III. Differenciálszámítás

A differenciálszámítás számunkra elsősorban arra való, hogy megállapítsuk, hogyan változnak a (fizikai) kémiában nagy számban előforduló (többváltozós) függvények. A differenciálszámítás megadja a változás sebességét bármely kiszemelt pontban. Hangsúlyozandó, hogy nem a változás nagyságát, hanem annak sebességét kapjuk meg. A $\mathrm{d}y/\mathrm{d}x$ kifejezés egyetlen mennyiség, nem pedig $\mathrm{d}y$ és $\mathrm{d}x$ aránya, de azért gyakran előfordul, hogy jogosan írjuk, hogy pl. $\mathrm{d}y = y'(x)\mathrm{d}x$, ahol $\mathrm{d}y$ y infinitezimális megváltozása.

Fogalmak, definíciók

(a) az $y = y(x)$ **deriváltját** a következő kifejezés adja: $y'(x) = \lim\limits_{\Delta x \to 0} \dfrac{\Delta y}{\Delta x}$

(b) differenciálási szabályok (ld. még későbbi táblázat):

a differenciálás mint **lineáris operátor**: $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(f+g\right) = \dfrac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} + \dfrac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}x}$ és $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(kf\right) = k\dfrac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}$

szorzási szabály: ha $y(x) = u(x)v(x)$, akkor $\dfrac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = \dfrac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}v + u\dfrac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}x} = u'v + uv'$

hányados szabály: ha $y(x) = u(x)/v(x)$, akkor $y' = \dfrac{v\left(\dfrac{du}{dx}\right) - u\left(\dfrac{dv}{dx}\right)}{v^2} = \dfrac{vu' - uv'}{v^2}$

láncszabály: amennyiben $y = y(z)$ és $z = z(x)$, úgy $\dfrac{dy}{dx} = \dfrac{dy}{dz} \times \dfrac{dz}{dx}$

(c) alapvető függvények derivált függvényei

függvény, $y(t)$	derivált, y'	függvény, $y(t)$	derivált, y'
konstans	0	$\cos t$	$-\sin t$
t^n	nt^{n-1}	$\mathrm{tg}\, t$	$1/\cos t$
e^t	e^t	$\mathrm{sh}\, t$	$\mathrm{ch}\, t$
e^{-t}	$-e^{-t}$	$\mathrm{ch}\, t$	$\mathrm{sh}\, t$
e^{at}	ae^{at}		
$\ln t$	$1/t$		
$\sin t$	$\cos t$		

(d) **középérték tétel 1**: amennyiben $f(x)$ folytonos a zárt $[a,b]$ intervallumon és differenciálható a nyitott (a,b) intervallumon, valamint fennáll, hogy $f(a) = f(b)$, úgy kell lennie legalább egy ζ pontnak (a,b)-ben, melyre igaz, hogy $f'(\zeta) = 0$

(e) **középérték tétel 2**: amennyiben $f(x)$-nek az első n+1 derivált függvénye létezik az $[a,b)$ intervallumon, úgy tetszőleges $x \in [a,b)$ esetén létezik legalább egy olyan ζ pontja az $[a,b)$ intervallumnak, melyre fennáll, hogy

$$f(x) = f(a) +$$
$$+ f'(a)(x-a) + \frac{f''(a)}{2!}(x-a)^2 + \frac{f^{(3)}(a)}{3!}(x-a)^3 + \ldots + \frac{f^{(n)}(a)}{n!}(x-a)^n + \frac{f^{(n+1)}(\zeta)}{(n+1)!}(x-a)^{n+1}$$

amely a véges, (n + 1)-elemű Taylor-sor maradéktaggal ($R_n = \frac{f^{(n+1)}(\zeta)}{(n+1)!}(x-a)^{n+1}$) kibővített felírása

