Irodalom

26. L.V. Lorenz: *Upon the Light Reflected and Refracted by a Transparent Sphere* – Vidensk. Selsk. Shrifter *6* (1890) 1–62, dán nyelvű.
27. G. Mie: *Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metallösungen* – Ann. Phys., Leipzig *25* (1908) 377–445
28. P. Debye: *Der Lichtdruck auf Kugeln von beliebigem Material* – Ann. Phys., Leipzig *30* (1909) 57–136
29. M. Born, E. Wolf: *Principles of Optics* – Pergamon Press, New York, 1989 (6. javított kiadás)
30. I. Weiner, M. Rust, T.D. Donnelly: *Particle size determinantion: An undergraduate lab in Mie scattering* – American Journal of Physics *69* (2001) 129–136
31. László I.: *A részecskék sugárzás-szórásának fizikai törvényszerűségei* – Meteorológiai Tanulmányok *33* (1979) 27
32. Bencze P., Major Gy., Mészáros E.: *Fizikai Meteorológia* (szerk.: Mészáros E.) – Akadémiai Kiadó, Budapest, 1982.
33. J.D. Jackson: *Klasszikus elektrodinamika* – Typotex, Budapest, 2004.
34. Ru.T. Wang, H.C. van de Hulst: *Rainbows: Mie computations and the Airy approximation* – Applied Optics *30* (1991) 106–117
35. P. Laven: *Simulation of rainbows, coronas and glories by use of Mie theory* – Applied Optics *42* (2003) 436–444
36. R.L. Lee, Jr.: *Mie theory, Airy theory, and the natural rainbow* – Applied Optics *37* (1998) 1506–1519
37. E.A. Hovenac, J.A. Lock: *Assesing the contributions of surface waves and complex rays to far-field Mie scattering by use of the Debye series* – J. Opt. Soc. Am. A *9* (1992) 781–795
38. S.I. Rubinow: *Scattering from a penetrable sphere at short wavelengths* – Annals of Physics, N. Y. *14* (1961) 305–332
39. http://www.sundog.clara.co.uk/droplets/corona.htm
40. H.M. Nussenzveig: *High-frequency scattering by a transparent sphere. I. Direct reflection and transmission; High-frequency scattering by a transparent sphere. II. Theory of the rainbow and glory* – Journal of Mathematical Physics *10* (1969) 82–124; 125–176
41. http://www.sundog.clara.co.uk/droplets/glory.htm
http://www.sundog.clara.co.uk/droplets/gloim1.htm
42. L.D. Landau, E.M. Lifsic: *Elméleti Fizika III (Kvantummechanika)* – Tankönyvkiadó, Budapest, 1978.
43. K.W. Ford, J.A. Wheeler: *Semiclassical description of scattering* – Annals of Physics, N. Y. *7* (1959) 259–286
44. M.V. Berry: *Uniform approximation for potential scattering involving a rainbow* – Proc. Phys. Soc. *89* (1966) 479–490
45. V. Khare, H.M. Nussenzveig: *Theory of the Rainbow* – Physical Review Letters *33* (1974) 976–980
46. H.A. Daw: *A 360° rainbow demonstration* – American Journal of Physics *58* (1990) 593–595
47. A.J. Cox, A.J. DeWeerd, J. Linden: *An experiment to measure Mie and Rayleigh total scattering cross sections* – American Journal of Physics *70* (2002) 620–625
48. http://www.sundog.clara.co.uk/atoptics/phenom.htm
http://my.unidata.ucar.edu/content/staff/blynds/rnbw.html
http://www.usna.edu/Users/oceano/raylee/RainbowBridge/Chapter_8.html
http://hjem.get2net.dk/Hemmingsen/Rainbow/
http://www.phy.ntnu.edu.tw/java/Rainbow/rainbow.html
http://www.rfleet.clara.net/gbh/gbhindex.html

EINSTEIN ELŐADÁSAI A STATISZTIKUS MECHANIKÁRÓL 1917 ŐSZÉN

– JEGYZETEK EGY KÉZIRAT MARGÓJÁRA

Hajdu János
Kölni Egyetem, Elméleti Fizikai Intézet, Németország

Albert Einstein az 1917/18-as téli félévben csütörtökönként előadásokat tartott a berlini egyetemen *Statisztikus Mechanika* címmel. A feltehetően tizenöt hétre tervezett kurzus utolsó harmada Einstein megbetegedése miatt elmaradt. A megtartott tíz előadást egy Berlinben éppen katonai szolgálatot teljesítő – és később ott mint gimnáziumi tanár tevékenykedő – hallgató, *Walter Zabel* (1892–1968), gyorsírással rögzítette. Az alábbi széljegyzetek az ebből készült, az interneten hozzáférhető [1] kézirathoz kapcsolódnak.

