

1. Bevezetés

Képzeljük magunkat az angol botanikus, Robert Brown (1827) helyébe, aki mikroszkópjába tekintve állítólag először figyelt fel az oldatban lebegő apró festékszemcsék ide-oda cikázó mozgására. Mint az élővilágot tanulmányozó tudóstól nem állhatott tőle távol az a gondolat, hogy valami kis mikroszkopikus élőlényektől származik ez az örökös mozgás, aminek persze rögtön ellentmondott a részecskék minden életmegnyilvánulást nélkülöző anyagból való eredete.

Ma már az ilyen és ehhez hasonló elképzeléseken csak nevetünk, de azért most is felmerülhet a kétely: hogyan lehet az, hogy ezek a részecskék a tapasztalat szerint mindig fellépő sűrűlódás ellenére örökös mozgásban vannak. Honnan veszik ehhez az energiát? Talán valami belső energiaforrás pótolja a veszteségeket? Ez a feltevés még az előzőnél is rosszabb, mert ezzel az energiamegmaradással kerülnénk szembe, ugyanis minden Brown-részecskét az örökmozgó egy-egy mintapéldányának tekinthetnénk.

Az ellentmondás eltűnik, ha elfogadjuk az anyag molekulár-kinetikus elméletét. Eszerint minden anyag igen apró, kb. 10^{-8} cm átmérőjű, mikroszkópon nem látható, állandóan rendszertelen mozgásban levő molekulákból áll. Ezek között per definitionem nem lép fel sűrűlódás, hisz a makroszkopikus testek sűrűlódásakor hő formájában elvont energia éppen ezen molekulák kinetikus energiájának növelésére fordítódik. Nézzük meg, hogyan magyarázható a molekulár-kinetikus elmélet alapján a Brown-részecskék mozgása.

Ha folyadékba vagy gázba makroszkopikus test merül, a rendszertelen mozgásban levő molekulák ütköznek a test felületén és eközben erőt fejtenek ki a szilárd testre. A molekulák ütközése a test felületén minden oldalról teljesen rendszertelenül történik. Ha a test lineáris méretei elég nagyok, úgyhogy már rövid idő alatt is sok molekula ütközik a test felületén, akkor a molekulák ütközése folytán a különböző irányokból nyert lökések kompenzálják egymást, vagyis a test nyugalomban marad.

Ha ellenben a közegben elég kis méretű részecskék lebegnek (maximális lineáris méret kb. 10^{-4} cm), pl. tust cseppentünk a vízbe, akkor a különböző irányú lökések már nem fognak kiegyenlíteni, a részecske rendkívül szaporán fogja sebességének irányát és abszolút értékét változtatni (másodpercenként kb. 10^{12} -szer): Emiatt a részecske tényleges mozgását nyomon követni; és a mozgás irányváltozásainak helyét rögzíteni lehetetlen. Szemünkkel csak a pálya kivonatát tudjuk megfigyelni, és ami így látszólag egyenes szakasz, a valóságban szubmikroszkopikus cikcakkok milliárdjaiból tevődik össze. Ez azonban, mint azt később látni fogjuk, nem változtat a jelenség lényegén.

Ezek alapján a Brown-mozgás roppant meggyőző érvet szolgáltat az atomelmélet mellett, de bizonyító erejűvé akkor válik, ha a kvalitatív megfontolások mellett kvantitatív összefüggésekre is vezet. Az ezzel kapcsolatos számításokat először Einsteinnek és Smoluchowski-nak sikerült 1906-ban elvégeznie. A következőkben lényegében az ő gondolatmenetüket követve megmutatjuk, hogy a Brown-mozgás alapján meghatározható az Avogadro-szám (a molnyi mennyiségben levő molekulák száma), amivel azt is illusztrálhatjuk, hogy azért a véletlennek is vannak törvényei.

2. A „bolyongás” probléma

Nyilvánvaló, hogy ezen a fokon a számítást teljes általánosságban képtelenség nemcsak elvégezni, de még követni is. Ezért a jelenség lényeges momentumait kiragadva próbáljunk egy szemléletes modellt szerkeszteni.

A Brown-részecskék mozgását az jellemzi, hogy a részecske az n -edik és az $(n + 1)$ -edik ütközés között egyenes vonalú egyenletes mozgással s_n utat tesz meg. A továbbiakban tegyük fel, hogy

a) csak egy egyenes mentén történik ez az elmozdulás egyenlő valószínűséggel jobbra vagy balra, vagyis korlátozódjunk egydimenziós mozgásra;

b) a két ütközés között megtett s_n utak hossza legyen azonos, egyelőre tekintsük ezt hosszegységnek;

c) a két ütközés között eltelt idő is legyen azonos (t_u);

d) $t = 0$ időpillanatban legyen a Brown-részecske az origóban.