(f) **parciális deriválás**: a differenciálás megismert szabályai kiterjeszthetőek többváltozós függvényekre is, pl. $f(x,y)$ kétváltozós függvény esetében, amennyiben a megfelelő határok léteznek, $f_x = \frac{\partial f}{\partial x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x+\Delta x, y) - f(x,y)}{\Delta x}$ és $f_y = \frac{\partial f}{\partial y} = \lim_{\Delta y \to 0} \frac{f(x, y+\Delta y) - f(x,y)}{\Delta y}$

(g) **teljes differenciál**: több-változós függvény esetén azt az alábbi módon definiáljuk:

$$d\phi = \frac{\partial \phi}{\partial x_1}\Delta x_1 + \frac{\partial \phi}{\partial x_2}\Delta x_2 + ... + \frac{\partial \phi}{\partial x_n}\Delta x_n$$

(h) függvény kombinációk differenciálása

Típus	szabály
függvény szorzása számmal	$\frac{d}{dx}(au) = a\frac{du}{dx}$
függvények összege	$\frac{d}{dx}(u+v) = \frac{du}{dx} + \frac{dv}{dx}$
szorzatfüggvény	$\frac{d}{dx}(uv) = u\frac{dv}{dx} + v\frac{du}{dx}$
hányadosfüggvény	$\frac{d}{dx}\left(\frac{u}{v}\right) = \frac{\left(v\frac{du}{dx} - u\frac{dv}{dx}\right)}{v^2}$
láncszabály	$\frac{d}{dx}f(u) = \frac{df}{du}\cdot\frac{du}{dx}$
inverz szabály	$\frac{dx}{dy} = \frac{1}{\left(\frac{dy}{dx}\right)}$ vagy $\frac{dx}{dy}\times\frac{dy}{dx} = 1$

(i) a láncszabály hatásának szemléltetése

típus	függvény	derivált
u hatványa	u^a	$au^{a-1}\dfrac{du}{dx}$
trigonometrikus	sin u	$\cos u\dfrac{du}{dx}$
	cos u	$-\sin u\dfrac{du}{dx}$
	tg u	$\sec^2 u\dfrac{du}{dx}$
exponenciális	e^u	$e^u\dfrac{du}{dx}$
logaritmikus	$\ln u$	$\dfrac{1}{u}\dfrac{du}{dx}$

(j) az egymás utáni (szukcesszív) differenciálás szabályai megegyeznek az egyszeri differenciálás szabályaival (egy n-edrendű polinomnak csak az első n deriváltja nem zérus); mind a $\dfrac{d}{dx}\left(\dfrac{dy}{dx}\right)=\dfrac{d^2y}{dx^2}$, mind a $f'(x), f''(x), f'''(x),...$ jelölés elterjedt a magasabb deriváltak megadására

Mintafeladatok

- Adja meg d*y*/d*x*-t a következő függvénykapcsolat esetére: $x^2 y - e^{2x} = \sin y$.
  Megoldás:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(x^2 y) - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(e^{2x}) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\sin y$$

$$x^2\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} + 2xy - 2e^{2x} = \cos y\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} \qquad .$$

$$\left(x^2 - \cos y\right)\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = 2e^{2x} - 2xy \Rightarrow \underline{\underline{\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = \frac{2e^{2x} - 2xy}{x^2 - \cos y}}}$$

- Ha ismerjük a következő határértéket, $\lim\limits_{b\to 0}\left(1+b\right)^{1/b} = e = 2{,}7182818\ldots$, akkor bizonyítsuk be, hogy $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\ln u = \frac{1}{u}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}$.
  Megoldás: Legyen $u\left(x+\Delta x\right) = u + \Delta u$ (természetesen $\lim\limits_{\Delta x\to 0}\Delta u = 0$), ekkor