Történelmi és személyi körülmények

1917 őszén és 1918 tavaszán a központi hatalmak a nyugati frontokon ugyan kisebb térnyeréseket vívtak ki, de tartalékaik messzemenően kimerültek. Sem a „kiélesített” búvárhajóharc (az „utolsó adu”), sem az oroszországi forradalmat követő fegyverszünet a keleti fronton nem váltotta be a hozzá fűzött stratégiai reményeket. 1918. augusztus 14-én a legfelső katonai vezetés kinyilatkoztatja, hogy a háború folytatása reménytelen [2]. Einstein, miután 1913-ban a porosz tudományos akadémia rendes tagjává választotta és az (1911-ben alapított) Kaiser-Wilhelm-Gesellschaft egy újonnan alapítandó fizikai intézet igazgatójának nevezte ki, 1914 tavaszán (családját hátrahagyva) Zürichből Berlinbe költözik [3]. Mint kutatóprofesszor előadásokat tart az ottani egyetemen, és rendszeres résztvevője a híres berlini fizikai kollokviumnak. A háború kitörése pillanatától aktív pacifista: nyilvánosan elítéli a háborút, támogatja a háborúellenes mozgalmakat [4]. A nyomasztó körülmények dacára tudományos alkotóereje töretlen, sőt most éri el csúcspontját: 1916–17-ben publikálja alapvető értekezéseit az általános relativitáselméletről, illetve ennek kozmológiai alkalmazásáról, valamint a fény spontán és indukált emissziójáról (Einstein-koefficiensek). 1917. december végén megbetegszik (sárgaság, gyomorfekély), s 1920-ig tart, míg visszanyeri egészségét. Unokanővére – későbbi második felesége – ápolja. Talán neki köszönheti, hogy életben marad [5]. Orvosai szigorú diétát írnak elő, ami a fővárosban, ahol súlyos élelmiszer- (és tüzelőanyag-) hiány uralkodik, csak a vidéki ismerősök segítségével teremthető elő. Élelmiszercsomag érkezik Münchenből is, *Arnold Sommerfeld*től [6]. Ha kellemes is lehetett a betegágy melege a rosszul fűtött lakásban, Einstein minden bizonnyal nyugtalankodott a sürgős elintézésre váró feladatok miatt; az 1917-ben megnyílt fizikai intézet kutatómunkájának beindítása, *Max Planck* 60. születésnapjára (1918. április) tervezett ünnepségek megszervezése (ami reá mint a német fizikai társulat búcsúzó elnökére hárult) és a zürichi egyetemen vendégprofesszorként tartandó előadásainak (1918–20) kidolgozása.

Úgy tűnik, Einstein szerteágazó tevékenységei miatt az 1917/18-as *Statisztikus Mechanika* kurzus valamelyest a háttérbe szorult. Erre utalnak különböző hiányosságok, különösen az irodalom feldolgozása terén. Einstein álláspontjának explicit szembesítésére *Boltzmann* és *Gibbs* felfogásával sajnos szintén nem került sor.

A következőkben a statisztikus mechanika kibontakozásának és Einstein idevágó munkáinak rövid összefoglalása után ismertetjük az 1917/18-as kurzus jegyzetét és kísérletet teszünk Einstein akkori álláspontjának körvonalazására.

A statisztikus mechanika kibontakozása

A statisztikus mechanika területén a 19. század legfontosabb hagyatéka a Boltzmann-féle transzportegyenlet, az entrópia (S) és az állapotok termodinamikai valószínűsége (W) között kapcsolatot teremtő

$$S = k \ln W \tag{1}$$

Boltzmann-féle elv (k a Boltzmann-állandó), a legvalószínűbb eloszlás erre alapuló módszere, valamint az ergodikus tétel, mely szerint izolált mechanikai rendszer esetében egy fizikai mennyiség időátlaga és az energiafelületre vett (mikrokanonikus) sokaságátlaga egyenlő (ergodicitás) [7, 8]. *Maxwell* és Boltzmann ezt a sarkalatos tételt abból a feltevésből származtatta, hogy az izolált rendszer állapotváltozást leíró fázistérbeli trajektória az energiafelület minden pontján áthalad. Később nyilvánvalóvá vált, hogy ez az „ergodikus hipotézis" matematikailag tarthatatlan [9]. Az ergodikus tétel bizonyítására való törekvésekből idővel a matematika egy speciális ága (ergodikus elmélet, kb. 1930-tól) fejlődött ki. Az áttörést *Sinai* eredményei hozták 1970-ben, miszerint (bizonyos határfeltételek mellett) merev gömbök rendszere ergodikus [10]. Manapság a fizikusok többsége az ergodikus tételt bizonyítottnak tekinti.

1902-ben J.W. Gibbs a statisztikus sokaságok módszerének kidolgozásával egy új, alternatív utat nyitott a statisztikus mechanika felépítéséhez [11]. Ennek fogalmi alapját egy izolált rendszer lehetséges állapotainak egyenlő a priori valószínűségét kimondó hipotézis képezi. Az elmélet felépítése (kb. 1970 óta) matematikai szempontból is lezártnak tekinthető [12].

