VI. Vektoralgebra és vektoranalízis

A fizikai kémiában gyakran találkozunk olyan mennyiségekkel, melyeknek csak nagysága van, ilyen például a tömeg, az idő és a hőmérséklet. Ezek **skalár** mennyiségek. Értékük a választott koordintátarendszertől és annak orientációjától független. Ugyanakkor több, számunkra érdekes mennyiség jellemzéséhez a nagyságon kívül egy irány is tartozik. Ilyen például az elmozdulás, a sebesség, a gyorsítás, az erő, az impulzus (lendület) és az impulzusnyomaték (perdület), az elektromos, illetve a mágneses tér (az elektromágneses tér). Nagysággal és iránnyal jellemezhetők a **vektor** mennyiségek (másképpen irányított szakasz). A skalár mennyiségektől történő megkülönböztetés érdekében a vektorokat félkövér betűkkel jelöljük, folyóírásban pedig gyakran nyíllal a mennyiség jele felett.

Fogalmak

(a) a vektorok kényelmesen reprezentálhatók egy irányított szakasszal (nyíllal), melynek hossza a vektor nagyságával egyezik meg, iránya pedig a vektor irányával az R^n-dimenziós **vektortérben** (általában n = 2 (sík) illetve n = 3 (3D Euklideszi tér) a szokásos választás); vektorok összeadása ekkor a vektorok egymás után helyezését jelenti (első vektor „végéhez" illesztjük a második vektor „elejét"), majd a háromszög szabály szerint az összeg vektor az első vektor kiindulási pontjától a második vektor végpontjáig tart

(b) az **egységvektorok** a választott koordinátarendszer (pl. Descartes-koordinátarendszer) tengelyei irányába mutatnak, kijelölik a pozitív és negatív irányokat, hosszuk egységnyi (azaz nem csak **ortogonálisak**, de **ortonormáltak** egymásra, $\mathbf{e}_m \cdot \mathbf{e}_n = \delta_{mn}$)

(c) vektoralgebra szabályai/axiómái (**V** vektortér, **a**, **b** és **c** vektorok, m és n skalárok):

V0. $m\mathbf{a} \in \mathbf{V}$, $(\mathbf{a}+\mathbf{b}) \in \mathbf{V}$	**V** zárt a skalárral szorzásra és a vektorok összeadására nézve
V1. $\mathbf{a} + \mathbf{b} = \mathbf{b} + \mathbf{a}$	a vektorok összeadása kommutatív
V2. $\mathbf{a} + (\mathbf{b} + \mathbf{c}) = (\mathbf{a} + \mathbf{b}) + \mathbf{c}$	a vektorok összeadása asszociatív
V3. $\mathbf{a} + \mathbf{0} = \mathbf{a}$	a **0** az összeadás azonossága
V4. $0\mathbf{a} = \mathbf{0}$	
V5. $1\mathbf{a} = \mathbf{a}$	az 1 a szorzás azonossága
V6. $m(n\mathbf{a}) = (mn)\mathbf{a} = n(m\mathbf{a})$	
V7. $m(\mathbf{a} + \mathbf{b}) = m\mathbf{a} + m\mathbf{b}$	a számmal szorzás disztributíva
V8. $(m + n)\mathbf{a} = m\mathbf{a} + n\mathbf{a}$	vektorok összeadására nézve

A V1-V3 szabályok a vektorok összeadására, a V4-V6 szabályok a skalárral történő szorzásra vonatkoznak. A V7 és V8 szabályok a két művelet kölcsönhatását definiálják. Ezeket a szabályokat könnyű megjegyezni, mert lényegében azonosak a számokra megtanult műveleti axiómákkal. A V0-V8 szabályokat kielégítő tetszőleges objektumok **vektorteret** képeznek. De megjegyzendő, hogy a szabályok egyelőre semmit nem mondanak két irányított szakasz (vektor) szorzásáról.

(d) amennyiben az adott **V** vektortérbeli $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \ldots, \mathbf{v}_r$ vektorok $a_1\mathbf{v}_1 + a_2\mathbf{v}_2 + \ldots + a_r\mathbf{v}_r$ **lineárkombinációja** csak a triviális $a_1 = a_2 = \ldots = a_r = 0$ választás mellett nulla, akkor a vektorok **lineárisan függetlenek**, míg ellenkező esetben a vektorok lineárisan összefüggőek

(e) **bázis**, az adott koordinátarendszert egyértelműen kifeszítő egységvektorok összességét bázisnak, a báziselemeket pedig bázisvektoroknak nevezzük; másképpen egy **V** vektortérben lévő $\Im = \{\mathbf{v_1}, \mathbf{v_2}, ..., \mathbf{v}_n\}$ véges n-elemű halmazt a **V** bázisának nevezünk, amennyiben minden **V**-beli vektor a $\Im$-beli vektorok linárkombinációjával egy és csakis egy módon állítható elő (véges dimenziójú terek esete, de vannak végtelen dimenziójú terek is)

