénard-instabilitás jellemzése a ΔT hőmérséklet-különbség függvényében.

A szaggatott vonal a kritikus pont fölött instabillá vált áramlásmentes állapotot jelzi.

Ugyannak a sebességértéknek az előfordulása + és – előjellel arra utal, hogy egy adott henger mentén az áramlás jobbra és balra is foroghat

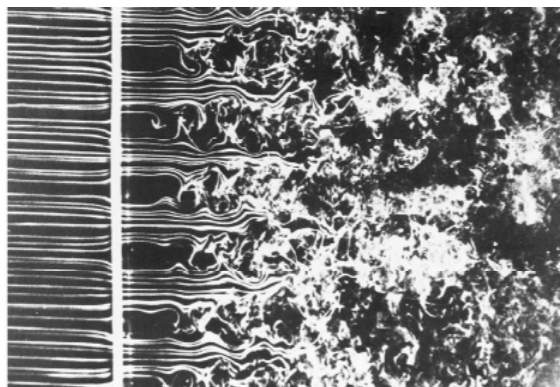
Azt is mondhatnánk, hogy az áramlási bifurkáción ment keresztül (I.2 pont). A szóhasználatbeli különbséget azért érdemes mégis fenntartani, mert itt nem egyetlen lehetséges adat megváltozásáról van szó, hanem az egész sebességeloszlás megváltozásáról (más szóval: a bifurkáció egy függvényterben történik).

Véges kiterjedésű edényben a mintázat függ a perem alakjától. Kialakulhatnak felülnézetben gyűrű vagy hatszög alakú áramlási képek is. Az utóbbi sokszor megfigyelhető serpenyőben melegített vékony olajrétegben. Hasonló jellegű instabilitások alakulnak ki a különböző szögsebességgel forgatott koaxiális hengerek között elhelyezkedő folyadék mozgásában, amikor is elegendően nagy szögsebesség-különbség esetén a forgástengelyre merőleges síkban hirtelen gyűrűszerű áramlás indul be [8].

Akármelyik esetet tekintjük is, azt mondhatjuk, hogy a '*semmiből*' hirtelen lesz '*valami*'. Ezt nevezzük a mintázatképződésnek [7,8]. Ez ráadásul spontán történik, hiszen semmilyen külső információ nem szükséges a minta kialakulásához, adott energiaáram mellett mindig ugyanaz a rajzolat jön létre (adott edényben). Ez a felismerés jelentősen hatott a fizika társtudományaira is, hiszen rámutat arra, hogy nem szükséges pl. a biológiai mintázat pontos kódját a DNS-ben tárolni, elég a megfelelő mintázatra vezető kémiai reakcióét, mely spontán módon adja majd a mintázatot, ha a paraméterek a megfelelő tartományba esnek.

2.3. Turbulencia

Az egyre növekvő energia-befektetés következtében egyre több instabilitáson megy át a folyadék, térben egyre összetettebb és időben is változó áramlások alakulnak ki. Ezek egyre bonyolultabbak, és előbb-utóbb mindegyikük *instabillá* válik. Az egész folyamat *végállapota* a turbulens áramlás [6,8], mely térben is és időben is teljesen rendezetlen (8. ábra)



8. ábra

Turbulens áramlás. A balról érkező gyors homogén áramlás a képen függőleges vonalként megjelenő rácson áthaladva instabillá válik, fokozatosan elveszti szabályos jellegét [8]. A kép jobb oldalán már a kifejlett turbulencia látható, mely szabálytalanul egymásba ágyazott, felbomló és újraszülető, különböző méretű örvények összességének tekinthető.