A ρ eloszlású sokaság entrópiájának Gibbstől származó definíciója

$$S = k \langle \ln \rho \rangle, \tag{2}$$

ahol $\langle \ldots \rangle$ a ρ eloszlásra vett átlagot jelöli,

$$\langle A \rangle = \int A \rho \, d\Gamma \tag{3}$$

(amely, ha a sokaság reprezentatív, azonos A mért értékével). A termodinamikai egyensúlyt reprezentáló sokaságok azok, amelyek eloszlására, a mindenkori mellékfeltételek figyelembevételével, az entrópia maximális értéket vesz fel. Ez mikrokanonikus sokaság, ha a rendszer izolált, kanonikus, ha a rendszer zárt, és nagykanonikus, ha a rendszer nyílt. Nemegyensúlyi állapotok esetében az eloszlás meghatározására általános utasítás nem létezik és talán nem is létezhet. Vannak azonban, akik ennek megfogalmazását a szinergetikától várják [13].

1912-ben *Paul Ehrenfest* és felesége, *Tatjana Afanaszjeva* a statisztikus mechanika főként Maxwelltől, Boltzmanntól és Gibbstől származó módszereit szigorú logikai elemzésnek vetette alá [14]. Munkájuk, mely mindmáig megőrizte intellektuális ragyogását, tanulságos betekintést ad az elmélet állásába néhány évvel Einstein 1917/18-as kurzusa előtt. Ez utóbbi áll *Paul Hertz* 1916-ban kiadott tankönyvére is [15].

1. ábra. A kézirat első részének egy oldala

Einstein munkái a statisztikus mechanika megalapozásáról

Az 1902–04 időszakban Einstein három publikációban foglalkozik a statisztikus mechanika alapjaival [16a–c]. Statisztikai sokaság segítségével kapcsolatot teremt az állapotok mechanikai jellemzése és valószínűsége között. Az időátlagtól a mikrokanonikus és kanonikus sokaságon keresztül eljut az egyensúlyi termodinamika statisztikus értelmezéséhez. Bebizonyítja az ekvipartíciótételt, és kimutatja, hogy kanonikus eloszlás esetében az energia relatív négyzetes ingadozása fordítva arányos a szabadsági fokok számával, valamint a mikrokanonikus és kanonikus eloszlás ekvivalenciáját, ha a szabadsági fok száma kellően nagy. Mindez nagy teljesítmény, de nem új: szinte azonosan megegyezik Gibbs eredményeivel. A természettudományok történetében efféle koincidenciára számtalan példa van. Einstein később úgy nyilatkozott, hogy munkáit sohasem publikálta volna, ha ismeri Gibbs könyvét [16d]. Úgy tűnik, annak idején Maxwell és Boltzmann munkásságából is csak azt ismerte, ami Boltzmann tankönyvében [17] említésre került. Einstein statisztikus mechanikai munkáinak elemzésére az Ehrenfest házaspár sajnos nem tér ki, de később ezt több jeles írás is megtette [18–20]. Ezért itt csak néhány megjegyzésre szorítkozunk.

Míg Gibbs tárgyalásmódja absztrakt, formális, addig Einstein az intuitív fizikai okfejtés útját követi. Alapvetően fontosnak tartja, hogy a Boltzmann-féle elvben – melynek (1) alatti alakja Plancktól (1901) és elnevezése Einsteintől származik – nem a W termodinamikai való-


5)

Ob wir sagen wir integrieren über den unendlich dünnen Schalen oder über den ganzen Energieraum, so macht das nichts aus!

Das ist das $\int$ über eine Schicht von der Dicke $d\varepsilon$ [die hier $= 2\varepsilon$ ist]

Die Integration über den ganzen Raum ergibt

~~Bilden wir den lg so ergibt~~

Es wird

Für beide Fälle ergibt sich:

ist für beide das gleiche.

2. *ábra*. A kézirat második részének egy oldala

színűség, hanem az S entrópia az empirikusan hozzáférhető mennyiség. Logikus, a W valószínűséget kvantitatív módon definiáló alakja ezért

$$W = \exp(S/k). \tag{4}$$

Ez az alak vezette el Einsteint [16c, 21] az ingadozási jelenségek tárgyalásának általános módszeréhez [7, 22] (lásd *Boltzmann vagy Gibbs?* széljegyzetet), és ennek alkalmazása (többek között a kvantált elektromágneses sugárzásra) Einstein egyik jelentős önálló hozzájárulása a statisztikus fizikához.