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\ln u = \lim_{\Delta x\to 0}\left[\frac{\ln(u+\Delta u) - \ln u}{\Delta x}\right] = \lim_{\Delta x\to 0}\left\{\frac{u}{u\Delta u}\left[\ln\left(\frac{u+\Delta u}{u}\right)\right]\frac{\Delta u}{\Delta x}\right\} =$$

$$= \frac{1}{u}\left[\lim_{\Delta x\to 0}\ln\left(1+\frac{\Delta u}{u}\right)^{u/\Delta u}\right]\frac{du}{dx} = \frac{1}{u}\ln e\frac{du}{dx} = \frac{1}{u}\frac{du}{dx} \qquad .$$

- Bizonyítsuk be, hogy $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}e^u = e^u\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}$

Megoldás: Ha $v = e^u$, akkor $u = \ln v$, azaz

$$\frac{du}{dx} = \frac{1}{v}\frac{dv}{dx} \Rightarrow \frac{dv}{dx} = v\frac{du}{dx} \Rightarrow \underline{\underline{\frac{d}{dx}e^u = e^u\frac{du}{dx}}}$$

Gyakorló feladatok

- Differenciálja az $y = ax^2 + bx + c$ kvadratikus függvényt.
- Bizonyítsa be a hányadosszabályt a szorzatszabály segítségével!
- Számolja ki a $\lim\limits_{\Delta x \to 0} \dfrac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x}$ definíció alapján az x^3 függvény deriváltját.
- Mutassa meg a láncszabály segítségével, hogy amennyiben $y = \ln f(x)$, úgy $\dfrac{dy}{dx} = \dfrac{f'(x)}{f(x)}$.
- Ellenőrizze a deriválásra vonatkozó szorzatszabályt az $f(x) = x^2 x^3$ függvény segítségével.
- Határozza meg az alábbi függvények derivált függvényét (a megoldások zárójelben)!
    1. $f(x) = 3x^5 + 2x^4 - 3x^3 + 2x^2 - x + 8$ $(f'(x) = 15x^4 + 8x^3 - 9x^2 + 4x - 1)$
    2. $f(x) = \text{tg}x \cdot \text{arcsin}x$ $(f'(x) = \frac{1}{\cos^2 x}\text{arcsin}x + \text{tg}x\ \frac{1}{\sqrt{1-x^2}})$
    3. $f(x) = 2^x \cdot \ln x \cdot \cos x$ $(f'(x) = 2^x \ln 2 \ln x \cos x + 2^x \frac{1}{x} \cos x - 2^x \ln x \sin x)$
    4. $f(x) = \sin(2x+3)$ $(f'(x) = \cos(2x+3) \cdot 2)$
    5. $f(x) = e^{3(x^2-2x)}$ $(f'(x) = e^{3(x^2-2x)} \cdot (6x-6))$
    6. $f(x) = \text{tgln}\frac{1}{x}$ $(f'(x) = \frac{-1}{x\cos^2 \ln\frac{1}{x}})$
    7. $f(x) = \ln\sqrt{\frac{1+x}{1-x}}$ $(f'(x) = \frac{1}{1-x^2})$
    8. $f(x) = e^x \cdot (\sin x + \cos x)$ $(f'(x) = e^x \cdot (\sin x + \cos x) + e^x \cdot (\cos x - \sin x))$
    9. $f(x) = \sqrt[5]{x^3} \cdot \ln x + 3 \cdot 2^x$ $(f'(x) = \frac{3}{5}x^{-\frac{2}{5}} \cdot \ln x + x^{\frac{3}{5}} \cdot \frac{1}{x} + 3 \cdot 2^x \cdot \ln 2)$
    10. $f(x) = \frac{5\sin x}{1+\cos x}$ $(f'(x) = \frac{5\cos x\,(1+\cos x) + 5\sin^2 x}{(1+\cos x)^2})$
    11. $f(x) = \frac{\sin x + \cos x}{\sin x - \cos x}$ $(f'(x) = \frac{-2}{(\sin x - \cos x)^2})$
    12. $f(x) = \frac{e^x - \cos x}{x\,e^x}$ $(f'(x) = \frac{(e^x + \sin x)(xe^x) - (e^x - \cos x)(e^x + xe^x)}{(xe^x)^2})$
    13. $f(x) = \sin x^2$ $(f'(x) = \cos x^2 \cdot 2x)$
    14. $f(x) = \sin^2 x$ $(f'(x) = 2 \cdot \sin x \cdot \cos x)$
    15. $f(x) = e^{\sin(x+\frac{\pi}{2})}$ $(f'(x) = e^{\sin\left(x+\frac{\pi}{2}\right)} \cdot \cos(x + \frac{\pi}{2}))$
    16. $f(x) = \ln \ln^2 x^3$ $(f'(x) = \frac{1}{\ln^2 x^3} \cdot 2 \cdot \ln x^3 \cdot \frac{1}{x^3} \cdot 3x^2)$

