Haladó fizika kémikusoknak

Mátyus Edit

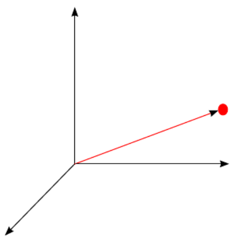
(Budapest, 2023. március 10.)

Célkitűzés: az atomok és molekulák elméletéhez szükséges háttérismeretek elsajátítása:

- bevezetés a mechanika Lagrange- és Hamilton-formalizmusához
- bevezető elektrodinamika

Ajánlott irodalom:

1. alábbi jegyzet & L. D Landau, E. M. Lisfic, Elméleti Fizika I.
2. Jakovác Antal, Takács Gábor, Orosz László: Elektrodinamika jegyzet (2013).



1. Bevezetés a mechanika Lagrange- és Hamilton-formalizmusába

Megjegyzés: A mechanika tárgya az anyagi testek mozgástörvényeinek vizsgálata. A mozgást mint a hely időbeli megváltozását írjuk le. A mozgás erők hatására történik, amelyeket ismertnek gondolunk.

1.1. Pontmechanika és newtoni mozgásegyenlet

A folytonos közegek mechanikájával ellentétben a pontmechanikában pontszerű objektumokkal vagy ilyen pontszerű objektumok halmazával foglalkozunk.

Egy tömegpont teljes leírásához szükséges ismerni

- a tömegét, m (valós szám), és
- a helyét, $\vec{r}(t) = (x(t), y(t), z(t))$ adott t időpillanatban, amelyet három valós értékkel határozunk meg egy adott koordinátarendszerben

Egy tömegpont mozgását tehát az $I \in \mathbb{R} \to \mathbb{R}^3$ leképezések adják meg. Ennek ismeretében definiálhatjuk a sebességet és a gyorsulást.

Definíció
A sebességet megadja:

$$\dot{\vec{r}}(t) = \frac{\mathrm{d}\vec{r}}{\mathrm{d}t} , \tag{1}$$

a gyorsulás definíciója pedig:

$$\ddot{\vec{r}}(t) = \frac{\mathrm{d}^2\vec{r}}{\mathrm{d}t^2} = \frac{\mathrm{d}\dot{\vec{r}}}{\mathrm{d}t} . \tag{2}$$

Vegyük észre, hogy az idő egy szabad paraméter a leírásban. Az idő 'múlása' egy 'önálló folyamat'. Az $\vec{r}(t)$ ugyanakkor egy dinamikai változó, ami azt jelenti, hogy az időbeli változását a mozgásegyenletek adják meg:

$$m\ddot{\vec{r}}(t) = \vec{F}(\vec{r}(t), \dot{\vec{r}}(t), \dots, t) , \tag{3}$$

amit Newton 2. törvényeként ismerünk. A newtoni mechanikában az a feladatunk, hogy megoldjuk a 3. egyenletet egy ismert $\vec{F}$ erő és adott, $\vec{r}(t_0), \dot{\vec{r}}(t_0)$, határfeltételek mellett.

1.2. Potenciális és kinetikus energia

Centrális erők esetén az erő a következő egyszerű alakba írható:

$$\vec{F}(\vec{r}) = -\vec{\nabla}V(\vec{r}) = -\mathrm{grad}V = -\begin{pmatrix} \frac{\partial V}{\partial x} \\ \frac{\partial V}{\partial y} \\ \frac{\partial V}{\partial z} \end{pmatrix} , \tag{4}$$

ahol V a potenciális energia. Írjuk be a centrális erő kifejezését a mozgásegyenletbe (3. egyenlet):

$$m\ddot{\vec{r}} = -\vec{\nabla}_r V(\vec{r}) \tag{5}$$

szorozzuk balról $\dot{\vec{r}}$-tal:

$$m\dot{\vec{r}} \cdot \ddot{\vec{r}} = -\dot{\vec{r}} \cdot \vec{\nabla}_r V(\vec{r}) \ . \tag{6}$$

Ezek után vegyük észre, hogy

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(m\dot{\vec{r}}^2) = 2m\dot{\vec{r}} \cdot \ddot{\vec{r}} \tag{7}$$

valamint a láncszabály segítségével írhatjuk, hogy

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}V = \sum_{a=1}^{3} \frac{\partial V}{\partial r_a} \frac{\mathrm{d}r_a}{\mathrm{d}t} = \vec{\nabla}_r V \cdot \frac{\mathrm{d}\vec{r}}{\mathrm{d}t} \tag{8}$$

Ezek felhasználásával a 6. egyenlet a következő alakba írható:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\frac{1}{2}m\dot{\vec{r}}^2(t) + V(\vec{r}(t))\right] = 0 \ , \tag{9}$$

azaz egy időben állandó mennyiséget kapunk, amiről felismerhetjük, hogy éppen a rendszer teljes energia, a potenciális energia, $V(\vec{r}(t))$, és a kinetikus energia

$$T(t) = \frac{1}{2}m\dot{\vec{r}}^2(t) \tag{10}$$

összege.

2. Legkisebb hatás elve

Mechanikai rendszerek mozgását leíró törvények legáltalánosabb megfogalmazását a legkisebb hatás elve vagy Hamilton-elve (Hamilton's principle) néven ismert. Ekkor minden mechanikai rendszert egy

$$L(r_1, r_2, \ldots, r_s, \dot{r}_1, \dot{r}_2, \ldots, \dot{r}_s, t) = L(r, \dot{r}, t) \tag{11}$$

függvény jellemez, és a rendszer mozgását egy bizonyos feltétel fogja előírni.