A kézirat alakja és tartalma

A kézirat két részből áll. Az első rész (8 előadás, 72 oldal) Zabel gyorsírásos jegyzetének kidolgozott, szépírásos változata (*1. ábra*). A második rész (2 előadás, 27 oldal) Zabel gyorsírásos feljegyzésének „nyers” gépelt átirata (Zürich: ETH-Bibliothek, 1986). A képletek és ábrák az eredeti (korrigálatlan) hasonmásai (*2. ábra*). Ez a rész kidolgozatlan; a szöveg helyenként érthetetlen, a képletekben számos hiba van. A kézirat tartalma tömören:

1. Az analitikus mechanika alapjai (18 o.): Lagrange, Hamilton, erőmentes pörgettyű.
2. Statisztikus sokaságok (10 o.)
3. A kanonikus sokaság tulajdonságai (21 o.): A kanonikus eloszlás keskeny, energiaingadozás, izolált rendszer zárt alrendszerének energia-eloszlása, kanonikus, abszolút hőmérséklet, egyensúlyi termodinamika megalapozása.
4. Alkalmazások (37 o.): Maxwell-féle sebességeloszlása, specifikus hő, barometrikus eloszlás, a ferromagnetizmus Langevin–Weiss-féle elmélete, Brown-mozgás, a mikrokanonikus sokaság entrópiája.
5. A Boltzmann-féle elv (12 o.)

Részletek, kommentárok

Statisztikus sokaságok részhez

Einstein saját publikációinak [16a–c] gondolatmenetét követi, jóllehet korábban hangoztatott véleménye szerint Gibbs (a kanonikus sokaságból kiinduló) eljárása az övével szemben „előnyben részesítendő” [16d]. A rendszer trajektóriája a fázistér (ill. megmaradási mennyiségek létezése esetében ennek alacsonyabb dimenziójú alterének) minden kis celláján áthalad. Ha τ időtartamból összesen δt időt tölt egy $\delta\Gamma$ méretű cellában, akkor a cella által behatárolt állapot valószínűsége (definíciószerűen)

$$\delta w = \lim_{\tau \to \infty} \frac{\delta t}{\tau} \tag{5}$$

(nyilván $0 \le \delta w \le 1$). Ezután N számú, azonos felépítésű izolált rendszerből statisztikus sokaság képezendő úgy, hogy $\delta\Gamma$ betöltése $\delta N = N\delta w$ legyen. A gondolatmenet záró láncszeme egy hipotézis, mely szerint δw arányos $\delta\Gamma$-val,

$$\delta w = \rho\, \delta\Gamma, \tag{6}$$

ahol $\rho = \rho(P, Q)$ a fázistér folytonos függvénye. Ha a vizsgált rendszer izolált, és csak az energia megmaradási mennyiség, akkor ρ azonosítható a mikrokanonikus eloszlással, és az eszerint vett sokaságátlag megegyezik az időátlaggal. Ebben az esetben a fenti gondolatmenet azonos Boltzmann érvelésével, és az (5), (6) összefüggéseket illetően két lehetőség áll fenn [14]. Ha elfogadjuk az ergodikus hipotézist, akkor (5) és (6) jobb oldalának egyenlősége egy mechanikai tétel, mely semmiféle valószínűségi elemet nem tartalmaz. Ha azonban elvetjük vagy valamilyen módon általánosítjuk az ergodikus hipotézist, akkor nyitva marad, hogy a szóban forgó összefüggés szigorúan vagy esetleg kielégítő közelítésben teljesül-e. Einstein e probléma taglalását elkerüli, mivel a (6) összefüggést mint a statisztikus mechanika alapvető axiómáját vezeti be. Megjegyezzük, hogy így jár el *Landau* és *Lifsic* [22] is.

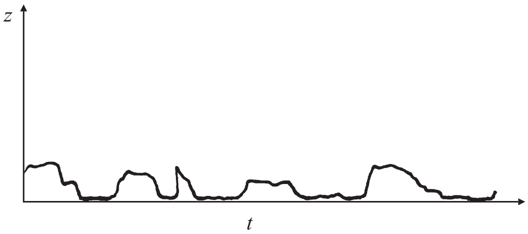
Ezek után Einstein (talán Gibbs hatására) módszert vált, és a csak az energiától függő $\rho(H)$ eloszlások közül ad hoc kiválasztja a kanonikus eloszlást, és megvizsgálja ennek tulajdonságait és következményeit. Később azonban visszatér a felépítés eredeti fonalához, és megmutatja, hogy a mikrokanonikus eloszlás által reprezentált izolált rendszer bármely zárt makroszkopikus részrendszerének energiaeloszlása kanonikus.

Alkalmazások részhez

Einstein a Brown-mozgás elemi elméletét ismerteti alapvető munkája [23a] és egy népszerűsítő írása [23b] nyomán. *Langevin* módszerére (1908) nem tér ki. Levezeti az $S = k\ln\phi$ összefüggést, ahol ϕ az energiafelület menti fázistérfogat, és megmutatja, hogy ez a felület által bezárt térfogattal helyettesíthető.

A Boltzmann-féle elv részhez

Einstein: A Boltzmann-féle elv feloldja a mikroszkopikus reverzibilitás és a makroszkopikus irreverzibilitás közötti látszólagos konfliktust. Minden makroszkopikus rendszer nagy valószínűséggel egy kisebb valószínűségű



3. ábra. A földre hulló, becsapódáskor T hőmérsékletre szert tevő részecske a földfelszín közelében fel-le mozog.