- Ellenőrizze a deriválásra vonatkozó hányadosszabályt az $f(x) = x^4 / x^2$ függvény segítségével.
- Az inverzfüggvény deriválására vonatkozó szabály segítségével határozza meg az *arcsin* függvény deriváltját (segítség: $\cos x = \sqrt{1-\sin^2 x}$).
- Deriválja az $f(x) = \ln(\cos(-x^2))$, az $f(x) = x^x$, valamint az $f(x) = \arcsin(\sin(g(x)))$ ($g(x) \in [-\pi, +\pi]$) függvényeket.
- Reális gázok leírására gyakran alkalmazzák az ún. **van der Waals-egyenletet**, mely szerint $\left(p + \frac{a}{V_\mathrm{m}^2}\right)(V_\mathrm{m} - b) = RT$, ahol a szimbólumok a hagyományos jelentésükkel rendelkeznek. Mi a p_c, V_mc és T_c kritikus állapotjelzők értéke, amennyiben a kritikus izoterma vízszintes érintőjű inflexiós pontjában $p'(V_\mathrm{mc}) = 0$ és $p''(V_\mathrm{mc}) = 0$ egyszerre áll fenn? Mutassa meg, hogy a kritikus pontban a kritikus kompresszibilitási tényező ($Z_\mathrm{c} = \frac{p_\mathrm{c} V_\mathrm{mc}}{RT_\mathrm{c}}$) állandó értékű.
- Egy egyenes vonalú mozgást végző részecske *t* idő alatt $s = 2t^2 - 3t$ utat jár be. Adja meg a *t*-edik időpillanatban a részecske sebességét és gyorsulását. Írja le a mozgást.
- Egy $r = 2$ sugarú kör kerületén mozgó részecske által *t* idő alatt megtett távolságot az $s = 3t^3 - 3t^2 - 2t$ összefüggés írja le. Adja meg a szögsebességet és a kör középpontja körüli gyorsulást.
- Egy kétatomos molekula rezgése úgy írható le, mint egyetlen μ tömegű pont („redukált tömeg") mozgása az egyensúlyi távolságtól való eltérést mérő $x = r - r_e$ koordináta mentén. Határozza meg a μ tömegpontra ható erőt, amennyiben a mozgást leíró potenciál alakja (a) $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$ („**harmonikus lineáris oszcillátor**"), illetve (b) $V(x) = D(1 - e^{-ax})^2$ („**Morse-potenciál**"). Mi a Morse-potenciálban szereplő *D* paraméter szemléletes fizikai jelentése?
- Határozza meg a $V(r) = D_e\left(1 - \exp(-\beta(r - r_e))\right)^2$ Morse-potenciál esetén a kvadratikus erőállandót (a potenciálnak a koordináta szerinti második deriváltját) az egynsúlyi (r_e) pozícióban.
- A **Lennard-Jones (6-12) potenciált**, $V(r) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{r_0}{r}\right)^{12} - \left(\frac{r_0}{r}\right)^6\right]$, gyakran alkalmazzák a nem kovalens jellegű intermolekuláris kölcsönhatások leírására. (a) Határozza meg a potenciális energia minimumában a mag-mag (*r*) távolságot. (b) Ennek ismeretében vezesse le a kvadratikus erőállandóra (a potenciálnak a koordináta szerinti második deriváltja) vonatkozó összefüggést.