2.1. Lagrange-féle mozgásegyenletek

Ez a bizonyos feltétel a következő. A mozgásra legyenek érvényesek bizonyos $r(t_1) = r^{(1)}$ és $r(t_2) = r^{(2)}$ határfeltételek. Ekkor a rendszer mozgása olyan, amely mellett a következő integrál minimális:

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(r, \dot{r}, t)\mathrm{d}t \ . \tag{12}$$

S-et hatásnak nevezzük (innen az elv neve), és L a rendszer Lagrange-függvénye. Az S egy ún. funckionál, és a 12. egyenlet általános megoldásához a funkcionálszámításra lesz szükségünk (a művleti szabályok nagyon hasonlóak függvények deriválásához).

Az egyszerűség kedvéért legyen a rendszerünknek egyetlen szabadsági foka, és legyen $r = r(t)$, amelyre S minimális. Ez azt jelenti, hogy ha a képletben r-t $r(t) + \delta r(t)$-vel helyettesítjük, ahol $\delta r(t)$ egy kis ún. variáció, akkor az S értéke nőni fog. Mivel a határfeltételek adottak, ezért a határokat nem variáljuk, $\delta r(t_1) = \delta r(t_2) = 0$. Írjuk be a kis variációt S képletébe, $r \to r + \delta r$, ekkor kapunk egy módosított $\tilde{S}$-t:

$$\tilde{S} = \int_{t_1}^{t_2} L(r + \delta r, \dot{r} + \delta \dot{r}, t)\mathrm{d}t \ . \tag{13}$$

Ezt fejtsük ki első rendig (egészen pici a variáció):

$$\tilde{S} = \int_{t_1}^{t_2} \left\{ L(r, \dot{r}, t) + \frac{\partial L}{\partial r}\delta r + \frac{\partial L}{\partial \dot{r}}\delta \dot{r} \right\} \mathrm{d}t \ , \tag{14}$$

ami alapján felírhatjuk S variációját kis δr és $\delta \dot{r}$ megváltozás hatására az $\tilde{S} - S$ különbség segítségével:

$$\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} L(r, \dot{r}, t)\mathrm{d}t = \int_{t_1}^{t_2} \left\{ \frac{\partial L}{\partial r}\delta r + \frac{\partial L}{\partial \dot{r}}\delta \dot{r} \right\} \mathrm{d}t = 0 \ , \tag{15}$$

ami nulla, ugyanis a fizikai megoldás a hatás szélsőértéke (minimuma). Használjuk ki, hogy $\delta \dot{r} = \frac{\mathrm{d}\delta r}{\mathrm{d}t}$ és integráljunk parciálisan:

$$\begin{aligned} \delta S &= \int_{t_1}^{t_2} \left\{ \frac{\partial L}{\partial r}\delta r + \frac{\partial L}{\partial \dot{r}}\delta \dot{r} \right\} \mathrm{d}t \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \left\{ \frac{\partial L}{\partial r}\delta r + \frac{\partial L}{\partial \dot{r}}\frac{\mathrm{d}\delta r}{\mathrm{d}t} \right\} \mathrm{d}t \\ &= \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{r}}\delta r \right]_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} \left\{ \frac{\partial L}{\partial r} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{r}} \right\} \delta r \mathrm{d}t = 0 \quad \forall \delta r \ . \end{aligned} \tag{16}$$

Az első tag nulla, mert a határfeltételeket nem variáljuk. Az integrál második tagja pedig akkor lesz nulla bármilyen tetszőlegesen pici, δq variációra nézve, ha az integrandus nulla:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{r}}\right) - \frac{\partial L}{\partial r} = 0 \ . \tag{17}$$

A gondolatmenet egyszerűen kiterjeszthető több (s) szabadsági fokra, és ekkor hasonló feltételt kapunk (minden egyes szabadsági fokra):

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{r}_i}\right) - \frac{\partial L}{\partial r_i} = 0 \ , i = 1, 2, \ldots, s \ . \tag{18}$$

Ezt a differenciálegyenlet-rendszert nevezzük Euler–Lagrange-egyenleteknek, amelyek a rendszer mozgásegyenletei (ebben a formalizmusban), és kapcsolatot teremtenek a koordináták, sebességek, és gyorsulások között. s darab másodrendű differenciálegyenlet általános megoldása $2s$ darab konstanst tartalmaz, amelyek éppen a mechanikai rendszer kezdeti feltételeinek feleltethetőek meg (pl. a koordináták és a sebességek kezdeti értékei).

2.2. A Langrange-függvény tulajdonságai

2.2.1. Additivitás

Képzeljünk el egy mechanikai rendszert, amely két független, A és B, részből áll és mindkét résznek ismert az L_A és L_B Lagrange-függvénye. Ha a részrendszerek nem hatnak kölcsön (pl. mert olyan távol vannak egymástól, hogy a kölcsönhatás elhanyagolható), akkor a teljes rendszer Lagrange-függvénye a részrendszerek Lagrange-függvényeinek az összege, $L = L_A + L_B$. Ez az additivitás azt is jelenti, hogy az A részrendszer mozgásegyenletei nem függhetnek a B részrendszer mozgásegyenleteitől (és fordítva).

