# Nemegyensúlyi termodinamika és kvantummechanika

Ván Péter
BME, Kémiai Fizika Tanszék

- Egy komponensű folyadékok
  - Klasszikus elmélet
  - Gyengén nemlokális általánosítás (Korteweg-folyadékok)
- Mitől Fisher formájú a kvantumpotenciál?
- További gondolatok
  - interpretációk, más modellek, stb..

# Klasszikus folyadékmechanika

$$\dot{\rho} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0$$ tömegmérleg

$$\rho \dot{\mathbf{v}} + \nabla \cdot \mathbf{P} = \rho \mathbf{f}$$ impulzumérleg

$\mathbf{v} \cdot$

$$\rho \frac{d}{dt}\left(\frac{\mathbf{v}^2}{2}\right) + \nabla \cdot (\mathbf{v} \cdot \mathbf{P}) = \mathbf{P} : (\nabla \circ \mathbf{v})$$ kinetikus energia

$$\varepsilon = u + \frac{\mathbf{v}^2}{2}$$ teljes energia (megmarad)

$$\dot{u} = T\dot{s} - p\dot{v}$$

$$\mathbf{j}_q = T\mathbf{j}_s$$ ?

sztatika ?

$$\rho \dot{s} + \nabla \cdot \frac{\mathbf{j}_q}{T} = -\frac{1}{T}(\mathbf{P} - p\mathbf{I}) : (\nabla \circ \mathbf{v}) + \mathbf{j}_q \cdot \nabla \frac{1}{T} = \sigma_s \geq 0$$

Szabadenergiával:

$$f := u - Ts \quad \Rightarrow \quad \dot{f} = -s\dot{T} - p\dot{v} \quad \overset{T=\text{áll.}}{\Rightarrow} \quad \rho\dot{f} = -p\nabla\cdot\mathbf{v}$$

$$\rho\frac{d}{dt}\left(f+\frac{\mathbf{v}^2}{2}\right)+\nabla\cdot\left(\mathbf{v}\cdot\mathbf{P}\right)=(\mathbf{P}-p\mathbf{I}):(\nabla\circ\mathbf{v})=-T\sigma_s\le 0$$

$$\mathbf{P}^v = \mathbf{J}_M \qquad \mathbf{X}_M$$

$$\mathbf{J}_M = \mathbf{L}\cdot\mathbf{X}_M$$ Onsageri vezetési törvény

$$\mathbf{J}_M(\mathbf{X}_M)$$ ?

izotrop anyag, **L** állandó és negatív definit:

$$\mathbf{P}^v = -\lambda(\nabla\circ\mathbf{v})^s - \mu\nabla\cdot\mathbf{v}\mathbf{I}$$

Newton-féle nyomástenzor ⇓ Navier-Stokes-egyenlet

*„… fluid dynamic equations can also be derived from very general principles, showing that they have a much wider regime of validity, and, indeed in practice, we apply them over such a wider range. This is the 'universality' of fluid dynamics."*

*Ramon Jackiw*

*Általános elvek:*

- *mérlegek*
- *objektivitás*
- *II. főtétel - stabilitás*

# Klasszikus folyadékmechanika

$$\dot{\rho} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0$$
$$\rho \dot{\mathbf{v}} + \nabla \cdot \mathbf{P} = \mathbf{0}$$
$$\rho \dot{s} + \nabla \cdot \mathbf{j}_s \geq 0$$

$(\rho, \nabla\rho, \mathbf{v}, \nabla\mathbf{v})$ konstitutív állapot

$(\mathbf{P}, s, \mathbf{j}_s)$ konstitutív függvények

Liu-eljárás (Farkas-lemma):

$$s(\rho, \mathbf{v}) = s_e(\rho) - \frac{\mathbf{v}^2}{2} \qquad \mathbf{j}_s(\ldots)$$

$$\sigma_s = -(\underbrace{\mathbf{P} + \rho^2 \partial_\rho s\, \mathbf{I}}_{\mathbf{P}^v = (\mathbf{P} - p\,\mathbf{I})}) : \nabla\mathbf{v} \geq 0$$

Korteweg-folyadékok (1901):

$$\mathbf{P}^r_{Kor} = \left(-p + \alpha\Delta\rho + \beta(\nabla\rho)^2\right)\mathbf{I} + \delta\nabla\rho \circ \nabla\rho + \gamma\nabla^2\rho$$

?