- Sok fizikai rendszerben az $\boldsymbol{F}$ erő felírható, mint egy V potenciál gradiense, $F(x) = -dV/dx$. (a) Mi az a V potenciál, ami a gravitációs erőnek felel meg, amennyiben $F_{\mathrm{gr}}(r) = \gamma \frac{m_1 m_2}{r^2}$? (b) Mi az a V_{em} potenciál, amely az elektromágneses kölcsönhatást leíró $F_{\mathrm{em}}(r) = k \frac{m_1 m_2}{r^2}$ erőnek felel meg?

III.1 Parciális differenciálás

Többváltozós függvények esetében a differenciálást minden egyes változó szerint elvégezhetjük, ekkor parciális differenciálásról, „parciális deriválásról” beszélünk. A differenciálást nem kell elvégezni az összes változó alapján, parciális differenciált kapunk akkor is, ha a többváltozós függvényt csak egyik változója szerint differenciáljuk.

Fogalmak, definíciók

(a) az $f(x,y)$ kétváltozós függvény első parciális differenciálhányadosát a következő kifejezés definiálja: $\dfrac{\partial f}{\partial x} = \lim\limits_{h \to 0} \dfrac{f(x+h,y) - f(x,y)}{h}$

(b) a magasabb rendű deriváltak egy lehetséges jelölése: f_{xx}, f_{xy}, stb.

(c) Young-tétel (nem precízen, hanem lazán fogalmazva): A vegyes parciális deriváltak értéke független a parciális deriválások sorrendjétől, pl.: $\dfrac{\partial^2 f(x,y)}{\partial x \partial y} = \dfrac{\partial^2 f(x,y)}{\partial y \partial x}$

Mintafeladatok

- Adjuk meg a következő függvénykapcsolat esetére az első parciális deriváltakat: $f(x,y) = \dfrac{x}{x^2+y^2}$.

  Megoldás: $\dfrac{\partial f}{\partial x} = \dfrac{1\cdot(x^2+y^2) - x\cdot 2x}{(x^2+y^2)^2} = \dfrac{y^2-x^2}{(x^2+y^2)^2}$

  $\dfrac{\partial f}{\partial y} = -\dfrac{x\cdot 2y}{(x^2+y^2)^2} = -\dfrac{2xy}{(x^2+y^2)^2}$

- A **síkbeli polárkoordináták** esetében ismerjük, hogy $r(x,y) = \sqrt{x^2+y^2}$. Képezzük az r függvény első deriváltjait.

  Megoldás: $\dfrac{\partial r}{\partial x} = \dfrac{1}{2}\cdot\dfrac{2x}{\sqrt{x^2+y^2}} = \dfrac{x}{r}$ és ennek megfelelően $\dfrac{\partial r}{\partial y} = \dfrac{y}{r}$. Minthogy tudjuk, hogy $\dfrac{x}{r} = \cos\alpha$ és $\dfrac{y}{r} = \sin\alpha$, így $\left(\dfrac{\partial r}{\partial x}\right)^2 + \left(\dfrac{\partial r}{\partial y}\right)^2 = \cos^2\alpha + \sin^2\alpha = 1$, azaz a parciális differenciálhányadosok négyzetösszege 1-re normált.

- A H-atom elektron alapállapotában a nem normált hullámfüggvényre fennáll, hogy $\psi(x,y,z) = e^{-r} = \exp\left(-\sqrt{x^2+y^2+z^2}\right)$. Képezzük az egyik első deriváltat.