2.2.2. Egyértelműség

Ha van két Lagrange-függvény, $L(r, \dot{r}, t)$ és $L'(r, \dot{r}, t)$, amelyek csak egy $f(r, t)$ függvény teljes időderiváltjában különböznek,

$$L'(r, \dot{r}, t) = L(r, \dot{r}, t) + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} f(r, t) \ , \tag{19}$$

akkor a két Lagrange-függvényhez tartozó hatás

$$S' = \int_{t_1}^{t_2} L'(r, \dot{r}, t)\mathrm{d}t = \int_{t_1}^{t_2} L(r, \dot{r}, t)\mathrm{d}t + \int_{t_1}^{t_2} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} f(r, t)\mathrm{d}t = S + f(r^{(2)}, t_2) - f(r^{(1)}, t_1) \ . \tag{20}$$

csupán konstans tagokban különböznek, amelyek az hatás variációjánál eltűnnek (a határokat nem variáljuk). Ez azt jelenti, hogy $\delta S = 0$ és $\delta S' = 0$ teljesen azonosak, és a mozgásegyenletek alakja is változatlan. Ez azt jelenti, hogy a Lagrange-függvény egyértelmű egy $f(r, t)$ függvény teljes időderiváltja „erejéig”.

3. Lagrange-i mechanika

3.1. Galilei-féle relativitási elv

Ahhoz, hogy fel tudjuk írni a mozgásegyenleteket egy adott problémára, először választanunk kell egy vonatkoztatási rendszert. Ilyenkor az a cél, hogy egy olyan vonatkoztatási rendszert válasszunk, amelyben a mozgásegyenletek a lehető legegyszerűbb alakúak.

Ha egy fura fizikai valóságban léteznénk, akkor akár a tér és az idő inhomogén és anizotróp lehetne (ami nagy problémákhoz vezetne...)

Szerencsére megmutatható, hogy mindig tudunk olyan koordinátarendszert találni, amelyben a tér homogén és izotróp, az idő pedig homogén. Az ilyen rendszert nevezzük inerciarendszernek. Egy ilyen rendszerben egy szabad test, amely valamely időpillanatban nyugalomban van, az a más időpillanatokban is nyugalomban lesz.

Ezen homogenitás alapján eljuthatunk az L Lagrange-függvény bizonyos tulajdonságaihoz. Az idő és a tér homogenitásából az következik ugyanis, hogy L nem függhet explicit módon a részecske $\vec{r}$ helyvektorától, illetve a t időtől. A tér izotrópiája pedig azt jelenti, hogy L nem függhet $\vec{v}$ irányától sem, legfeljebb a $\vec{v}^2$ függvénye lehet. Mivel az L Lagrange-függvény független $\vec{r}$-től, ezért $\frac{\partial L}{\partial r_a} = 0$, és ezért a mozgásegyenlet így egyszerűsödik:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}}\right) - \frac{\partial L}{\partial \vec{r}} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}}\right) = 0\ , \tag{21}$$

amiből következik, hogy $\frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}}$ =állandó, és mivel ez csak a sebesség függvénye, ebből következik, hogy

$$\vec{v} = \text{állandó}\ . \tag{22}$$

Ez azt jelenti, hogy egy inerciarendszerben bármely szabad mozgást állandó irányú és nagyságú sebesség jellemez. Vegyük észre, hogy ezt a newton-i mechanikában mint első törvény szokás posztulálni. A gondolatmenetből az is látható továbbá, hogy ha van egy másik vonatkoztatási rendszerünk, amely állandó sebességű, egyenes vonalú mozgást végez az inerciarendszerünkhöz képest, akkor a szabad mozgás egyenletei abban is azonosak lesznek, és ez is egy inerciarendszer.

Megjegyzés A kísérletek azt mutatják, hogy nemcsak, hogy a mozgástörvények azonosak a két rendszerben, hanem a két vonatkoztatási rendszer mechanikai szempontból teljesen ekvivalens egymással. És nemcsak még egy, hanem még végtelen sok inerciarendszert találhatunk, amelyek egymáshoz képest egyenes vonalú, egyenletes mozgást végeznek. Az összes ilyen rendszerben megegyeznek a tér és az idő tulajdonságai, és ezáltal a mechanika törvényei is. Ez a Galilei-féle relativitási elv.

3.2. Egy szabad részecske Lagrange-függvénye

A következő logikus lépés egy adott rendszer Lagrange-függvényének a felírása. Kezdjük a legegyszerűbb példával, egy szabad részecske mozgása egy inerciarendszerhez képest. Ahogy az előbb láttuk, ebben az esetben a Lagrange-függvény csak a sebességtől függhet. Ahhoz, hogy meghatározzuk, hogy hogyan függ a sebességtől a Galilei-féle relativitási elvet fogjuk használni.

Ha két koordinátarendszer, K és K' $\vec{\epsilon}$ infinitezimálisan kis sebességkülönbséggel halad egymáshoz képest, akkor $\vec{v}' = \vec{v} + \vec{\epsilon}$. Mivel a mozgásegyenletek alakja azonos kell legyen minden inerciarendszerben, ezért az $L(v^2)$ és $L'(v^2)$ Lagrange-függvények legfeljebb egy koordinátáktól és időktől függő függvény teljes időderiváltjában különbözhetnek.