A kifejlett turbulenciában minden egyes folyadékrészecske szabálytalan mozgást végez, azt is mondhatnánk, hogy 'kaotikus'. Most azonban nem néhány változó, hanem - a térbeli kiterjedés miatt - végtelen sok változó mutatja ezt a bonyolult viselkedést. A turbulencia térben és időben is 'kaotikus', ezért végtelenszer bonyolultabb, mint maga a káosz. Ennek megfelelően nem rendelhető hozzá egy alacsony dimenziós fraktál, amit a káosz I.3 pontban adott definíciója megkövetel. A turbulenciában a folytonos közegből adódóan végtelen sok szabadsági fok mindegyike aktívan részt vesz. Ez nem zárja ki természetesen azt, hogy legyenek a káoszhoz hasonló vonásai is, mint pl. az előrejelezhetetlenség.

Az előrejelezhetetlenségből adódó valószínűségi viselkedés most azonban az egész geometriai térre kiterjed. A turbulens áramlásban a folyadékmozgás ezért egyfajta bolyongás, mely *nem* struktúrált (nem fraktál szerkezetű), a részecske mindenhova eljuthat. Ez a hagyományos bolyongással, a diffúzióval analóg folyamat, de annál jóval gyorsabb. Míg a hagyományos diffúzió a környező molekulákkal adódó szabálytalan ütközések következménye, a turbulens diffúziót az okozza, hogy a különböző méretű, de mindenképpen makroszkopikus örvények szabják meg a részecskék mozgását. Az adott anyagra nyugvó közegben jellemző molekuláris diffúzió állandóját a közeg turbulens áramlása 5-7 nagyságrenddel is megnövelheti! Egyetlen részecske bolyongása során elmozdulásának átlagos nagysága az eltelt idő négyzetgyökével nő [7]. Ennek megfelelően, két, kezdetben igen közel levő részecske a diffúzió hatására *t* idő alatt átlagosan

$$(2Dt) \Delta x = \sqrt{(2Dt)}$$

távolságra kerül, ahol D a diffúziós állandó. Következésképpen egy pontszerű kezdeti koncentráció-eloszlás t idő után átlagosan Δx átmérőjű tartományra terjed ki. Adott méret elérése tehát 5-7 nagyságrenddel gyorsabb turbulens áramlásban, mint nyugvó közegben.

Konkrét példaként tekintsük a levegőt, mint közeget. A makromolekuláktól eltekintve szinte minden anyag molekuláris diffúziós állandója $2 \cdot 10^{-5} m^2/s$ körüli, turbulens diffúziós állandója viszont eléri az $1 m^2/s$ értéket. Ahhoz, hogy egy kezdetben pontszerű koncentráció 10m-re szétterjedjen, álló levegőben 30 napra lenne szükség! Turbulensen kavargó levegőben ehhez viszont csak 50 másodperc szükséges. Ha tehát szinte rögtön megérezzük a szobában, hogy mi készül a konyhában, az nem a molekuláris diffúzió, hanem a lakás levegőjében mindig jelenlévő turbulens áramlások következménye, és a turbulenciában rejlő véletlenszerű viselkedés hétköznapi bizonyítéka.

Összefoglalás

Elmondhatjuk, hogy egy lineáris világban az itt felsorolt jelenségek (1. táblázat) egyike sem fordulhatna elő. Az utóbbi évtizedek tapasztalata azt sugallja, hogy amikor egy problémával ismerkedünk, a legelső eldöntendő kérdésnek annak kell lennie, hogy lineáris-e vagy sem a probléma, ill., az azt leíró differenciálegyenlet. Reális közelítéseket alkalmazva, az első eset bekövetkezésére igen csekély az esély.

1. táblázat.

A legfontosabb nemlineáris jelenségek és megfeleltetésük a kizárólag időtől függő, és a térbeli kiterjedéssel is rendelkező rendszerekben.