Megoldás: $\underline{\underline{\dfrac{\partial \psi}{\partial x}}} = e^{-r}\left(-\dfrac{1}{2}\right)\dfrac{2x}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} = \underline{\underline{-e^{-r}\dfrac{x}{r}}}$ (a kissé vegyes jelölés nem igazán szép, de hasznos).

Gyakorló feladatok

- Írja fel az alábbi függvények *x* és y szerinti parciális derivált függvényeit!

  1. $f(x,y)=\frac{x^y+y^x}{x^y-y^x}$

  (Megoldás:
  $$\frac{\partial f}{\partial x}=\frac{(y\,x^{y-1}+y^x\,lny)(x^y-y^x)-(x^y+y^x)(y\,x^{y-1}-y^x\,lny)}{(x^y-y^x)^2}$$
  $$\frac{\partial f}{\partial y}=\frac{(x^y lnx+xy^{x-1})(x^y-y^x)-(x^y+y^x)(x^y lnx-xy^{x-1})}{(x^y-y^x)^2}\ )$$

  2. $f(x,y)=\mathrm{arctg}\frac{x}{y}$

  (Megoldás: $\frac{\partial f}{\partial x}=\frac{1}{1+\frac{x^2}{y^2}}\frac{1}{y}$ $\quad\frac{\partial f}{\partial y}=\frac{1}{1+\frac{x^2}{y^2}}\frac{-x}{y^2}$)

  3. $f(x,y)=x^{y^2}$

  (Megoldás: $\frac{\partial f}{\partial x}=y^2\,x^{y^2-1}$ $\quad\frac{\partial f}{\partial y}=x^{y^2}lnx\;2y$)

- Írja fel a következő függvények összes másodrendű parciális derivált függvényét!

  1. $f(x,y)=x\ln(x\,y)-y\ln(x\,y)$

  (Megoldás: $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}=\frac{1}{x}+\frac{y}{x^2}$ $\quad\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}=\frac{-x}{y^2}+\frac{1}{y}$ $\quad\frac{\partial^2 f}{\partial x\partial y}=\frac{1}{y}-\frac{1}{x}$)

  2. $f(x,y)=x^3 siny+y^3 sinx$

  (Megoldás:
  $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}=6x\,\mathrm{sin}y-y^3\mathrm{sin}x$ $\quad\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}=6y\,\mathrm{sin}x-x^3\mathrm{sin}y$ $\quad\frac{\partial^2 f}{\partial x\partial y}=3x^2\mathrm{cos}y+3y^2\mathrm{cos}x$)

  3. $f(x,y)=\ln(x+e^y)$

  (Megoldás: $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}=\frac{-1}{(x+e^y)^2}$ $\quad\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}=\frac{e^y(x+e^y)-e^{2y}}{(x+e^y)^2}$ $\quad\frac{\partial^2 f}{\partial x\partial y}=\frac{-e^y}{(x+e^y)^2}$)

- Ellenőrizze a Young-tételt az $f(x,y)=x+x^2y^3$, valamint az $f(x,y)=\cos(x)\ln(xy)$ függvényeken.

- Az ideális gáz állapotegyenlete $pV=nRT$, ahol *T* a termodinamikai hőmérséklet, *V* a gáz térfogata, *R* az egyetemes gázállandó, *p* a gáz nyomása, *n* pedig a gázt alkotó molekulák teljes anyagmennyisége. Határozza meg az ideális gáz α_p **hőtágulási együtthatóját** ($\alpha_p=\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p$), valamint κ_T **izoterm kompresszibilitási együtthatóját** ($\kappa_T=-\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T$).