# Gyengén nemlokális folyadékmechanika

$$\dot{\rho} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0$$
$$\rho \dot{\mathbf{v}} + \nabla \cdot \mathbf{P} = \mathbf{0}$$
$$\rho \dot{s} + \nabla \cdot \mathbf{j}_s \geq 0$$

$(\rho, \nabla\rho, \nabla\nabla\rho, \mathbf{v}, \nabla\mathbf{v})$ konstitutív állapot

$(\mathbf{P}, s, \mathbf{j}_s)$ konstitutív függvények

Liu-eljárás (Farkas-lemma):

$$s(\rho, \mathbf{v}, \nabla\rho) = s_e(\rho, \nabla\rho) - \frac{\mathbf{v}^2}{2} \qquad \mathbf{j}_s(\ldots)$$

$$\sigma_s = -\underbrace{\left( \mathbf{P} - \rho^2 \left[ \frac{1}{2} \nabla \cdot \partial_{\nabla\rho} s - \partial_\rho s \right] \mathbf{I} - \frac{\rho^2}{2} \nabla \partial_{\nabla\rho} s \right)}_{\mathbf{P}^v} : \nabla\mathbf{v} \geq 0$$

# Schrödinger-Madelung-folyadék (ideális)

$$s_{SchM}(\rho, \mathbf{v}, \nabla\rho) = -\frac{1}{2}\left(\frac{\nabla\rho}{2\rho}\right)^2 - \frac{\mathbf{v}^2}{2}$$

$$\mathbf{P}^{r}_{SchM} = -\frac{1}{8}\left((\Delta\rho + \nabla^2\rho)\mathbf{I} - \frac{2\nabla\rho \otimes \nabla\rho}{\rho}\right)$$

➡ Potenciálozható: $\nabla \cdot \mathbf{P} = \rho \nabla U$

➡ Bernoulli-egyenlet ➡ Schrödinger-egyenlet

➡ $U = -\partial_\rho(\rho s_e) + \nabla \cdot \rho \partial_{\nabla\rho} s_e$ Euler-Lagrange-egyenlet

## Landau-folyadék

$$s_L(\rho, \mathbf{v}, \nabla\rho) = -\frac{1}{2}(\nabla\rho)^2 - \frac{\mathbf{v}^2}{2}$$

$$\mathbf{P}_L^r = -\frac{\rho^2}{2}\left(\Delta\rho\mathbf{I} + \nabla\nabla\rho\right)$$

## Másféle folyadék

$$s_m(\rho, \mathbf{v}, \nabla\rho) = -\frac{(\nabla\rho)^2}{4\rho} - \frac{\mathbf{v}^2}{2}$$

$$U_m = -\frac{\Delta\rho}{2}$$

Schrödinger-egyenlet:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi+V(x)\psi \quad \Rightarrow$$

Madelung-transzformáció: $\psi = R\,e^{iS}$

$$\dot{\rho}+\rho\nabla\cdot\mathbf{v}=0$$

$$\rho := R^2 \qquad \mathbf{v} := \frac{\hbar}{m}\nabla S$$

de Broglie-Bohm alak:

$$\dot{\mathbf{v}}=-\nabla(U_{QM}+V)$$

$$U_{QM}=-\frac{\hbar^2}{2m^2}\frac{\Delta R}{R}$$

Hidrodinamikai alak:

$$\rho\dot{\mathbf{v}}+\nabla\cdot\mathbf{P}_{QM}=-\rho\nabla V$$

$$=-\frac{\hbar^2}{4m^2\rho}\left(\Delta\rho-\frac{(\nabla\rho)^2}{2\rho}\right)$$

# Lokális statisztikus fizika

(információ elméleti, prediktív, bayesi)

(Jaynes, 1957):

*Az információ mértéke egyértelmű általános fizikai feltételek mellett.*

(Shannon, 1948; Rényi, 1963)

- Extenzivitás (átlag, sűrűség)
- Additivitás

$$s(\rho_1\rho_2) = s(\rho_1) + s(\rho_2)$$

(egyértelmű megoldás)

$$s(\rho) = -k \ln \rho$$

# Nemlokális statisztikus fizika

(becsléselméleti, Fisher alapú)