Időbeli jelenségek, kis szabadsági fokú rendszerek	Térben kiterjedt rendszerek, nagy szabadsági fokú rendszerek
nemlineáris rezgések	nemlineáris hullámok
bifurkáció	instabilitás
bifurkáció-sorozat	instabilitás-sorozat
káosz	turbulencia

A kiterjedt rendszerekben, közegekben a nemlineáris jelenségek köre jóval bővebb a térbeliséget kifejező, végtelen sok szabadsági fok miatt. A megfeleltetés ennek megfelelően csak kvalitatív és jelzés értékű. Érdemes ezért a táblázat bal oldalán felsorolt fogalmakat szigorú értelemben csak a kis szabadsági fokú rendszerekre korlátozni, és a térbeli esettől való megkülönböztetést a szóhasználatával is kifejezni.

Végül megjegyezzük, hogy az említett nemlineáris jelenségek (1. táblázat) egyáltalán nem kötődnek kizárólag a fizikához. Megtalálhatók mind kémiai, mind biológiai rendszerekben, sőt közgazdasági modellekben is.

Tudjuk, hogy a lineáris törvények csak igen kivételes esetekben érvényesek. Amíg tehát a nemlineáris jelenségek nem kerülnek be a középiskolai, ill. egyetemi tananyagba kellő súllyal, addig a kivételt tanítjuk, nem a szabályt.

Köszönetnyilvánítás

A szerző köszönetét fejezi ki Gruiz Mártonnak az évek óta tartó eredményes együttműködésért, a szöveggel kapcsolatos hasznos tanácsaiért, és az ábrák elkészítéséért. A dolgozat az OTKA támogatásával (T047233, TS044839) készült.

Irodalom

- [1] Nagy Károly: Elméleti Mechanika (Nemzeti Tankönyvkiadó, Bp., 2002)
- [2] Budó Ágoston: Mechanika (Tankönyvkiadó, Bp., 1965)
- [3] George Gamow, A fizika története (Gondolta, Bp. 1965)
- [4] Tél Tamás, Gruiz Márton: Kaotikus Dinamika (Nemzeti Tankönyvkiadó, Bp., 2002)
- [5] James Gleick: Káosz, egy új tudomány születése (Göncöl Kiadó, Bp., 1996)
- [6] Tél Tamás: Környezeti áramlások, jegyzet (ELTE Elméleti Fizikai Tanszék, Bp., 2003)
- [7] Hermann Haken: Szinergetika (Műszaki Könyvkiadó, Bp., 1984)
- [8] Milton van Dyke: An Album of Fluid Motion (The Parabolic Press, Stanford, 1982)
- [9] Sasvári László: A Rayleigh—Bénard-instabilitás, Fizikai Szemle 35, 58 (1985)

Szén nanocsövek szintézise folyékony szénhidrogénekből katalizátor jelenlétében

Synthesis of Carbon Nanotubes from Liquid Phase Hydrocarbons in Presence of Catalysts

Darabont Al.¹, Daróczi N.², Nemes-Incze P.¹, Kertész K.¹, Sárközi Zs.¹,
Koós A. A.³, Horváth Zs. E.³, Osváth Z.³, Vértesy Z.³, Biró L.P.³

¹Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Fizika Kar, Kogălniceanu u. 1 sz., Kolozsvár

²Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kémia Kar, Arany János u. 11 sz., Kolozsvár

³MTA, MFA, Pf. 49, H-1525, Budapest

Abstract

The present paper applies to the synthesis of carbon nanotubes (CNTs) by the spray pyrolysis method. Benzene and xylene were used as carbon sources and ferrocene as catalyst. We have analysed the quantity and quality of CNTs in function of argon gas flow-rate and solved catalyst quantity (in xylene). The quality of CNTs was examined by TEM. Lastly, a possible application of CNTs in a miniaturised gas sensor is presented.

Összefoglaló

Ezen dolgozatban tárgyalt kísérlet-sorozatok elvégzésekor a szén nanocsövek előállítására a porlasztásos pirolízis módszerét használtuk. Szénforrásként benzolt és xilolt, katalizátorként ferrocént alkalmaztunk. Vizsgáltuk az argon gázhozam és a katalizátor mennyiségének a hatását a kapott szén nanocsövek mennyiségére és minőségére. Ez utóbbit TEM-vizsgálatok alapján értékeltük. A dolgozat leírja a szén nanocsövek miniatűr gázérzékelőkben való alkalmazási lehetőségét.