(f) amennyiben egy **V** vektorteret n bázisvektor feszít ki, úgy a **V** dimenziója n: $\dim \mathbf{V} = n$ (nyilván $\mathbf{V} = \{\mathbf{0}\}$ dimenziója 0)

(g) az $\mathbf{A} = \mathbf{e}_x A_x + \mathbf{e}_y A_y + \mathbf{e}_z A_z$ és $\mathbf{B} = \mathbf{e}_x B_x + \mathbf{e}_y B_y + \mathbf{e}_z B_z$ vektorok összeadására a grafikus összeadási technika mellett az alábbi algebrai összefüggés vonatkozik: $\mathbf{A} \pm \mathbf{B} = \mathbf{e}_x (A_x \pm B_x) + \mathbf{e}_y (A_y \pm B_y) + \mathbf{e}_z (A_z \pm B_z)$

(h) vektorok felírásához többnyire elegendő a **komponensek** megadása és az egységvektorok elhagyása, pl. $\mathbf{A} = (A_x, A_y, A_z)$, a komponensek lehetnek valós és képzetes számok is (vagy általában bármilyen más objektumok)

(i) vektor szorzása számmal csak a vektor nagyságát változtatja meg, irányát nem

(j) az $\mathbf{A} = \mathbf{e}_x A_x + \mathbf{e}_y A_y + \mathbf{e}_z A_z$ vektor **hossza** R^3-ban $|\mathbf{A}| = \left(A_x^2 + A_y^2 + A_z^2\right)^{1/2}$, ezt gyakran **normának** nevezik

(k) vektorok R^3-ban
egyenlőség: **A** = **B**, ekkor $A_i = B_i$, $i = 1, 2, 3$
összeadás: **A** + **B** = **C**, ekkor $A_i + B_i = C_i$, $i = 1, 2, 3$
skalárral történő szorzás: $a\mathbf{x} \leftrightarrow (ax_1, ax_2, ax_3)$, a valós ($|a\mathbf{v}| = |a||\mathbf{v}|$, amennyiben $a < 0$, a vektor orientációja is megváltozik, nem csupán a hossza)
negatív vektor: $-\mathbf{x} = (-1)\mathbf{x} \leftrightarrow (-x_1, -x_2, -x_3)$
null vektor: $\mathbf{0} \leftrightarrow (0,0,0)$

Mintafeladatok

- Adjuk össze az **a** = (k 25 3 a) és **b** = (e –15 –3 b) 4-dimenziós vektorokat ($\mathbf{a},\mathbf{b} \in \mathrm{R}^4$).

  Megoldás: $(\mathbf{a}+\mathbf{b})^T = \begin{pmatrix} k+e \\ 10 \\ 0 \\ a+b \end{pmatrix}$.

- Normáljuk 1-re a **v** = (1, 2, 3) vektort.

  $\|v\|^2 = N = 1+4+9 = 14$

  Megoldás: $\mathbf{e} = \frac{1}{\sqrt{N}}\mathbf{v}$

  $\mathbf{e} = \left(\frac{1}{\sqrt{14}}, \frac{2}{\sqrt{14}}, \frac{3}{\sqrt{14}}\right)$

Gyakorló feladatok

- Találja meg azt az **A** vektort, mely merőleges az **U** = 2**i** + **j** – **k** és a **V** = **i** – **j** + **k** vektorokra. Mi a helyzet akkor, ha azt is megköveteljük, hogy ennek a vektornak a hossza egységnyi legyen?
- Bizonyítsa be a V1. szabályt!
- Hány dimenziós térrel lehet reprezentálni egy mól He atom fázisterét?

V.1 Skalárszorzat

Fogalmak

(a) két vektor, **A** és **B**, **skalárszorzata** egy szám, amelyre fennáll, hogy $\mathbf{A}\cdot\mathbf{B} = AB\cos\theta$, ahol θ a két vektor által bezárt szög, míg A és B a vektorok hosszát jelöli

(b) a skalárszorzás eredménye kiszámítható, mint $\mathbf{A}\cdot\mathbf{B} \equiv \sum_i A_i B_i = \sum_i B_i A_i = \mathbf{B}\cdot\mathbf{A}$, amennyiben komponenseik adott koordinátarendszerben ismertek, amiből látszik, hogy a skalárszorzás kommutatív

(c) a skalárszorzat egyik leggyakoribb alkalmazása a munka = erő × kitérítés × cos θ kifejezés kapcsán történik, amelyet úgy interpretálunk, hogy a kitérítést megszorozzuk az erőnek a kitérítés irányába eső projekciójával, $W = \mathbf{F}\cdot\mathbf{S}$

(d) amennyiben $\mathbf{A}\cdot\mathbf{B} = 0$ és tudjuk, hogy $\mathbf{A} \neq \mathbf{0}$ és $\mathbf{B} \neq \mathbf{0}$, úgy cos θ = 0, tehát θ = ±90°, ±270°, stb., és a két vektor egymásra merőleges (ortogonális)