$$L' = L(\vec{v}'^2) = L(\vec{v}^2 + 2\vec{v}\cdot\vec{\epsilon} + \vec{\epsilon}^2) \approx L(\vec{v}^2) + \frac{\partial L}{\partial v^2} 2\vec{v}\cdot\vec{\epsilon}\,, \tag{23}$$

ahol a $\frac{\partial L}{\partial v^2} 2\vec{v}\cdot\vec{\epsilon}$ tag csak akkor lehet egy teljes időderiváltja egy $f(r,t)$ függvénynek, ha a $\vec{v}$-nek lineáris függvénye. Azaz, $\frac{\partial L}{\partial (v^2)}$ független kell legyen a sebességtől, tehát

$$L = \frac{1}{2} m v^2\ . \tag{24}$$

A részecske m tömege jelenik meg a Lagrange-függvényben. A Lagrange-függvény additív tulajdonsága alapján, egy (nem-kölcsönható) részecskehalmaz együttes Lagrange-függvénye:

$$L = \sum_i \frac{1}{2} m_i v_i^2\ . \tag{25}$$

Megjegyzés: A tömeg bevezetése a 24. egyenletben az additív tulajdonság alakalmazásával együtt nyer értelmet, ugyanis a Lagrange-függvényt mindig megszorozhatjuk egy tetszőleges konstanssal, ettől a mozgásegyenletek még nem változnak (ez csak a tömegegység megváltoztatását jelenti). A tömegek arányát azonban egy ilyen szorzás nem befolyásolja, és valóban a tömegarány az a mennyiség, amely valódi fizikai tartalommal bír.

3.3. Többrészecske-rendszerek Lagrange-függvénye

Egyetlen szabad részecske Lagrange-függvénye helyett tekintsük részecskék egy halmazát, amelyek kölcsönhatnak egymással. Ennek a rendszernek a Lagrange-függvényét úgy szerkesztjük meg, hogy vesszük a nem-kölcsönható rendszer Lagrange-függvényét (25. egyenlet), és hozzáadjuk (levonjuk) a koordináták egy függvényét (amelynek alakját a kölcsönhatás határozza meg):

$$L = \sum_i \frac{1}{2} m_i v_i^2 - U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots) \tag{26}$$

Ezt a választást ellenőrizzük a mozgásegyenletek felírásával:

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \vec{v}_i} &= \frac{\partial L}{\partial \vec{r}_i} \\ m_i \frac{\mathrm{d}\vec{v}_i}{\mathrm{d}t} &= -\frac{\partial U}{\partial \vec{r}_i}\ , \end{aligned} \tag{27}$$

amely éppen a második Newton-törvényében posztulált mozgásegyenlet. Az $\vec{F}_i = -\frac{\partial U}{\partial \vec{r}_i} = -\vec{\nabla}_{r_i} U$ vektort neveztük erőnek. Az U-hoz hasonlóan ez is a részecskék koordinátáitól függ (de a sebességtől nem). Érdemes továbbá megjegyezni, hogy az U potenciális energia csak egy additív konstans erejéig meghatározható, amely nincsen hatással (kiesik) a mozgásegyenletekre.

Vegyük észre továbbá, hogy teljesül az idő homogenitása és izotrópiája (t-t kicserélhetjük $-t$-re a Lagrange-féle mozgásegyenletek változatlanok maradnak).

3.4. Általánosított koordináták és külső terek

Az inerciarendszerünkön belül a koordináták megválasztása teljesen tetszőleges. Ennek értelmében bevezethetünk egészen általános koordinátatranszformációkat:

$$x_i = f_i(r_1, r_2, \ldots, r_s) \quad \text{és} \quad \dot{x}_i = \sum_k \frac{\partial f_i}{\partial r_k}\dot{r}_k \ , \tag{28}$$

amely a következő Lagrange-függvényt eredményezi (ld. láncszabály):

$$L = \frac{1}{2}\sum_{k,l} a_{kl}(r)\dot{x}_k\dot{x}r_l - U(r) \ . \tag{29}$$

Ebben az esetben a kinetikus energia továbbra is kvadratikus függvénye a(z általánosított) sebességeknek, de függhet a koordináták értékétől is.

Ha a rendszer mozgása egy külső térben történik, akkor a Lagrange-függvény ugyanolyan alakú, mint az előbb, de megjelenik az abszolút időfüggés a potenciális energiában, pl. $L = \frac{1}{2}m\dot{v}^2 - U(\vec{r}, t)$.
Megjegyzés: Előfordul, hogy bizonyos geometriai megszorításokat kell bevezetni a mechanikai leírásba (pl. egy rúd hossza rögzített, stb.). Ezeket a megszorításokat nehéz figyelembe venni egy differenciálegyenlet megoldása során. A megszorításokat (constraints) sokkal inkább célszerű a Lagrange-függvény szintjén figyelembe venni, és ebből (a megszorításokkal együtt) levezetni a mozgásegyenleteket.

4. Szimmetriák

A mozgásegyenletek felírásánál említettük, hogy egy $2s$ szabadsági fokkal rendelkező differenciálegyenlet-rendszert kaptunk. Egy zárt mechanikai rendszernek azonban csak $2s-1$ darab szabadsági foka van, mivel az idő egy additív konstanssal nyugodtan eltolható, semmi sem függ tőle. Ekkor létezik olyan függvénye a $2s-1$ változónak, amely a mozgás során állandó marad és csak a kezdeti/határfeltételektől függ. Az ilyen függvényeket mozgásállandóknak nevezzük.