Kulcsszavak: szén nanocsövek, Ar-hozam, ferrocén-koncentráció, porlasztásos pirolízis, TEM

Bevezetés

A szén nanocsövek szintézise és vizsgálata új, fiatal kutatási területe a szilárdtestfizikának. Tanulmányozásuk 1991-ben kezdődött, amikor Sumio Iijima kimutatta őket két széntartalmú elektród között létesített egyenáramú ívkisüléskor a katód felületén keletkezett széntartalmú termékek között [1]. Azóta vizsgálatuk rohamosan bővült. Sajátos tulajdonságaik ígéretes gyakorlati alkalmazásokat kínálnak a jövő számára, főleg kiváló mechanikai és elektromos tulajdonságaik miatt [2,3,4]. Felhasználhatók polimérek erősítésére [5], valamint nagyon kisméretű elektronikai eszközök készítésére [6], így reális alapanyagát képezik a jövő nanoelektronikájának. A mi kutatócsoportunk 2002 óta foglalkozik a szén nanocsövek előállításával és vizsgálatával [7,8,9].

1. A kísérleti berendezés és eljárás

A kísérleti berendezés részletes leírása megtalálható az eddig közölt dolgozatainkban [7,8]. A berendezés két legfontosabb része a kvarccsőből készült reaktor és a porlasztó. A szintézis megvalósításához a porlasztásos pirolízis módszerét alkalmaztuk. Ez az egyik leggyakrabban alkalmazott módszer, a kémiai úton való gőzlerakódásnak (Chemical Vapour Deposition) egyik változata [10]. Ezen eljárás mellett gyakran alkalmazzák még az egyenáramú ívkisülést [11], valamint a lézeres elpárologtatást [12]. A porlasztásos pirolízis módszerének előnyei: a) az eljárás egyszerűsége – kis anyagi befektetéssel megvalósítható; b) ipari méretű berendezések formájában is kivitelezhető nagyobb mennyiségű szén nanocső előállítására, aránylag hozzáférhető áron.

Az eljárás lényege, hogy a folyékony szénforrásból (benzol, xilol), mint oldószerből és a szilárd ferrocénből, mint oldott anyagból oldatot készítünk. A ferrocén tartalmazza a vasat, amelyet katalizátorként használunk. Az így elkészített oldatot a porlasztón keresztül argon gáz segítségével a megfelelő hőmérsékletű reaktorba porlasztjuk, ahol létrejön a szintézis. A végtermék nagy mennyiségben tartalmaz szén nanocsöveket (80–90%). A végterméket a legtöbb esetben tisztítjuk, előbb híg salétromsavban, majd desztillált vízben való kezeléssel. Ezen dolgozatban az argon gáz hozamának és az oldat ferrocén-tartalmának a hatását vizsgáljuk a kapott szén nanocsövek mennyiségére és minőségére vonatkozóan. A szén nanocsövek minőségét elsősorban transzmissziós elektronmikroszkóppal (TEM) vizsgáltuk.