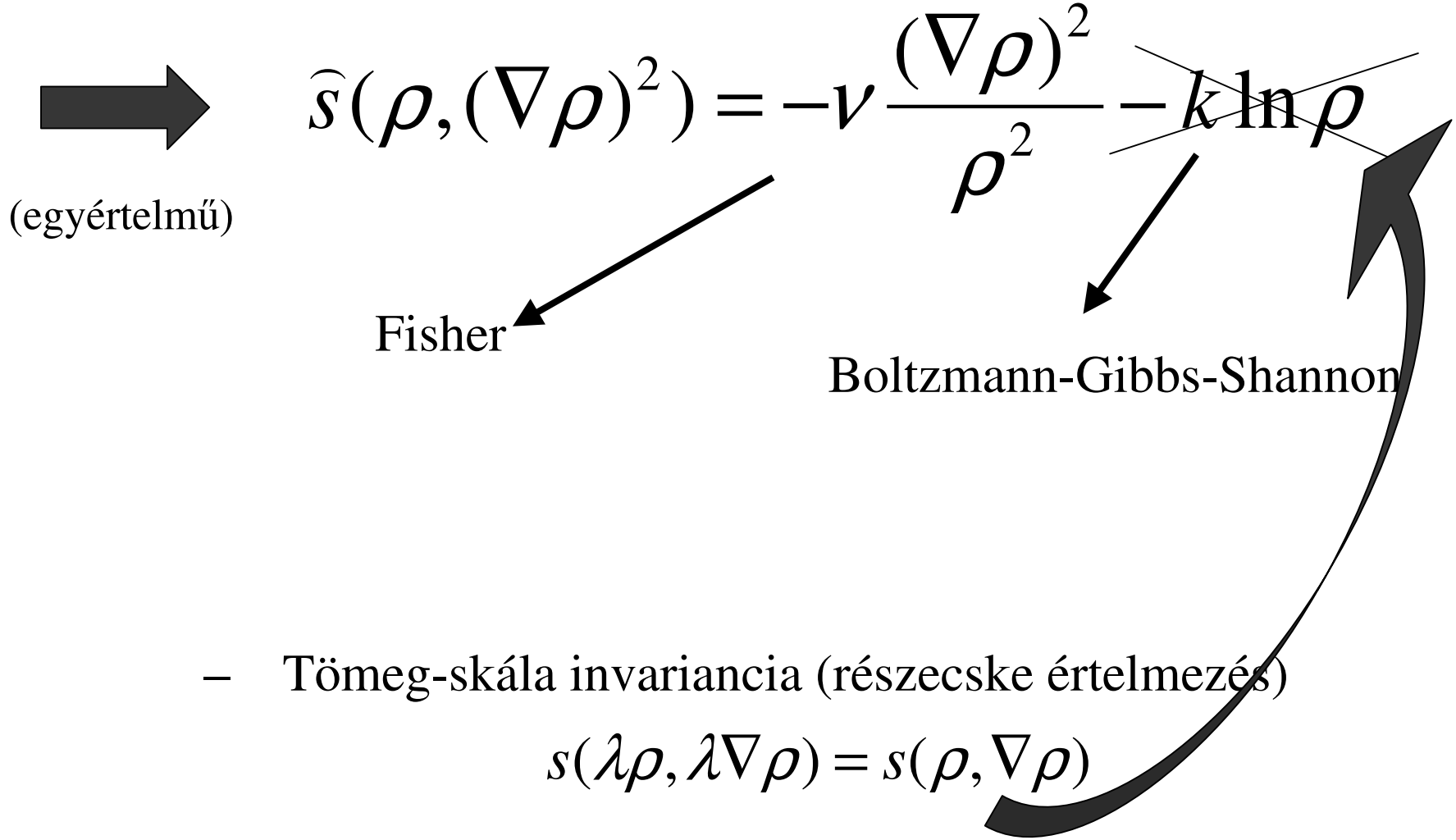
- Extenzivitás

- Izotrópia

$$s(\rho, \nabla\rho) = \hat{s}(\rho, (\nabla\rho)^2)$$

- Additivitás

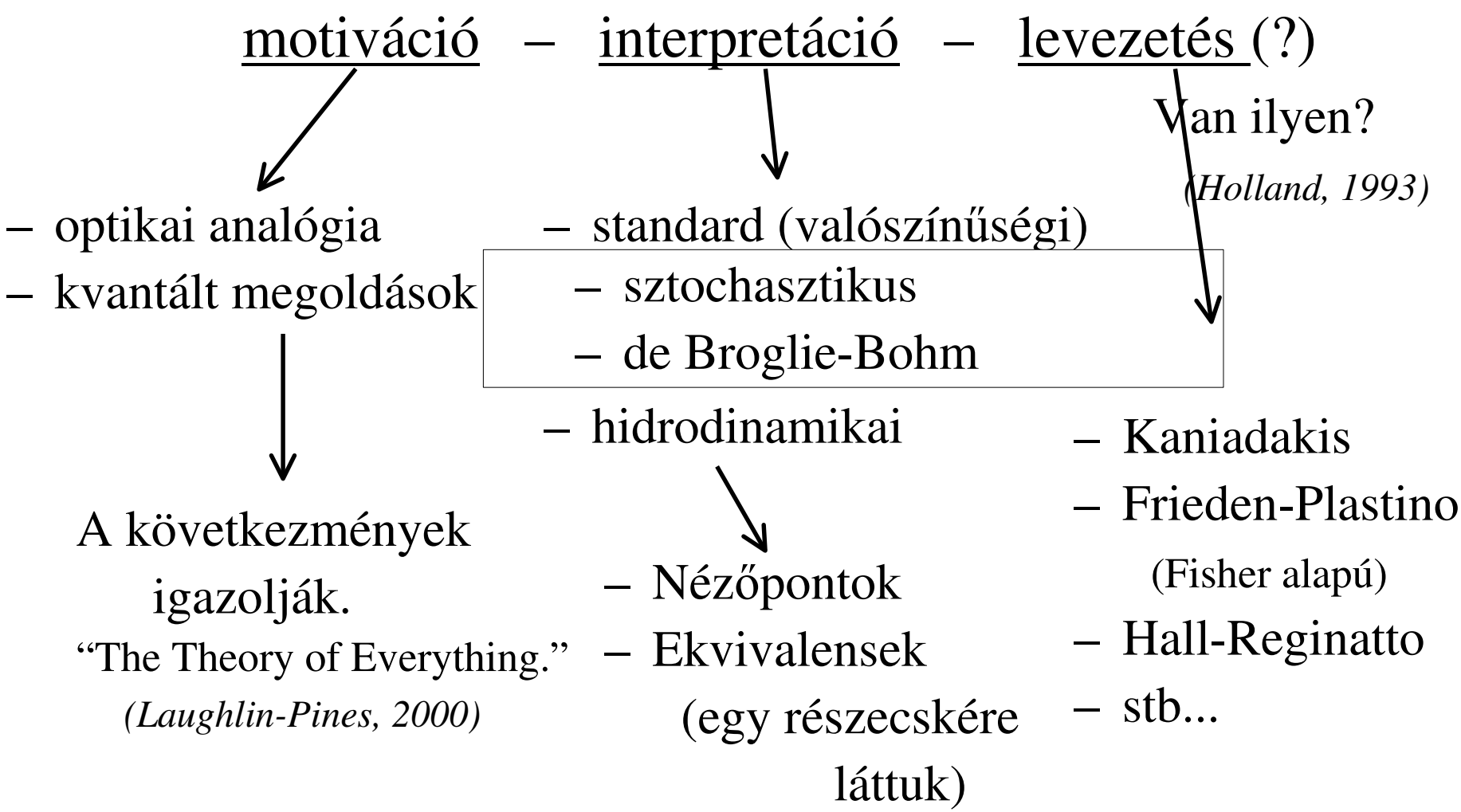
$$s(\rho_1\rho_2, \nabla(\rho_1\rho_2)) = s(\rho_1, \nabla\rho_1) + s(\rho_2, \nabla\rho_2)$$




– Tömeg-skála invariancia (részecske értelmezés)

$$s(\lambda\rho,\lambda\nabla\rho) = s(\rho,\nabla\rho)$$

# További gondolatok

- Interpretációk és levezetések
  - Van valami baja a kvantummechanikának?
    - nincs és van
  - Kísérleti ellenőrzés: ugyanaz, de
    - alagutazási idő,
    - disszipáció, …
- Folyadék univerzalitás
  - Schrödinger-egyenlet: kapillaritás, galaxisok, stb..
- Termodinamikai módszer:
  - más folyadékok, más rendszerek, …

***Kvantummechanika alapjai:***