Ezek után kérdezhetjük, hogy körülbelül milyen messzire lesz N ütközés után, azaz $t = Nt_u$ időpillanatban a részecske az origótól; vagy másképp: mi annak a valószínűsége, hogy t -kor pont m egységnyi távolságra lesz az origótól. Ezt a problémát a valószínűségszámításban a „bolyongás” problémájának szokás nevezni.

Már többször említettük a titokzatos „valószínűség” szót, de eddig tartózkodtunk annak mélyrehatóbb elemzésétől. Ez a fogalom a modern matematikába teljes egzakttsággal bevezethető, sőt a valószínűségi jelenségekkel foglalkozó vizsgálatok a matematika egyik legrohamosabban fejlődő fejezetét alkotják. De a valószínűségnek nemcsak ilyen elméleti jelentősége van, hanem centrális szerepet tölt be jóformán az egész fizikában. Ugyanis a fizikus számára egy adott esemény bekövetkezésének valószínűsége ugyanolyan reálisan létező fizikai mennyiség, mint például egy rúd hossza, csak éppen kissé nehezebben hozzáférhető jellemzője a fizikai objektumoknak (bár éppen a véletlen ingadozások és egyéb pontatlanságok miatt sokszor a precíz hosszúságmérés sem jelent sokkal egyszerűbb feladatot, és a hiba, azaz a statisztikus ingadozás mértékének megadása nélkül nem is igazi mérés a mérés).

A valószínűség fogalma a mindennapi élet tapasztalatain alapul. Hiszen minden cselekedetünket a valószínűség szélső eseteinek alapulvételével végezzük. Akkor megyünk át az utcán, amikor igen valószínűnek látszik, hogy nem gázol el bennünket valamilyen jármű, de mint a közlekedési balesetek bizonyítják, nem 100%-ig biztos, hogy baj nélkül juthatunk át a túloldalra.

	1. lépés	2. lépés	3. lépés	Véghelyzet: m
1.	+	+	+	3
2.	+	+	–	1
3.	+	–	+	1
4.	+	–	–	–1
5.	–	+	+	1
6.	–	+	–	–1
7.	–	–	+	–1
8.	–	–	–	–3

A Brown-részecskék mozgásának az egydimenziós bolyongási problémára való specializálásával elértük azt, hogy az adott esetre vonatkozóan kielégítő definíciót adjunk az egyes események bekövetkezésének valószínűségére vonatkozóan. Vizsgáljuk a részecske első N lépését; pl. $N = 3$ esetén a következő lehetséges „pályák” adódnak: (+ a jobbra; – a balra való lépést jelenti.) Nyilvánvaló, hogy ha egyik lépéskombináció sincs valami módon kitüntetve, akkor nagyon ésszerű az a feltevés, hogy bármelyik kombináció bekövetkezésének valószínűsége azonos. Mivel a nyolc lehetséges eset közül az egyik biztos bekövetkezik, ezért az egyes esetek valószínűségének összege 1. Ha egy lépéskombináció valószínűsége p , akkor az összeg $Mp = 1$, vagyis $p = 1/M$ (ahol M a lehetséges esetek száma). Általános esetben $M = 2^N$, tehát annak a valószínűsége, hogy az első N lépés egy adott lépéskombináció – amit a továbbiakban elemi eseménynek fogunk nevezni – szerint történjék:

$$p_N = 1/2^N.$$

Mint az elnevezésből is gyanítható, az elemi eseményeken kívül lehetségesek összetett események is. Például az az esemény, hogy 3 lépés megtétele után a részecske a +1 koordinátájú pontban legyen, a következő három elemi esemény bármelyikének megvalósulása esetén következhet be:

$$\begin{array}{c} + + - \\ + - + \\ - + + \end{array}$$

Ezért ennek valószínűsége: $p_{N=3, m=1} = p_{++-} + p_{+-+} + p_{-++} = 3p_{N=3} = 3/2^3$. Ebből általános szabályként azt szűrhetjük le, hogy egy elemi eseményekből összetett esemény bekövetkezésének valószínűsége egyenlő az adott eseményre vezető ún. kedvező esetek száma osztva a lehetséges esetek számával (mert $p = 1/M$).