2. Kísérleti eredmények és tárgyalásuk

2.1. Az argon gáz hozamának hatása

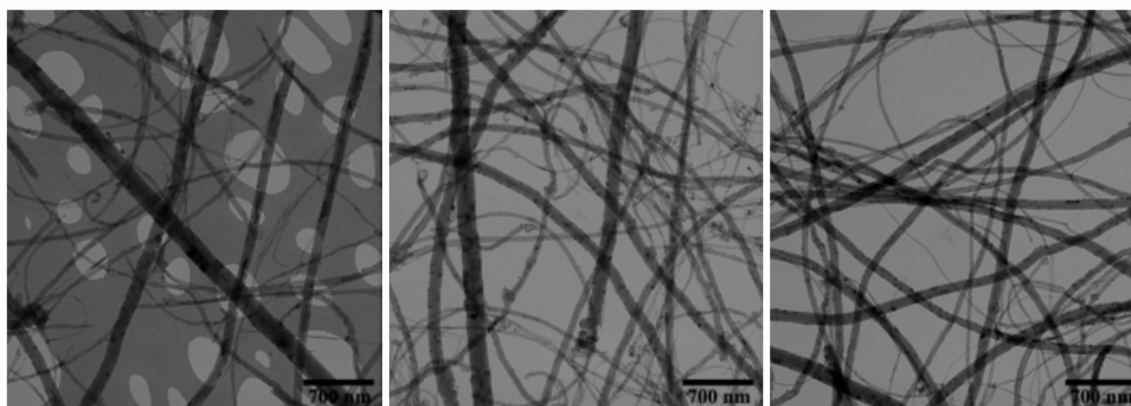
Az argon gáz különböző hozamai esetén kapott kísérleti eredményeket az 1-es táblázatban foglaltuk össze. Ezen mintákat benzol (angolul benzene) szénforrás használatával nyertük.

1. táblázat.

Az argon gáz hozamának hatása

A minta jelölése	Az argon gáz hozama (l/h)	A felhasznált benzol térfogata (ml)	A keletkezett anyagmennyiség (g)	A tisztított anyag mennyisége (g)	A tisztítás után visszanyert anyag (g)
S65	600	75	1,2153	1	0,8597
S60	500	75	1,2440	1	0,8741
S61	400	75	1,6605	1	0,7629
S63	300	75	2,2906	1	0,8762
S64	200	75	3,3755	1	0,8335

A többi kísérleti paraméter mindegyik kísérletnél azonos volt (reaktor hőmérséklete 875 °C, oldathozam 1 ml/perc, ferrocén-tartalom 4,5 g/75 ml benzol). Ezen paraméter-értékeket az előző méréseink eredményei alapján választottuk ki és tekintettük őket „optimális” paramétereknek. Az 1. táblázat adatai világosan mutatják, hogy a kiválasztott, állandó értéken tartott paraméterek mellett az argon-hozam csökkenésével nő a reaktorban keletkezett szén-tartalmú végtermék mennyisége és a kapott szén nanocsövek mennyisége is. A szén nanocsövek minőségét a TEM képek alapján értékeltük. Néhány jellegzetes felvételt mutatunk be az 1. ábrán.



1. ábra

TEM-felvételek az argon-hozam függvényében vizsgált, tisztított mintákról.

Balról jobbra a minták jelzése: S65, S61, S64

Ezeken a felvételeken is észrevehető, hogy a különböző mintákban levő szén nanocsövek minőségileg nem különböznek egymástól és a csövek elég nagy szórást mutatnak az átmérők méretének szempontjából. Tehát arra következtetünk, hogy az argon gáz hozama nem befolyásolja a porlasztás során nyert szén nanocsövek minőségét.

2.2. A ferrocén (mint katalizátor) mennyiségének hatása

A különböző ferrocén-mennyiségek használatakor kapott kísérleti eredményeket a 2. táblázat tartalmazza. Ezen kísérlet-sorozatban szénforrásként xilol (angolul xylene) használtunk.