állapotból egy nagyobb valószínűségi állapotba halad. Ennek a kijelentésnek a jellege olyan, mint amikor átlagértékekről beszélünk. Az állapot valószínűségét az állapot entrópiája határozza meg. Például ideális gáz esetében a termodinamika első és második főtételéből

$$S = k \ln V^N + S_0(T) \tag{7}$$

következik, ahol most N a molekulák száma, V a térfogat és T az abszolút hőmérséklet. Tehát annak az állapotnak a valószínűsége, amikor minden molekula a $V_1 < V$ térfogatban van

$$W(V_1) = \left(\frac{V_1}{V}\right)^N W(V). \tag{8}$$

Ha például V_1 = 0,99 V és $N = 10^5$, akkor $W(V_1)$ egy ≈ 10^{-44} faktorral kisebb $W(V)$-nál, tehát ez az állapot gyakorlatilag soha sem valósul meg. Einstein második példája egy m tömegű, z magasságból földre hulló részecske, melynek teljes mgz potenciális energiája a felszínre csapódáskor hővé alakul. Mivel ez T hőmérsékletnél mgz/T entrópianövekedést jelent, a z magasságú állapot valószínűsége arányos $\exp(-mgz/kT)$-vel. Ezért, ha nagyon sokáig figyeljük meg a részecskét, azt látjuk, hogy a földfelszín közelében fel-le mozog (*3. ábra*). Nagy tömegű részecskénél visszafelé mozgás nagyobb magasságra csak igen ritkán fordul elő. Ezek a példák szemléltetik az irreverzibilitás (már Boltzmann által felismert) statisztikus jellegét. „A Boltzmann-féle elv segítségével a termodinamikai megfontolásokból ismert entrópiából meghatározhatjuk a vizsgált állapot valószínűségét, és így fontos információt nyerhetünk a rendszer molekuláris mozgásállapotairól. Ebben rejlik az elv nagy fontossága.”

Ami elmaradt. Gibbs és Einstein módszere az ingadozás vizsgálatára

A kézirat utolsó mondta: [az entrópia és valószínűség közötti] „összefüggés igen sok nagy fontosságú alkalmazást tesz lehetővé, melyekről a továbbiakban hallani fogunk”. Az elmaradt előadások programja ezek szerint aligha lehetett más, mint az ingadozási jelenségek tárgyalása. Einstein minden bizonnyal ismertetni szándékozott saját módszerét és néhányat idevágó eredményeiből (v.ö. [18]), úgy, mint ezt például a Brown-mozgás esetében tette. Az ingadozások meghatározásával Gibbs is foglalkozott. Az alábbiakban Einstein és Gibbs különböző szemléletre alapuló módszereihez fűztünk néhány megjegyzést.

Egy fizikai mennyiség mért értékhalmazának jellemzése szerint az $\langle A\rangle$ átlagérték és az ettől való $\langle (A-\langle A\rangle)^2\rangle$ átlagos négyzetes eltérés (ingadozás) segítségével történik. Gibbs ezeket a mennyiségeket a mindenkori reprezentatív sokaság fázistérbeli ρ eloszlásából származtatja. Zárt rendszert termodinamikai egyensúlyban a

$$\rho = \exp\left(\frac{F-H}{kT}\right) \tag{9}$$

eloszlású kanonikus sokaság reprezentálja, ahol H a rendszer teljes energiája és F a szabad energia. Feltételezzük, hogy H az általános koordinátákon és impulzusokon kívül még egy a külső paramétertől (pl. a rendszer V térfogatától) függ, $H = H(Q, P; a)$, $F = F(T, a)$. Az a paraméterhez konjugált általános erő

$$A = -\left(\frac{\partial H}{\partial a}\right)_{Q,\,P} \tag{10}$$

(9) eloszlásra vett átlaga

$$\langle A\rangle = -\left(\frac{\partial F}{\partial a}\right)_T \tag{11}$$

és négyzetes ingadozása, a $\Delta A = A - \langle A\rangle$ jelöléssel,

$$\langle \Delta A^2\rangle = kT\left[\left\langle\left(\frac{\partial^2 H}{\partial a^2}\right)_{Q,\,P}\right\rangle - \left(\frac{\partial^2 F}{\partial a^2}\right)_T\right]. \tag{12}$$

A fenti, Gibbstől származó képletek az $\langle 1\rangle = 1$ normális feltétel egyszeri, illetve kétszeri a szerinti deriválásával könnyen igazolhatók. (Gibbs módszerét részletesen tárgyalja [24].)