4.1. Idő homogenitása

Ezen homogenitás miatt, egy zárt rendszer Lagrange-függvénye nem függ expliciten az időtől ($\partial L/\partial t = 0$). A Lagrange-függvény teljes időderiváltjára ekkor írhatjuk, hogy

$$\frac{\mathrm{d}L}{\mathrm{d}t} = \sum_i \frac{\partial L}{\partial r_i}\dot{r}_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{r}_i}\ddot{r}_i \tag{30}$$

Használjuk a Lagrange-egyenletet:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{r}_i} = \frac{\partial L}{\partial r_i} \ . \tag{31}$$

Ekkor a teljes időderiváltra adódik, hogy

$$\frac{\mathrm{d}L}{\mathrm{d}t} = \sum_i \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{r}_i}\dot{r}_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{r}_i}\ddot{r}_i = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{r}_i}\dot{r}_i\right) \tag{32}$$

azaz,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(L - \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{r}_i}\dot{r}_i\right) = 0 \ . \tag{33}$$

Azt találjuk tehát, hogy az idő homogenitásából következik, hogy a $-E := L - \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{r}_i}\dot{r}_i$ mennyiség megmarad, ami valójában az energia. Zárt rendszerben $L = T - U$. Mivel L $\dot{r}_i$-nek másodfokú homogén függvénye (ld. homogén függvényekre vonatkozó Euler-tételt), ezért $\sum_i r_i \frac{\partial L}{\partial \dot{r}_i} = 2T$, és ebből azt kapjuk, hogy $E = 2T - L = T + U$.

4.2. A tér homogenitása

Egy következő megmaradási törvény a tér homogenitásából következik. A tér homogenitása miatt egy zárt rendszer mechanikai tulajdonságai változatlanok maradnak a teljes rendszer térbeli eltolásaira nézve (pl. egy inga ugyanúgy fog lengeni itt, mint 2 méterrel odébb). Ez azt jelenti, hogy ha az összes részecske helyéhez hozzáadunk egy kis $\vec{\epsilon}$ vektort, akkor a rendszerünk Lagrange-függvénye (egy teljes időderivált erejéig) változatlan kell maradjon, azaz: $r_i \to r'{}_i = r_i + \epsilon$ mellett

$$\delta L = \sum_i \frac{\partial L}{\partial r_i} \cdot \epsilon = \epsilon \cdot \sum_i \frac{\partial L}{\partial r_i} \ . \tag{34}$$

A tetszőleges transzláció melletti előírt invariancia miatt elvárjuk, hogy

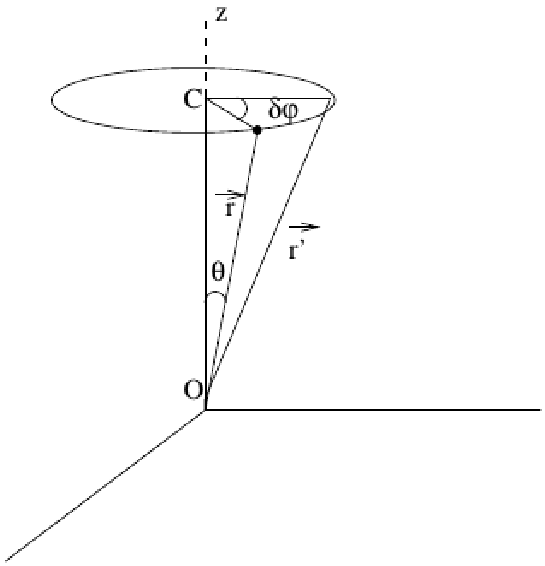
$$0 = \sum_i \frac{\partial L}{\partial r_i} = \sum_i \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{r}_i} \ , \tag{35}$$

ahol a második egyenlőségben kihasználtuk az Euler–Lagrange egyenleteket. Egy zárt rendszer esetén V csak a részecske koordinátáktól függ, ezért adódik, hogy

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\sum_i m_i \dot{r}_i\right) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\sum_i p_i\right) = 0, \tag{36}$$

azaz a teljes rendszer impulzusa állandó. A tér homogenitásából következik az impulzusmegmaradás tétele.

4.3. Tér izotrópiája



Ebben a részben azt fogjuk látni, hogy ha L független az orientációtól, akkor a rendszer impulzusmomentuma megmarad. Képzeljük el, hogy a rendszert elforgatjuk $\delta\phi$ szöggel a koordinátarendszerünk z tengelye körül. Ekkor az új és az eredeti tömegpont helyvektorának a különbsége $\vec{AA'} = r \sin\theta \delta\phi = \delta\vec{\phi} \times \vec{r}$, ahol bevezettük a $\delta\vec{\phi}$ vektort, amelynek nagysága $\delta\phi$, iránya pedig megegyzeik a forgástengely irányával (és pozitív z irányba mutat).

Ekkor tehát a forgatás hatására a következőképpen módosulnak a hely és sebességvektorok

$$\vec{r} \to \vec{r} + \delta\vec{r} = \vec{r} + \delta\vec{\phi} \times \vec{r}\,, \quad \text{és} \tag{37}$$

$$\dot{\vec{r}} \to \dot{\vec{r}} + \delta\dot{\vec{r}} = \dot{\vec{r}} + \delta\vec{\phi} \times \dot{\vec{r}} \tag{38}$$

Elvárjuk, hogy a Lagrange-függvény invariáns maradjon ezekre a változásokra nézve:

$$\begin{aligned}
0 = \delta L &= \sum_i \frac{\partial L}{\partial \vec{r}_i} \cdot \delta\vec{r}_i + \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}_i} \cdot \delta\dot{\vec{r}}_i \\
&= \sum_i \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}_i}\right) \cdot \delta\vec{r}_i + \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}_i} \cdot \delta\dot{\vec{r}}_i \\
&= -\sum_i \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}_i}\right) \cdot (\vec{r}_i \times \delta\vec{\phi}) - \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}_i} \cdot (\dot{\vec{r}}_i \times \delta\vec{\phi})\,.
\end{aligned} \tag{39}$$

Használjuk fel a kanonikus impulzus definícióját

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}_i} = \vec{p}_i\,. \tag{40}$$