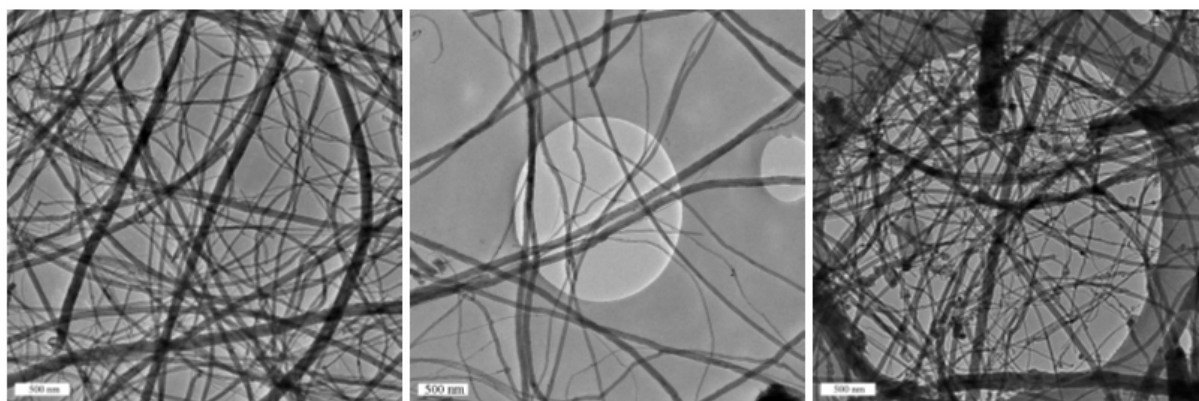
2. táblázat.

A ferrocén mennyiségének hatása

A minta jelölése	A ferrocén-tartalom (g)	A felhasznált xilol térfogata (ml)	A keletkezett anyag-mennyiség (g)	A tisztított anyag mennyisége (g)	A tisztítás után visszanyert anyag (g)
S79	0,25	25	0,0119	—*	—*
S76	0,75	25	0,1979	0,1	0,0942
S78	1,75	25	0,2427	0,1	0,0900
S77	2,489	25	0,6126	0,1	0,0999

* ezen minta esetén, mivel nagyon kevés anyagmennyiség keletkezett, nem végeztünk tisztítást

A többi kísérleti paraméter mindegyik kísérletnél azonos volt (a reaktor hőmérséklete 875 °C, az oldathozam 1 ml/perc, az argon gáz hozama 500 l/h). A 2. táblázat adatai alapján arra következtethetünk, hogy a katalizátor koncentráció növekedésével növekszik a reaktorban nyert szén nanocsövek mennyisége is. A szén nanocsövek minősége szintén a TEM képek alapján ítéltető meg (2. ábra). Amint a felvételek is mutatják, az S79 és S76 jelzésű, tisztított mintákban sok az egyenes, többfalú szén nanocső. Az S78 és S77 jelzésű minták, bár több a keletkezett anyagmennyiség, több amorf szenet tartalmaznak, amely a tisztítási folyamat során sem távozik. E két utóbbi mintában a nanocsövek minősége is rosszabb, a csövek nagy része görbült, sok hibát tartalmaz.



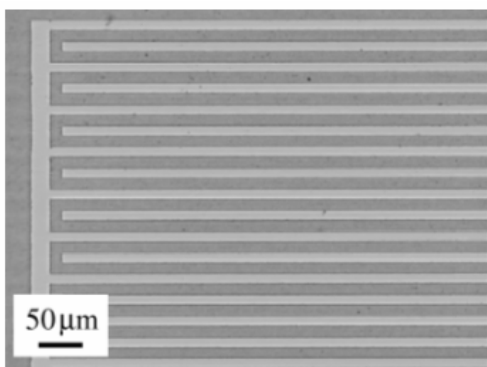
2. ábra

*TEM-felvételek a ferrocén-koncentráció függvényében kapott mintákról.
Balról jobbra a következő jelzésű minták láthatók: S79, S76, S77*

Megjegyezzük, hogy a katalizátor mennyisége a folyékony szénforrásban nem növelhető minden határon túl. Az elérhető legnagyobb mennyiséget a ferrocénnek az illető szénhidrogénben való oldhatósága határozza meg (esetünkben ~3 g/25 ml xilol). A katalizátor koncentrációjának ez a felső határa tekinthető úgy is, mint az eljárás egyik hátránya. Viszont, ha figyelembe vesszük, hogy a fenti kísérlet-sorozatban a legjobb minőségű szén nanocsöveket a 0,75g/25 ml xilol ferrocén-koncentrációval kaptuk, akkor ez talán nem is lényeges gyakorlati szempont.