Einstein módszere [7, 22] nem az egyensúlyi sokaságok elméletére, hanem az (1) Boltzmann-féle elvre, pontosabban ennek (4) inverzére alapul. Tételezzük fel, hogy a vizsgált rendszer makroszkopikus állapotai valamely x paramétertől függnek, és az egyensúlyi állapothoz az $x = x_0$ érték tartozik. Akkor az egyensúlyi állapot közelében

$$S(x) = S(x_0) - \frac{\alpha}{2}\left(x - x_0\right)^2. \tag{13}$$

$(\partial S/\partial x)_{x=x_0} = 0$, $\alpha = -(\partial^2 S/\partial x^2)_{x=x_0} > 0$, mert egyensúlyban az entrópia maximális értéket vesz fel. Így az x értékhez tartozó állapot 1-re normált valószínűsége

$$w(x) = C\exp\left[-\alpha\,\frac{\left(x-x_0\right)^2}{2k}\right], \qquad \int w(x)\,dx = 1, \tag{14}$$

és ebből következően

$$\langle x\rangle = \int w(x)\,x\,dx = x_0, \tag{15}$$

$$\langle \Delta x^2\rangle = \frac{k}{\alpha}. \tag{16}$$

Tanulságos a két módszert összehasonlítani. Ha $a = V$ a rendszer térfogata, akkor

$$A = -\frac{\partial H}{\partial V} \equiv \hat{p}$$

$$\langle A \rangle = \langle \hat{p} \rangle = -\frac{\partial F}{\partial V} = p$$

a nyomás, és ennek ingadozása (12) szerint

$$\langle \Delta p^2 \rangle = k\,T\left[\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T - \left\langle\left(\frac{\partial \hat{p}}{\partial V}\right)_{Q,\,P}\right\rangle\right], \tag{17}$$

míg (16) szerint

$$\langle \Delta p^2 \rangle = -k\,T\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_S \tag{18}$$

[22]. Az eredmények eltérésének két oka van. Egyensúlyban a nyomás ingadozását az energia és a térfogat ingadozása okozza. (17) levezetésénél az utóbbiból származó járulékot, ami éppen (17) jobb oldalának első tagját kompenzálja, figyelmen kívül hagytuk. A másik ok mélyebben fekvő. (17) jobb oldalának második tagja termodinamikai szempontból nem jól definiált. Ha szigorúan vesszük, hogy a térfogat változtatásánál az összes koordinátát és impulzust rögzítve kell tartani, akkor ezzel a „zavar” dinamikai csillapításának a lehetőségét kizárjuk, és ez irreálisan nagy nyomásingadozást eredményez. Másrészt a térfogat variálásánál a termodinamikai egyensúly csak akkor marad fenn, ha a változás lassú a molekuláris mozgás átlagos sebességéhez képest. Pontosabban akkor, ha a térfogatváltozás olyan lassú, hogy az energia ugyan változik, de az energia $\rho(H)$ eloszlása változatlan marad, és így (2) szerint $dS = 0$ (adiabatikus folyamat). Ezzel az interpretációval (17) megegyezik (18)-cal [25]. További példaként tekintsük a térfogat ingadozását (hengerbe zárt gáz, egyik végén szabadon mozgó dugattyúval)! Ha Gibbs módszerét kívánjuk alkalmazni, a p nyomást kell külső paraméterként választanunk (a dugattyút is a rendszerhez számítjuk). Más szóval, a

$$H \to K = H + p\,V, \qquad F \to G = F + p\,V \tag{19}$$

transzformációval át kell térni a

$$\rho = \exp\left(\frac{G - H - p\,V}{k\,T}\right) \tag{20}$$

eloszlású kanonikus nyomássokasághoz,

$$\langle V \rangle = \frac{\partial G}{\partial p}, \tag{21}$$

$$\langle \Delta V^2 \rangle = k\,T\left[\left\langle\left(\frac{\partial^2 K}{\partial p^2}\right)\right\rangle - \left(\frac{\partial^2 G}{\partial p^2}\right)_T\right]. \tag{22}$$

Mivel

$$\frac{\partial^2 K}{\partial p^2} = 0 \quad \text{és} \quad \frac{\partial^2 G}{\partial p^2} = \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T,$$

az eredmény

$$\langle \Delta V^2 \rangle = -k\,T\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T. \tag{23}$$

Másrészt, Einstein módszerét követve, $x = V$-vel,

$$\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)_T = \left(\frac{\partial S(T,\,V)}{\partial V}\right)_T = \frac{p}{T}, \qquad \alpha = -\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T \frac{1}{T},$$

$$\langle \Delta V^2 \rangle = -k\,T\frac{1}{\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T}. \tag{24}$$

adódik. Látjuk, amíg $V = V(p,\,T)$ p-ben invertálható függvény, a két eredmény ismét megegyezik. Hogy a két módszer a vizsgált példákban azonos eredményre vezet, nem véletlen. A Boltzmann-féle elvből ugyanis következik, hogy egy izolált rendszer zárt részrendszerének egyensúlyi energiaeloszlása kanonikus.