és ezt írjuk be a 39. egyenletbe:

$$\delta L = -\sum_i \left[\dot{\vec{p}}_i \cdot (\vec{r}_i \times \delta\vec{\phi}) + \vec{p}_i \cdot (\dot{\vec{r}}_i \times \delta\vec{\phi})\right]\,. \tag{41}$$

Vezessük be továbbá a következő jelölést, $\delta\vec{\phi} = \vec{n}\delta\phi$ (ahol $\vec{n}$ a forgástengely által kijelölt egységvektor), és használjuk fel a skalár- és vektoriális szorzat tulajdonságát, $\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c}) = (\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{c}$

$(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c} \in \mathbb{R}^3)$,

$$\delta L = \delta\phi \vec{n} \cdot \sum_i \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\vec{r}_i \times \vec{p}_i) \ . \quad (42)$$

A $\delta L = 0$ előírás miatt adódik, hogy

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \sum_i (\vec{r}_i \times \vec{p}_i) = 0 \ . \quad (43)$$

Látjuk tehát, hogy a tér izotrópiájából következik az impulzusmomentum, $\vec{J} = \sum_i \vec{r}_i \times \vec{p}_i$ megmaradása.

4.4. Invariancia a Galilei-transzformáció hatására

Tekintsünk két inerciarendszert. Bár a kinematikai mennyiségek értéke a különböző rendszerekben mérve különböző lehet, a mozgásegyenletek a két rendszerben azonosak kell legyenek. A két rendszert a Galilei-transzformáció kapcsolja össze:

$$\vec{r}_i' = \vec{r}_i - \vec{u}_0 t \ , \quad (44)$$

ahol u_0 az inerciarendszerek relatív sebessége (állandó), és a két inerciarendszer a kezdeti időpillanatban egybeesett. Egy ilyen transzformáció hatására mi történik a Lagrange-függvénnyel? Ha a potenciális energia csak a relatív koordintáktól függ:

$$\vec{r}_2' - \vec{r}_1' = \vec{r}_2 - \vec{r}_1 \ , \quad (45)$$

akkor az nem változik, és írhatjuk, hogy

$$\begin{aligned}
L' &= \frac{1}{2} m v'^2 - V \\
&= \frac{1}{2} m (\vec{v} - \vec{u}_0)^2 - V \\
&= \frac{1}{2} m v^2 - V - m\vec{v} \cdot \vec{u}_0 + \frac{1}{2} m u_0^2 \\
&= L + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left[\frac{1}{2} m u_0^2 t - m \vec{u}_0 \cdot \vec{r} \right] \\
&= L + \frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} \ . \quad (46)
\end{aligned}$$

Tehát Galilei-transzformáció hatására a Lagrange-függvény csupán egy függvény (F) teljes idNew deriváltjával változott. Korábban láttuk, hogy a Lagrange-függvény ilyen megváltozása mellett a mozgásegyenletek azonosak maradnak, azaz valóban, a Galilei-transzformáció változatlanul hagyja a mozgásegyenleteket, azonos mozgásegyenletek érvényesek a különöző inerciarendszerekben. A Lagrange függvény ilyen transzformációját mértéktranszformációnak nevezzük (olyan transzformáció, amely a formalizmusból adódó 'belső' szabadsági fokokkal kapcsolatos, és amelyek a mozgásegyenleteket nem változatlanul hagyják).

Házi feladat: Az Euler–Lagrange-egyenletekbe való behelyettesítéssel ellenőrizzük, hogy L és L' valóban azonos mozgásegyenletekre vezet.

4.5. Szimmetriák és megmaradási törvények

Minden (egy-paraméteres szimmetriatranszformációhoz tartozó) invariancia egy megmaradási törvényre vezet. Ez Noether-tétele. A kutatási gyakorlatban új Lagrange-függvényeket javasolnak, vezetnek le/be. Egy fontos ellenőrzése ezeknek a Lagrange-függvényeknek, hogy rendelkeznek-e a remélt invariancia-tulajdonságokkal, tartozik-e hozzájuk az elvárt megmaradó mennyiség.

4.6. Noether-tétel

Amikor a fizikai rendszer egy valamilyen folytonos szimmetriával rendelkezik, akkor ehhez mindig tartozik egy valamilyen megmaradó mennyiség. (Az állítás megfordítása nem feltétlenül igaz.)

Legyen s a folytonos szimmetriaművelethez tartozó paraméter (pl. forgatás szöge), és legyen $q(s,t)$ a szimmetrialeképezés, ami az L-t invariánsan hagyja (de közvetlenül nem függ a leképezéstől, $\partial L/\partial s = 0$):

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} L[q(s,t), \dot{q}(s,t)] = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} L[r(t), \dot{r}(t)] \tag{47}$$

Ekkor

$$\frac{\mathrm{d}L}{\mathrm{d}s} = \frac{\partial L}{\partial q}\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}s} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\frac{\mathrm{d}\dot{q}}{\mathrm{d}s} = 0 \; . \tag{48}$$

Írjuk át az egyenlet első tagját az EL-egyenlet segítségével:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right)\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}s} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\frac{\mathrm{d}\dot{q}}{\mathrm{d}s} = 0 \; , \tag{49}$$

amiből kapjuk (szorzat deriváltja), hogy

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}s}\right] = 0 \; . \tag{50}$$

A q koordinátához tartozó kanonikus momentum $p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}$, ezért adódik, hogy

$$\Lambda = p\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}s}|_{s=0} = \text{állandó} \tag{51}$$