- Egységnyi anyagmennyiségű, szilárd fázisú anyag U belső energiáját és p nyomását az $U(T,V)=CT-\frac{D}{2}(V-V_0)^2$ és $p=AT-D(V-V_0)$ képletekkel számolhatjuk, ahol T a termodinamikai hőmérséklet, V a test térfogata, C, D és V_0 állandók. (Megjegyzés: az utóbbi egyenletet, ahol a nyomás, a hőmérséklet és a térfogat közötti összefüggést írjuk le, szokás állapotegyenletnek nevezni. Ideális gázok esetén ez a jól ismert $pV=nRT$ összefüggés). Határozza meg a test C_V **hőkapacitását** ($C_V=\left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V$), α_p hőtágulási együtthatóját ($\alpha_p=\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p$), valamint κ_T izoterm kompresszibilitási együtthatóját ($\kappa_T=-\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T$).
- Kétatomos molekulákból álló, magas hőmérsékletű gáz esetén a molekulák forgásának szabadenergia járuléka $F(T,V,N)=-kNT\ln\left(\frac{8\pi^2\theta kT}{h^2}\right)$ alakban írható fel, ahol k a Boltzmann-állandó, T a termodinamikai hőmérséklet, N a molekulák száma, θ a molekula tehetetlenségi nyomatéka és h a Planck-állandó. Számolja ki, mekkora a molekulák forgásának járuléka a gáz p nyomásához ($p=-\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{T,N}$), S entrópiájához ($S=-\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V,N}$), valamint μ kémiai potenciáljához ($\mu=\left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{V,T}$).
- Kétatomos molekulákból álló, alacsony hőmérsékletű gáz esetén a molekulák forgásának szabadenergia járuléka $F(T,V,N)=-3kNT\exp\left(-\frac{h^2}{4\pi^2\theta kT}\right)$, ahol k a Boltzmann-állandó, T a termodinamikai hőmérséklet, N a molekulák száma, θ a molekula tehetetlenségi nyomatéka és h a Planck-állandó. Számolja ki, mekkora a molekulák forgásának járuléka a gáz p nyomásához ($p=-\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{T,N}$), S entrópiájához ($S=-\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V,N}$), valamint μ kémiai potenciáljához ($\mu=\left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{V,T}$).
- Egy mól ideális gáz esetén a P nyomás két változó, T és V függvénye: $P=RT/V$. Adja meg a $\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V$ és a $\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T$ parciális differenciálhányadosokat.

- Kétatomos molekulákból álló gáz esetén harmonikus közelítésben a molekulák rezgésének szabadenergia járuléka $F(T,V,N) = N\,kT\ln\left(2sh\left(\frac{h\omega}{4\pi\,kT}\right)\right)$, ahol k a Boltzmann-állandó, T a termodinamikai hőmérséklet, N a molekulák száma, ω a molekula rezgésének körfrekvenciája és h a Planck-állandó. Számolja ki, mekkora a molekulák rezgésének járuléka a gáz p nyomásához ($p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{T,N}$), S entrópiájához ($S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V,N}$), valamint μ kémiai potenciáljához ($\mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{V,T}$).
- Aszimmetrikus pörgettyűként viselkedő molekulákból álló, magas hőmérsékletű gáz esetén a molekulák forgásának szabadenergia járuléka $F(T,V,N) = -N\,kT\ln\left(\frac{\sqrt{\pi}}{\gamma}\left(\frac{8\pi^2 kT}{h^2}\right)^{3/2}\sqrt{\det\theta}\right)$, ahol k a Boltzmann-állandó, N a molekulák száma, T a termodinamikai hőmérséklet, θ a molekula tehetetlenségi nyomaték tenzora, h a Planck-állandó és γ a gázt alkotó molekulatípus szimmetria-tulajdonságaitól függő állandó. Számolja ki, mekkora a molekulák forgásának járuléka a gáz p nyomásához ($p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{T,N}$), S entrópiájához ($S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V,N}$), valamint μ kémiai potenciáljához ($\mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{V,T}$).
- Alacsony hőmérsékletű fémek esetén a fémben lévő elektronok energiája $E(T,V,N) = N\varepsilon_{\mathrm{F}}\frac{3}{5}\left[1+\frac{5\pi^2}{12}\left(\frac{T}{T_{\mathrm{F}}}\right)^2\right]$ alakkal közelíthető, ahol N az elektronszám, T a termodinamikai hőmérséklet, T_{F} és ε_{F} pedig anyagi állandók (ún. **Fermi-hőmérséklet** és **Fermi-energia**). Adja meg a hőkapacitást ($C_{\mathrm{V}} = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V$) a hőmérséklet függvényében.
- A Young-tétel segítségével igazolja az $F(T,V,N)$-re vonatkozó $\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_{T,N} = \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_{V,N}$ és a $G(T,p,N)$-re vonatkozó $\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_{T,N} = -\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_{p,N}$ ún. **Maxwell-relációkat**.