Ezzel a definícióval felvértezve most már hozzáfoghatunk annak a kiszámításához, hogy mennyi annak a valószínűsége, hogy N lépés után a részecske éppen az m koordinátájú pontban tartózkodik. Nyilvánvaló, hogy a lépések sorrendje a végállapot szempontjából teljesen közömbös. Ugyanis ha az $N/2$ lépés közül k történt jobbra, akkor a részecske koordinátája:

$$m = k(+1) + (N - k)(-1) \text{ lesz, ebből } k = (N + m)/2.$$

$(N + m)/2$ nyilvánvalóan egész szám, mert páratlan N esetén a véghelyzet, azaz m is csak páratlan lehet, ugyanis minden egyes lépés után akár előre, akár hátra történt, megváltozik a helyzet párossága. Vagyis ilyenkor $m = 2l$ esetén a valószínűség után érdeklődni értelmetlen, illetve a triviális felelet: $P_{N, m=2l} = 0$. Páros N esetén hasonló okból m is csak páros lehet.

A kedvező esetek száma tehát megegyezik azon elemi események számával, amelyekben $k = (N + m)/2$ jobbra, ill. $(N - m)/2$ balra lépés történt. Ez pedig megegyezik azzal a kombinatorikai feladattal, hogy hányféleképpen választható N elem közül k úgy, hogy a kiválasztott elemek sorrendjétől eltekintünk, vagyis a közönséges kombinatorikai kombinációk számával, amely a matematikában szokásos jelöléssel:

$$C_{N,k} = \frac{N(N-1)\dots(N-k+1)}{1 \cdot 2 \cdot \dots \cdot k} = \frac{N!}{k!(N-k)!} = \binom{N}{k}.$$

Ide $k = (N + m)/2$ -t behelyettesítve megkapjuk a kedvező események számát, amely a lehetséges események számával osztva megadja a keresett valószínűséget:

$$p_{N,m} = \frac{N!}{\left(\frac{N+m}{2}\right)! \left(\frac{N-m}{2}\right)!} \cdot \frac{1}{2^N}.$$

Tegyük fel, hogy az origóba tett részecskével a kísérletet nagyon sokszor (K -szor) megismétljük, akkor eredményül a $(-N; +N)$ intervallumban elég sokszor megkapunk minden (megfelelő párosságú) m értéket. Tegyük fel, hogy m_i -t k_i -szer kaptuk meg. Képezzük ezen megfigyelt értékek számtani közepét:

$$\overline{m} = \frac{k_1 m_1 + k_2 m_2 + k_3 m_3 + \dots}{K},$$

ahol K , a mérések száma egyenlő az összes k_i -k összegével. Mivel a k_i/K értékek az m_i bekövetkezésének valószínűsége, p_i körül ingadoznak (ugyanis nyilván minden m_i érték körülbelül a valószínűségének megfelelő arányban fordul elő a kísérletek között), ezért $\overline{m}$, a mért számtani közép az $\langle m \rangle = \sum p_i m_i$ ún. várható érték körül fog ingadozni.

Határozzuk meg a bolyongási probléma várható értékét:

$$\langle m \rangle = \sum_m \frac{N!}{\left(\frac{N+m}{2}\right)! \left(\frac{N-m}{2}\right)!} \cdot \frac{1}{2^N} m.$$

A számítás egyszerűsítése végett vezessük be az előző k értéket, ekkor

$$m = 2k - N,$$

$$\langle m \rangle = \sum_{k=0}^N C_{N,k} \cdot \frac{1}{2^N} (2k - N) = \sum_{k=0}^N C_{N,k} \cdot \frac{1}{2^N} 2k - \sum_{k=0}^N C_{N,k} \cdot \frac{N}{2^N}.$$

A szummákból kiemelve a konstans faktorokat, az első szummában elegendő $k = 1$ -től összegezni, mert $k = 0$ esetén a megfelelő tag 0:

$$\langle m \rangle = \frac{1}{2^{N-1}} \sum_{k=1}^N C_{N,k} \cdot k - \frac{N}{2^N} \sum_{k=0}^N C_{N,k}.$$

Az első szummába behelyettesítve $C_{N,k}$ értékét, egyszerűsítve k -val, éppen $C_{N-1, k-1}$ -t kapjuk:

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^N C_{N,k} \cdot k &= \sum_{k=1}^N \frac{N(N-1) \dots (N-k+1)}{1 \cdot 2 \cdot \dots \cdot k} \cdot k = \\ &= \sum_{k=1}^N N \cdot \frac{(N-1) \cdot \dots \cdot [N-1-(k-1)+1]}{1 \cdot k \cdot \dots \cdot (k-1)} = N \sum_{k=1}^N C_{N-1, k-1}. \end{aligned}$$