Ha a Lagrange-függvény n darab folytonos szimmetriával rendelkezik, akkor n darab megmaradó mennyiséget kapunk. Ha a Lagrange-függvény valamilyen általánosított koordináták és sebességek függvénye, akkor a megmaradó ún. „Noether-töltések”:

$$\Lambda_j(\{q_k\}, \{\dot{q}_k\}, t) = \sum_k p_k \frac{\mathrm{d}q_k}{\mathrm{d}s}|_{s_j=0}, \quad j = 1, 2, \ldots, n \; . \tag{52}$$

5. Hamiltoni mechanika

A klasszikus mechanika Lagrange-formalizmusában a mechanikai rendszert az $r(t)$ koordinátákkal és az $\dot{r}(t)$ sebességekkel írjuk le. Nem ez az egyetlen lehetséges leírás. Van, amikor előnyösebb más mennyiségekkel dolgozni, pl. általánosított koordinátákkal és impulzusokkal.

5.1. Hamilton-egyenletek

Az áttérést egy változóhalmazról (pl. koordináták és sebességek) egy másikra (pl. koordináták és impulzusok) a Legendre-transzformáció segítségével tehetjük meg. Írjuk át a Lagrange-függvényt egy olyan alakba, amely általánosított koordinátákkal és impulzusokkal van felírva. A Lagrange-függvény teljes deriváltja

$$\mathrm{d}L = \sum_i \frac{\partial L}{\partial r_i}\mathrm{d}r_i + \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{r}_i}\mathrm{d}\dot{r}_i = \sum_i \dot{p}_i \mathrm{d}r_i + \sum_i p_i \mathrm{d}\dot{r}_i \ , \tag{53}$$

ahol $p_i := \partial L/\partial \dot{r}_i$ az általánosított momentum definíciója, és a Lagrange-egyenlettel együtt

$$\frac{\partial L}{\partial r_i} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{r}_i} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}p_i = \dot{p}_i \tag{54}$$

felhasználásával kaptuk az 53. egyenletet. Alakítsuk tovább az egyenletet a $\sum_i p_i \mathrm{d}\dot{r}_i = \sum_i \mathrm{d}(p_i\dot{r}_i) - \sum_i \dot{r}_i \mathrm{d}p_i$ azonosság felhasználásával:

$$\mathrm{d}L = \sum_i \dot{p}_i \mathrm{d}r_i + \sum_i \mathrm{d}(p_i\dot{r}_i) - \sum_i \dot{r}_i \mathrm{d}p_i \ . \tag{55}$$

Átrendezve ezt a kifejezést kapjuk, hogy

$$\mathrm{d}(\sum_i p_i\dot{r}_i - L) = -\sum_i \dot{p}_i \mathrm{d}r_i + \sum_i \dot{r}_i \mathrm{d}p_i \ , \tag{56}$$

ahol a teljes differenciál a bal oldalon–már korábban láttuk–a rendszer energiája, de most kizárólag koordinátákkal és impulzusokkal kifejezve (ld. jobb oldal). Az energia függvényt ebben az alakjában (koordináták és momentumok) Hamilton-függvénynek nevezzük:

$$H(p,r,t) = \sum_i p_i\dot{r}_i - L \ . \tag{57}$$

Írjuk fel egy zárt rendszer ($\partial H/\partial t = 0$) Hamilton-függvényének a teljes differenciálját, és a tagokat hasonlítsuk össze az 56. egyenlet jobb oldalával:

$$\mathrm{d}H = \sum_i \frac{\partial H}{\partial r_i}\mathrm{d}r_i + \sum_i \frac{\partial H}{\partial p_i}\mathrm{d}p_i = -\sum_i \dot{p}_i \mathrm{d}r_i + \sum_i \dot{r}_i \mathrm{d}p_i \ , \tag{58}$$

ami alapján adódnak a Hamilton-formalizmus mozgásegyenletei

$$\dot{r}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \text{és} \quad -\dot{p}_i = \frac{\partial H}{\partial r_i} \ . \tag{59}$$

A Hamilton-formalizmusban a mozgásegyenletek 2s darab elsőrendű differenciálegyenlet-rendszert alkotnak, és a 2s darab ismeretlen függvény a $p_i(t)$ és a $q_i(t)$. Az egyszerűségük és a szimmetriájuk miatt szokás ezeket az egyenleteket „kanonikus-egyenleteknek” is nevezni.

5.2. Egyértelműség

A Hamilton-operátor teljes idővderiváltja

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial H}{\partial r_i}\dot{r}_i + \sum_i \frac{\partial H}{\partial p_i}\dot{p}_i \ , \tag{60}$$

amely a mozgásegyenletek miatt (59. egyenlet) egyszerűsödik:

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H}{\partial t} \ , \tag{61}$$

ami azt jelenti, hogy ha a Hamilton-függvény nem függ explicit az időtől, akkor $\mathrm{d}H/\mathrm{d}t = 0$, az energia megmarad.

Megjegyzés: A kapcsolatot a Lagrange- és a Hamilton-formalizmus között a Legendre-transzformáció teremti meg. Bizonyos problémákhoz könnyebb felírni az L-t, másokhoz a H-t. Az első esetben s darab másodrendű csatolt differenciál-egyenletet kell megoldani, a másodikban $2s$ darab elsőrendűt.