- A van der Waals-gázegyenlet alakja $P = g(V,T) = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^2}$. (a) Adja meg a $g(V,T)$ nyomás függvény értelmezési tartományát. (b) Határozza meg a $\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T$, $\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V$ és a $\left(\frac{\partial^2 P}{\partial V^2}\right)_T$ parciális differenciálhányadosokat.
- Legyen az általában $L(q,\dot{q},t)$ alakban felírt **Lagrange-függvény** alakja $L(x,\dot{x},t) = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x)$, ahol m az x koordináta mentén mozgó részecske tömege, V a potenciál és a „$\dot{}$" az idő (t) szerinti deriválást jelöli. A **Lagrange-egyenlet** $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right)_{q_i} - \left(\frac{\partial L}{\partial q_i}\right)_{\dot{q}_i} = 0$ (általános) alakja segítségével mutassa meg, hogy $F = -\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x} = ma = m\ddot{x}$.

III.2 Teljes differenciál

Mintafeladatok

- Az ideális gáztörvény ($pV = RT$) esetére adjuk meg, hogy mennyivel változik a p nyomás, amennyiben a T termodinamikai hőmérséklet ΔT-vel, míg a V térfogat ΔV-vel változik.

  Megoldás: $p(T,V) = \dfrac{RT}{V} \Rightarrow dp = \dfrac{\partial p}{\partial T} dT + \dfrac{\partial p}{\partial V} dV$, azaz

  $$\underline{\underline{\Delta p}} = \frac{R}{V}\Delta T - \frac{RT}{V^2}\Delta V = \underline{\underline{\frac{R}{V}\left(\Delta T - \frac{T}{V}\Delta V\right)}}.$$

Gyakorló feladatok

- Írja fel az alábbi függvények teljes differenciálját!
  1. $f(x,y) = x^2 - y^2$ (Megoldás: $df = 2x\,dx - 2y\,dy$)
  2. $f(x,y,z) = \frac{xy}{z}$ (Megoldás: $df = \frac{y}{z}\,dx + \frac{x}{z}\,dy - \frac{xy}{z}dz$)
  3. $f(x,y) = \frac{x}{z}$ (Megoldás: $df = \frac{y\,dx - x\,dy}{y^2}$)
  4. $f(x,y) = ln\sqrt{x^2+y^2}$ (Megoldás: $df = \frac{x\,dx + y\,dy}{x^2+y^2}$)

- Hogyan változik a $V(p,T) = A(T-T_0)^3 - Be^{-(p-p_0)}$ állapotegyenletű polimer térfogata, ha hőmérsékletét és nyomását kicsit megváltoztatjuk (A, B, T_0 és p_0 konstansok)?
- Hogyan változik meg 1 mol reális gáz hőmérséklete, ha térfogatát és nyomását „picivel” megváltoztatjuk? Az állapotegyenlet: $\left(p + \dfrac{a}{V^2}\right)(V - b) = RT$, ahol a, b és R konstansok.

Javasolt irodalom

Bárczy Barnabás: Differenciálszámítás, Műszaki Könyvkiadó.