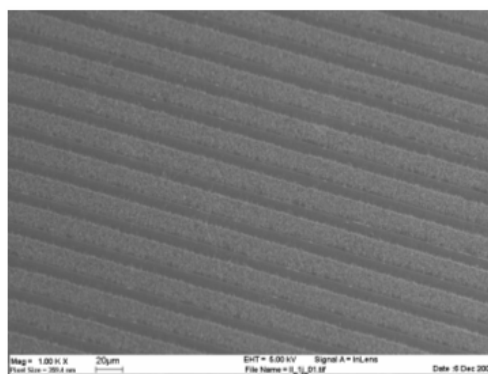
2.3. Gázérzékelőként való alkalmazási lehetőség

Ismert, hogy a félvezető szén nanocsövek elektromos ellenállása megváltozik különböző gázak jelenlétében [13,14,15]. Az érzékelő elkészítéséhez felhasználtuk a szén nanocsövek szelektív lerakódási tulajdonságát különböző anyagi minőségű hordozókra. A szén nanocsöveket egy SiO_2 lapkára porlasztottuk, amelyre előzetesen maszk alkalmazásával vékony aranyréteget vittek fel. Ezzel a módszerrel két, egymással szembe fordított fésűhöz hasonló mintázat készült (3. ábra). A szelektív lerakódást pásztázó elektronmikroszkópos eljárással (SEM) vizsgáltuk. A 4. ábrán látható, hogy a szén nanocsövek azokra a felületrészekre rakódtak le, ahol a SiO_2 lapkán nincs aranyréteg. Nagyobb nagyításban az is megfigyelhető, hogy a szén nanocsövek a SiO_2 -rétegre, a felületre merőlegesen képződtek (5. ábra).



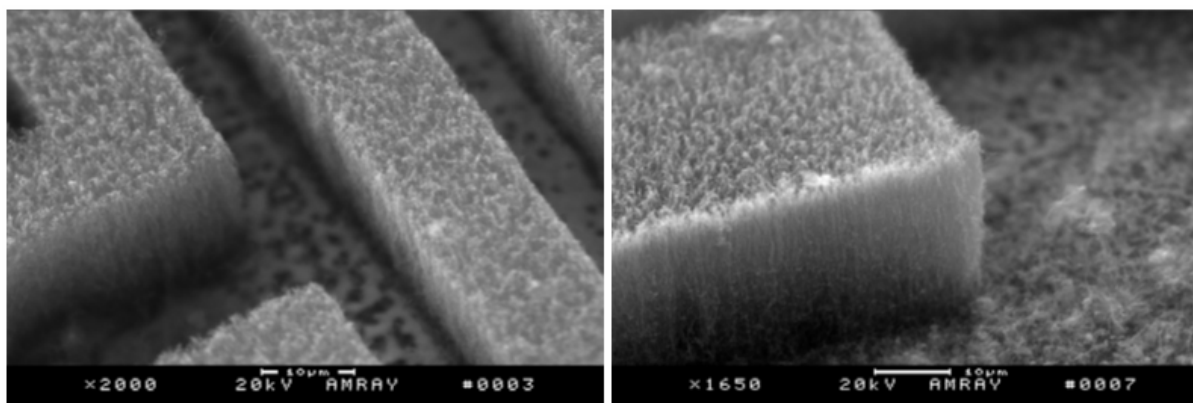
3. ábra

Au-mintázat SiO_2 lapkán (optikai mikroszkópos kép)



4. ábra

SiO_2 lapkára rávitt Au-mintázatra porlasztás során lerakódott szén nanocsövek SEM-képe



5. ábra

SiO_2 lapkára rávitt Au-mintázatra szelektíven lerakott szén nanocsövek SEM -képe két különböző nagyításban

Egy így elkészített lapkának áramkörbe való csatlakoztatásával tanulmányozható különböző gázak jelenléte a környező atmoszférában. Ezek a kísérletek jelenleg még folyamatban vannak.