5.3. Paraméterfüggés

Az r és $\dot{r}$, illetve az r és p dinamikai változókon kívül a Lagrange- és Hamilton-függvény különféle paramétereket is tartalmaz – olyan mennyiségeket, amelyek magának a mechanikai rendszernek, vagy a rá ható külső térnek a tulajdonságait jellemzik. Legyen ilyen a λ paraméter. A változó λ mennyiséget tekintve írjuk, hogy

$$\mathrm{d}L = \sum_i \dot{p}_i \mathrm{d}r_i + \sum_i p_i \mathrm{d}\dot{r}_i + \frac{\partial L}{\partial \lambda}\mathrm{d}\lambda \ , \tag{62}$$

és ez alapján kapjuk az előbbivel analóg számolás alapján, hogy

$$\mathrm{d}H = -\sum_i \dot{p}_i \mathrm{d}r_i + \sum_i \dot{r}_i \mathrm{d}p_i - \frac{\partial L}{\partial \lambda}\mathrm{d}\lambda \ , \tag{63}$$

és innen, hogy

$$\left(\frac{\partial H}{\partial \lambda}\right)_{p,r} = -\left(\frac{\partial L}{\partial \lambda}\right)_{\dot{r},r} \tag{64}$$

összefüggés adódik, amely kapcsolatot teremt a Lagrange- és a Hamilton-függvény λ paraméter szerint képzett deriváltja között. (A deriváltak körüli zárójelen az indexek arra utalnak, hogy a deriválást egyik esetben állandó p és r, a másik esetben állandó $\dot{r}$ és r között kell elvégeznünk.) Ezt az eredményt más szemszögből is nézhetjük. Legyen a Lagrange-függvény $L = L_0 + L'$ alakú, ahol L' kis járulék az L_0 alapfüggvényhez. Ekkor a megfelelő járulék a $H = H_0 + H'$ Hamilton-függvényben:

$$(H')_{p,r} = -(L')_{\dot{q},q} \ . \tag{65}$$

Megemlítjük, hogy a Legendre-transzformációnál (56. egyenlet) nem írtunk $\mathrm{d}t$-t tartalmazó tagok, ami a Lagrange-függvény explicit időfüggését venné számításba, minthogy az idő a transzformáció szempontjából csak a paraméter (mint λ) szerepét játssza, amely nincs (közvetlen) összefüggésben a végrehajtandó transzformációval. A λ-függésre vonatkozó megfontolások (64. egyenlet) alapján adódik, hogy

$$\left(\frac{\partial H}{\partial t}\right)_{p,r} = -\left(\frac{\partial L}{\partial t}\right)_{\dot{r},r} \tag{66}$$

kapcsolat áll fenn.

5.4. Poisson-zárójelek

Tekinstük az $f(r,p,t)$ függvényt, és állítsuk elő a teljes időderiváltját:

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_k \left(\frac{\partial f}{\partial r_k}\dot{r}_k + \frac{\partial f}{\partial p_k}\dot{p}_k\right) . \tag{67}$$

Írjuk be $\dot{r}_k$ és $\dot{p}_k$ helyére a Hamiton-egyenletekből adódó kifejezéseket, ekkor kapjuk, hogy

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial f}{\partial t} + \{H, f\} , \tag{68}$$

ahol bevezettük a H és f úgynevezett Poisson-zárójelét

$$\{H, f\} = \sum_k \left(\frac{\partial H}{\partial p_k}\frac{\partial f}{\partial r_k} - \frac{\partial H}{\partial r_k}\frac{\partial f}{\partial p_k}\right) . \tag{69}$$

Dinamikai változók olyan függvényeit, amelyek állandók a rendszer mozgása során mozgásállandóknak szokás nevezni. A 68. egyenletből látható, hogy annak a feltétele, hogy f mozgásállandó legyen ($\mathrm{d}f/\mathrm{d}t = 0$):

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \{H, f\} = 0 \tag{70}$$

Ha f explicit módon nem függ az időtől, akkor abban az esetben mozgásállandó, ha a H-val vett Poisson-zárójele eltűnik:

$$\{H, f\} = 0 . \tag{71}$$

Tetszőleges f és g függvénypárra a Poisson-zárójelet a 69. egyenlethez hasonlóan definiáljuk:

$$\{f, g\} = \sum_k \left(\frac{\partial f}{\partial p_k}\frac{\partial g}{\partial r_k} - \frac{\partial f}{\partial r_k}\frac{\partial g}{\partial p_k}\right) . \tag{72}$$

A Poisson-zárójelek néhány tulajdonsága közvetlenül következik a definíciójukból: függvények felcserélésére előjelet vált

$$\{f, g\} = -\{g, f\} \tag{73}$$

illetve, ha az egyik függvény konstans (c), akkor eltűnik:

$$\{f, c\} = 0 . \tag{74}$$

Továbbá

$$\{f_1 + f_2, g\} = \{f_1, g\} + \{f_2, g\} \ . \tag{75}$$

72. egyenlet idő szerinti parciális deriváltját véve:

$$\frac{\partial}{\partial t}\{f, g\} = \{\frac{\partial f}{\partial t}, g\} + \{f, \frac{\partial g}{\partial t}\} \ . \tag{76}$$

Ha az f vagy g függvény közül az egyik egy koordinátával vagy impulzussal egyezik meg, akkor a Poisson-zárójelek egyszerűen a parciális deriváltak lesznek:

$$\{f, r_k\} = \frac{\partial f}{\partial r_k} \tag{77}$$

$$\{f, p_k\} = -\frac{\partial f}{\partial r_k} \ . \tag{78}$$

Ha f-et és g-t egy kooordinátának, illetve impulzusnak választjuk, akkor adódnak a következő speciális összefüggések:

$$\{r_i, r_k\} = 0 \quad \{p_i, p_k\} = 0 \quad \{p_i, r_k\} = \delta_{ik} \ . \tag{79}$$