A binomiális együtthatók összege éppen egyenlő $(1+1)$ -nek a kérdéses hatványával, a binomiális tétel szerint:

$$\sum_{k=0}^N C_{N,k} = 2^N,$$

így a várható értékre kapjuk:

$$\begin{aligned} \langle m \rangle &= \frac{1}{2^{N-1}} N \cdot \sum_{k=1}^N C_{N-1, k-1} - \frac{N}{2^N} \sum_{k=0}^N C_{N,k} = \\ &= \frac{1}{2^{N-1}} N \cdot 2^{N-1} - \frac{N}{2^N} = 0. \end{aligned}$$

E hosszadalmas számítás elég triviális eredményre vezetett, tudniillik azt mondja, hogy a részecske állandóan az origó körül fog ugrándozni. Persze ez nem jellemzi eléggé a mozgást, mert így az origótól való eltérés átlagos nagyságáról nem kaptunk semmiféle tájékoztatást. Ennek oka abban keresendő, hogy az elmozdulásokat előjelesen átlagoltuk. Ezen a hibán segíthetnénk úgy, hogy az eltávolodás abszolút értékének a várható értékét határoznánk meg. Matematikailag azonban sokkal könnyebben járható út, ha az elmozdulás négyzetének várható értékét határozzuk meg, ami szintén elhárítja a fenti nehézséget.

Definíció szerint: $\langle m^2 \rangle = \sum_i p_i m_i^2$.

Az előzőhöz hasonló, csak pár lépéssel hosszabb számolás alapján adódik:

$$\langle m^2 \rangle = N.$$

Vagyis a részecske lényegében az origótól kb. $\sqrt{\langle m^2 \rangle} = \sqrt{N}$ távolságra helyezkedik el a „legnagyobb valószínűséggel”. Visszatérve közönséges hosszegységekre, ha egy lépés hossza l ; akkor az origótól való eltávolodás négyzetének várható értéke:

$$\langle x^2 \rangle = \langle m^2 l^2 \rangle = \langle m^2 \rangle l^2 = N l^2.$$

Az N ütközés alatt eltelt idő: $t = N t_{\bar{u}}$, ebből $N = t/t_{\bar{u}}$, és bevezetve $D = \frac{1}{2} \frac{l^2}{t_{\bar{u}}}$ jelölést: $\langle x^2 \rangle = 2Dt$.

Ezt a formulát az a körülmény teszi rendkívül használhatóvá, hogy D értékére Einstein (itt nem közölhető) elméleti úton a következő kifejezést adta:

$$D = \frac{R}{L} \cdot \frac{T}{3\pi \cdot d_0 \cdot \eta},$$

ahol L az Avogadro-szám; $R = 8,31 \cdot 10^7$ erg/mol fok, az univerzális gázállandó; d_0 a gömbalakúnak feltételezett Brown-részecske átmérője; η a közeg belső súrlódási együtthatója; T az abszolút hőmérséklet.

Eddigi meggondolásaink csak az egydimenziós esetre vonatkoztak. Most térjünk át a háromdimenziós térben mozgó részecskére. Tudjuk, hogy minden háromdimenziós elmozdulás összetehető három kiválasztott tengely irányában történő elmozdulásból. Ha olyan kísérleti körülményeket választunk, hogy a térben nincs kitüntetett irány, akkor az egyes irányokba való elmozdulások azonos törvényszerűségeket követnek, vagyis mindhárom irányra nézve az elmozdulások négyzetének várható értéke:

$$\langle x^2 \rangle = \langle y^2 \rangle = \langle z^2 \rangle = 2Dt.$$

Mivel az origóból való tényleges elmozdulás négyzete:

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2,$$

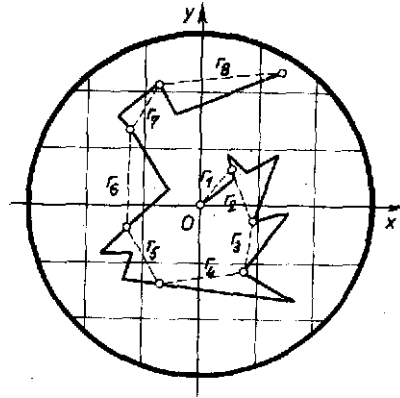
ezért az eltávolodás négyzetének várható értéke:

$$\langle r^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle + \langle z^2 \rangle = 6Dt,$$

vagyis lényegében ez is az egydimenziós mozgással azonos törvényszerűséget mutat. Ha a megfigyeléseket mikroszkóp alatt végezzük, akkor persze az egyik dimenzió kiesik, mert a z -irányú elmozdulást nem tudjuk meghatározni, így $\langle z^2 \rangle = 0$, tehát:

$$\langle r^2 \rangle = 4Dt,$$

vagyis a részecske a „legnagyobb valószínűséggel” az $r = 2\sqrt{Dt}$ sugarú kör közelében helyezkedik el. A mikroszkóp éppen ennek az r -nek a megfigyelését teszi lehetővé. Nem kell mást csinálni, csak az origóba tenni egy részecskét $t = 0$ időpillanatban és $t = \tau$ idő múlva megnézni, hogy milyen messzire ment. Mivel azonban r valószínűségi változó, ezért négyzetének várható értékét csak nagyon sok mérés átlagolása után kaphatjuk meg.



Mivel az túlságosan kényelmetlen lenne, hogy minden egyes méréshez a részecskét vigyük az origóba, ezért „Mohamed megy a hegyhez” alapon, minden τ idő eltelte után képzeletben az origót visszük a részecske tartózkodási helyére, és a következő mérést innen kiindulva végezzük. Gyakorlatilag ez azt jelenti, hogy elég egyetlen részecskét nyomon követni, és mondjuk másodpercenként egy felvételt csinálni a tartózkodási helyéről. Ezen felvételeket összesítve a két kép közti elmozdulás megadja r egy mért értékét. (A rajzon a tényleges pályát a folytonos vonal mutatja.) Az így kapott r_i értékek négyzetét átlagolva megkapjuk $\langle r^2 \rangle$ -t, ill. egy ahhoz igen közel eső értéket.

Ebből az előző képlet alapján:

$$D = \frac{\langle r^2 \rangle}{4\tau},$$

amiből az Einstein-képletben szereplő egyéb konstansok ismeretében meghatározhatjuk az Avogadro-számot:

$$L = \frac{R}{\langle r^2 \rangle} \cdot \frac{4T}{3\pi \cdot d_0 \cdot \eta} \tau.$$

A méréseket Perrin, francia fizikus elvégezte és tényleg jó egyezést talált a más úton levezetett kb. $L = 6 \cdot 10^{23}$ -mal.

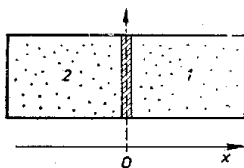
3. A Brown-mozgás általánosítása

Képzeliük el, hogy a Brown-féle részecske méreteit egyre csökkentjük. Mivel a fenti meggondolásokban a részecske speciális tulajdonságait sehol sem használtuk fel, ezért azok érvényesek lesznek még akkor is, ha a szétDarabolásban egészen a molekuláig jutunk el. Vagyis a gáz vagy a folyadék molekulái is Brown-mozgást végeznek! Itt aztán igazán teljesül az a feltétel, hogy egy adott időpillanatban a különböző oldalról való ütközések nem kompenzálják egymást.

Persze ez a mozgás még a legjobb mikroszkóppal is megfigyelhetetlen egyrészt a molekulák roppant kis méretei, másrészt az igen nagy sebességek miatt. Ugyanis a molekulák átlagos sebessége több mint 100 m/sec.

Másik általánosítási lehetőségként a következő mód kínálkozik. Eddig egyetlen kiszemelt Brown-részecske, ill. molekula mozgására vonatkozó törvényszerűségeket tanulmányoztunk. Most tekintsünk nagyon sok részecskét.

Vegyünk két gázzal töltött edényt, amelyeket kezdetben az x -tengelyre merőlegesen az $x = 0$ -nál egy fal választ el. $t = 0$ -kor távolítsuk el a falat.



Ekkor az 1-es gáz molekulái, mint azt előbb említettük, Brown-mozgást végeznek, és közben behatolnak a 2-es gázba, ill. a 2-es molekulái az 1-esbe. Ez a közismert jelenség a diffúzió. Vagyis megállapíthatjuk, hogy a diffúzió is a Brown-mozgás egy általánosítása: a molekulák elemi Brown-mozgásának eredője. Matematikai interpretációja is könnyen adódik, ha átfogalmazzuk a Brown-mozgás alapkérdését. Eddig azt kérdeztük, hogy egy kiszemelt részecske milyen valószínűséggel jut el egy kijelölt tartományba, most pedig azt, hogy adott helyről induló molekulák hányadrésze jut el t idő alatt a vizsgált tartományba. Magasabb matematikával igazolható, hogy a molekulák Brown-mozgásának paramétereiként adódó D nem más, mint a közönséges diffúziós együttható.

Vesztergombi György