3. Következtetések

A porlasztásos pirolízis módszere igen alkalmas többfalú szén nanocsövek előállítására. A tisztítási eljárás után a mintában a szén nanocsövek mennyisége 80–90%. Az Ar-hozam nem befolyásolja a szén nanocsövek minőségét. A legjobb minőségű nanocsövek alacsony ferrocén-koncentráció esetén keletkeznek, ezért az alacsony oldhatósági határ ellenére jó minőségű szén nanocsövek állíthatók elő. Ezen módszerrel sikeresen tudunk előállítani szelektíven lerakott mintákat, amelyek alkalmazási lehetőséggel bírnak miniatűr gázérzékelőkben.

4. Köszönetnyilvánítás

Jelen kutatás a Sapiencia – Kutatási Programok Intézetének támogatása mellett az OTKA T043685 és M 041689 szerződések támogatását is élvezte.

Irodalom

- [1] S. Iijima, *Nature (London)*, 1991/354, 56–58.
- [2] M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, P.C. Eklund, *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes*, Academic Press, San Diego, 1996
- [3] L.P. Biró, C.A. Bernardo, G.G. Tibbels, Ph. Lambin (eds.), *Carbon Filaments and Carbon Nanotubes: Common Origins, Differing Applications*, Kluwer Academic Publishing House, Dordrecht, 2001.
- [4] M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, Ph. Avouris (eds.) *Carbon Nanotubes Synthesis, Structure, Properties and Applications*, Springer Verlag, Berlin, 2001.
- [5] E.T. Thostenson, Z. Ren, Tsu-Wei Chou, *Comp. Sci. Technol*, 2001/61, 1899.
- [6] V. Derycke, R. Martel, J. Appenzeller, Ph. Avouris, *Nano. Lett.* 2001/9, 453.
- [7] L.P. Biró, Z.E. Horváth, A.A. Koós, Z. Osváth, Z. Vértesy, Al. Darabont, K. Kertész, C. Neamțu, Zs. Sárközi, L. Tapasztó, *J. of Optoelectronics and Adv. Mat.* 2003/5(3), 661–666.
- [8] Al. Darabont, K. Kertész, C. Neamțu, Zs. Sárközi, L. Tapasztó, L.P. Biró, Z.E. Horváth, A.A. Koós, Z. Osváth, Z. Vértesy, *Studia UBB, Physica*, 2003/Special Issue
- [9] L. Tapasztó, K. Kertész, Z. Vértesy, Z.E. Horváth, A.A. Koós, Z. Osváth, Zs. Sárközi, Al. Darabont, L.P. Biró, *Carbon*, 2005/43(5), 970–977.
- [10] M. Endo, K. Tacheuchi, K. Kobori, K. Takahashi, H.W. Kroto, A. Sarkar, *Carbon*, 1995/33, 873.
- [11] T.W. Ebbesen, P.M. Ajayan, *Nature (London)*, 1992/358, 220.
- [12] A. Tess, R. Lee, P. Nikolaev, H.E. Dai, P. Petit, J. Robert et al., *Science*, 1996/273, 483.
- [13] P. Collins, K. Bradley, M. Ishigani, A. Zettl, *Science*, 2000/287, 1801.
- [14] J. Kong et al., *Science*, 2000/287, 622.
- [15] S. Peng et al., in 3rd International Workshop on Structural Health Monitoring (ed. F.K. Chang), CRC Press, 2001, 1142–1148.

Fizika Nemzetközi Éve, Különszám
2 oldalra is

World Year of Physics Special Issue