Einstein módszere, mint említettük, fenomenologikus, és így általánosabb és közvetlenül alkalmazható ismert makroszkopikus állapotú rendszerekre. Példa erre a T hőmérsékletű, φ kilengésű torziós inga, melyre

$$\langle \varphi^2 \rangle = \frac{k\,T}{D} \tag{25}$$

adódik, ahol D a inga irányító nyomatéka. A (25) összefüggésből a k Boltzmann-állandó értéke meghatározható (1931). Einsteint k (ill. az Avogadro-szám) kísérleti meghatározásának problémája (kb. 1920-ig) behatóan foglalkoztatta. Ezzel szemben Gibbs módszere külön interpretációra szorul, és alkalmazása általában nehézkesebb Einsteinénél.

Boltzmann vagy Gibbs?

Einstein 1917/18-as kurzusának jegyzete értékes dokumentum, mert kirajzolódik belőle Einstein egyéni felfogása a statisztikus mechanika alapjairól. Ez részben megegyezik és részben lényegesen eltér Gibbs és Boltzmann felfogásától. Einstein is használja a statisztikus sokaságokat, de csak a termodinamikai egyensúly esetében (és, mint említettük, a mikrokanonikus sokaságot dinamikai meggondolásokból származtatja). Bár több ízben igen elismerően nyilatkozott Gibbs munkásságáról [16d, 18], előadásaiban nem őt követi, és Gibbs általános entrópiadefinícióját meg sem említi (talán szándékosan el is kerüli), helyette a $dS = dQ/T$ definíciót használja, jóllehet (2) Gibbs elméletének alapkövét képezi. Lehet, hogy Einstein Gibbs formális tárgyalásmódját didaktikai szempontból nem találta célszerűnek (mint később is több szerző [26]). Ha így is van, a fő ok mégis másban rejlik: Einstein az irreverzibilitás magyarázatát és az ingadozási jelenségek kvantitatív tárgyalását nem a statisztikus sokaságok elméletére, hanem a Boltzmann-féle elvre alapozta, amelyet azonban Boltzmann felfogásától eltérően az állapot valószínűségének fenomenologikus meghatározásaként értelmezett. A „Boltzmann vagy Gibbs?” kérdésre Einstein salamoni válasza tehát „Boltzmann és Gibbs”.

Az 1917/18-as kurzust követő években Einstein tevékenysége a statisztikus mechanika terén szemináriumára korlátozódik. 1921-ben megismerkedik *Szilárd Leó*val, aki attól kezdve ismételten kéri, hirdessen szemináriumot statisztikus mechanikáról. Ennek Einstein több ízben eleget is tett. A szemináriumokon részt vett, ha Berlinben volt, *Neumann János* és minden bizonnyal *Wigner Jenő, Gábor Dénes, Polányi Mihály* és talán *Bay Zoltán* is. Szilárd itt „próbálta ki” a tárgyat érintő munkáit [27], és (valószínűleg) itt érlelődtek meg Neumann János elgondolásai a kvantummechanika és a statisztikus mechanika kölcsönös kapcsolatáról is [28].

Mint Neumanntól tudjuk, a kvantummechanikai entrópiadefiníciójához (ami egyébként nem más, mint (2) átírása a kvantummechanika nyelvére), Szilárd adta az ötletet [29]. Jóllehet a Boltzmann-féle entrópiadefiníció (1) nem ültethető át a kvantummechanika operátorformalizmusába, helye a kvantumfizikában éppúgy megvan, mint a klasszikusban: W a kvantumállapotok száma. Boltzmann entrópiafogalmából bontakozott ki Szilárd merőben új interpretációja is, miszerint az entrópia a vizsgált rendszer állapotára vonatkozó ismerethiány kvantitatív mértéke. (Ezzel teljes összhangban van a későbbi információelmélet entrópiakifejezése, amely Gibbs definíciójára emlékeztet.)

A mai statisztikus fizika magában foglalja mind Boltzmann, mind Gibbs szemléletét. A szintézis, melyet Einstein Boltzmann és Gibbs elméleteinek elemeiből, valamint saját felismeréseiből hozott létre és egyetemi kurzusában körvonalazott, a fejlődés egy közbülső állomását jellemzi, de ma is megállja a helyét.

✧

Köszönettel tartozom *Polónyi János*nak a számtalan jó tanácsért.

Irodalom

1. http://echo.mpiwg-berlin.mpg.de/content/relativityrevolution/zabel
2. GALÁNTAI J.: *Az első világháború* – Gondolat, Budapest, 1988.
3. A. FÖLSING: *Albert Einstein. Eine Biographie* – Suhrkamp, Frankfurt/M, 1993.
4. *Einstein on Peace* (szerk. O. Nathan, H. Norden) – Schocken, New York, 1968.
5. M. BORN in: *Albert Einstein/Max Born, Briefwechsel 1916–1955.* – Nymphenburger, München, 1969.
6. *Albert Einstein/Arnold Sommerfeld, Briefwechsel* (szerk. A. Hermann) – Schwabe & Co., Basel/Stuttgart, 1968.
7. R. KUBO ET AL.: *Statisztikus Mechanika* – Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1976.
8. HORVÁTH J.: *Termodinamika és Statisztikus Mechanika* – Tankönyvkiadó, Budapest, 1970.
9. A. ROSENTHAL – Ann. Physik *42* (1913) 796; M. PLANCHEREL – Ann. Physik *42* (1913) 1061
10. J. SINAI in: *Statistical Mechanics, Foundations and Applications* (szerk. T.A. Bak) – Benjamin, New York, 1967.
11. J.W. GIBBS: *Elementary Principles of Statistical Mechanics* – Yale UP, New Haven, 1902; németül *Elementare Grundlagen der Statistischen Mechanik* (ford. E. Zermolo) – Teubner, Leipzig, 1905.
12. D. RUELLE: *Statistical Mechanics* – Benjamin, New York, 1969.
13. H. HAKEN: *Synergetics* – Springer, Berlin etc., 1977.
14. P. EHRENFEST, T. EHRENFEST: *Encykl. Math. Wiss.* IV/32, 1911; angol ford.: *The Conceptual Foundations of the Statistical Mechanics* – Cornell UP, Ithaca, 1959.
15. P. HERTZ in: WEBER-GANS: Repertorium der Physik, Bd. I/2. – Teubner, Leipzig, 1916.
16. A. EINSTEIN – Ann. Physik *9* (1902) 417; *11* (1903) 170; *14* (1904) 354; *34* (1911) 175
17. L. BOLTZMANN: *Vorlesungen über Gastheorie,* 2 Bde. – J.A. Barth, Leipzig, 1896/1898.
18. A. PAIS: *„Subtle is the Lord…” The Science and Life of Albert Einstein* – Oxford UP, Oxford etc., 1982.
19. M. BORN in: *Albert Einstein: Philosopher-Scientist* (Vol. 1). (szerk. A. Schlipp) – Open Court, La Salle, Ill., 1982.
20. M.J. KLEIN in: *Albert Einstein – Historical and Cultural Perspectives* (szerk. G. Holton, Y. Elkana) – Princeton UP, 1982.
21. A. EINSTEIN – Ann. Physik *22* (1907) 180; *22* (1907) 800; *33* (1910) 1275
22. L.D. LANDAU, E.M. LIFSIC: *Elméleti Fizika, V. köt.: Statisztikus Fizika I.* – Tankönyvkiadó, Budapest, 1981.
23. A. EINSTEIN – Ann. Physik *17* (1905) 549; Z. Electrochem. *14* (1908) 235
24. T.L. HILL: *Statistical Mechanics* – McGraw-Hill, New York, 1956.
25. M.J. KLEIN – Physica *26* (1960) 1073
26. Boltzmann módszerét követi (és általános statisztikának nevezi) még A. SOMMERFELD is 1952-ben megjelent tankönyvében (*Vorlesungen über Theoretische Physik Bd. V: Thermodynamik und Statistik* – Akad. Verl. Ges., Leipzig); a hazai szakirodalomban KÁROLYHÁZY F., MARX GY. NAGY E.: *Statisztikus Mechanika* – Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1965.
27. L. SZILÁRD – Z. Physik *32* (1925) 753; *53* (1929) 840
28. W. LANUETTE: *Genius in the Shadows: A biography of Leo Szilard* – Ch. Schriber's Sons, New York, 1992
29. NEUMANN J.: *A kvantummechanika alapjai* – Akadémiai Kiadó, Budapest 1980.

MEKKORÁK AZ ÜSTÖKÖSMAGOK?

Tóth Imre
MTA Konkoly Thege Miklós Csillagászati Kutatóintézete, Budapest

Az üstökösök, kisbolygók, meteoroidok[1] a Naprendszer kisebb égitestjei. Közöttük az úgynevezett primitív kisebb égitestek, az üstökösök, kentaurok,[2] transzneptun objektumok[3] és bizonyos típusú kisbolygók, különösen fontosak a Naprendszer kialakulási körülményeinek megismerésében. Ezek az egyszerű felépítésű, őseredeti (primordiális) kis égitestek a bolygórendszerünk kialakulásakori maradékanyagok, amelyek belsejükben nagyrészt még szinte érintetlenül megőrizték a képződésükkor az ősi Naprendszerben végbement fizikai és kémiai folyamatok lenyomatát. Felszínük a kialakulásuk óta a szoláris és galaktikus sugárzások hatására átalakulhatott, valamint más kisebb égitestekkel (pl. meteoroidokkal, meteorokkal) való ütközések nyomait is őrzik. Jóllehet, a felszínük és ahhoz közeli rétegük a kialakulásuk óta eltelt igen

[1] A meteoritikus anyag és a kisbolygó- (aszteroid-) méret közötti 10^0–10^2 méteres kis égitestek.

[2] A Nap körül 5,2–30 CsE fél nagytengelyű ellipszispályán, a Jupiter és Neptunusz pályái között keringő kis égitestek. 1 CsE (Csillagászati Egység) a földpálya fél nagytengelye ($\approx 1{,}496 \cdot 10^8$ km).

[3] A Neptunuszon túli aszteroidöv objektumai: Kuiper-öv, illetve a Szórt Korong Objektumok (SDO-k) is.