(e) a skalárszorzat valóban skaláris mennyiség, azaz nem függ a koordinátarendszer elforgatásától (invariáns a forgatás műveletére)

Gyakorló feladatok

- Bizonyítsa be R^2-ben, hogy a skalárszorzat valóban invariáns a Descartes koordinátarendszer elforgatására.
- Mutassa meg, hogy $(\mathbf{A}-\mathbf{B})\cdot(\mathbf{A}+\mathbf{B}) = A^2 - B^2$.
- Bizonyítsa be a koszinusz-törvényt abból kiindulva, hogy $\mathbf{A}^2 = (\mathbf{B}-\mathbf{C})^2$.
- (Nehéz!) Két dipólusnyomaték vektor, μ_1 és μ_2, kölcsönhatását mind vektoriális,

$$V = -\frac{\boldsymbol{\mu}_1\cdot\boldsymbol{\mu}_2}{r^3} + \frac{3(\boldsymbol{\mu}_1\cdot\mathbf{r})(\boldsymbol{\mu}_2\cdot\mathbf{r})}{r^5},$$

  mind skaláris,

$$V = \frac{\mu_1\mu_2}{r^3}\left(2\cos\theta_1\cos\theta_2 - \sin\theta_1\sin\theta_2\cos\varphi\right)$$

  alakban ki lehet fejezni, ahol **r** a két dipólvektor kezdőpontját összekötő vektor, θ_1 és θ_2 az **r** és a dipólvektorok által bezárt szög, míg φ a dipól–**r** síkok elfordulását leíró diéderes szög. Mutassa meg, hogy a két kifejezés egymással ekvivalens.

V.2 Vektoriális (kereszt) szorzat

Fogalmak

(a) két vektor, **A** és **B**, **vektoriális szorzata** egy olyan $\mathbf{C} = \mathbf{A} \times \mathbf{B}$ eredményvektor, mely merőleges a két vektor által kifeszített síkra úgy, hogy az **A**, **B** és **C** vektorok jobbsodrású koordinátarendszert alkossanak, továbbá az eredményvektor hosszára igaz, hogy $C = AB \sin\theta$

(b) a vektoriális szorzás antikommutatív, $\mathbf{A} \times \mathbf{B} = -\mathbf{B} \times \mathbf{A}$

(c) az $|\mathbf{A} \times \mathbf{B}| = AB \sin\theta$ megfelel a közös kezdőpontban felvett két vektor által kifeszített parallelogramma területének

(d) a vektoriális szorzat vektor jellege az általunk megszokott geometriai tér háromdimenziós természetével van kapcsolatban (ld. geometriai algebra, pl. Clifford algebra általánosításait)

(e) a **C** vektoriális szorzat ($C_i = A_j B_k - A_k B_j$, i, j, k mind különböző és az 1,2,3-nak ciklikus permutációja) elemeinek memorizálását segíti az alábbi determináns alak:

$$\mathbf{C} = \begin{vmatrix} \mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z \\ A_x & A_y & A_z \\ B_x & B_y & B_z \end{vmatrix} \equiv \mathbf{e}_x \begin{vmatrix} A_y & A_z \\ B_y & B_z \end{vmatrix} - \mathbf{e}_y \begin{vmatrix} A_x & A_z \\ B_x & B_z \end{vmatrix} + \mathbf{e}_z \begin{vmatrix} A_x & A_y \\ B_x & B_y \end{vmatrix}$$

Gyakorló feladatok

- Amennyiben adott az alábbi három vektor, $\mathbf{P} = 3\mathbf{e}_x + 2\mathbf{e}_y - \mathbf{e}_z$, $\mathbf{Q} = -6\mathbf{e}_x - 4\mathbf{e}_y + 2\mathbf{e}_z$, és $\mathbf{R} = \mathbf{e}_x - 2\mathbf{e}_y - \mathbf{e}_z$, találjon kettőt, melyek merőlegesek és kettőt, melyek párhuzamosak, vagy ellentétes irányúak.
- Bizonyítsa be, hogy $(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) = (AB)^2 - (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})^2$.
- Ellenőrizze, hogy a $\mathbf{v} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 \end{pmatrix}$ és $\mathbf{u} = \begin{pmatrix} 3 & -1 & 0 \end{pmatrix}$ vektorok vektoriális szorzatával kapott $\mathbf{w} = \mathbf{v} \times \mathbf{u}$ vektor tényleg merőleges **u**-ra és **v**-re is.

V.3 Hármas skaláris és vektoriális szorzatok

Fogalmak

(a) három vektor, **A**, **B** és **C**, **hármas skaláris szorzata** az alábbi módon kerül definiálásra: $\mathbf{A}\cdot\left(\mathbf{B}\times\mathbf{C}\right)$, ami egy skalárt eredményez (innen az elnevezés); a zárójelet el is lehet hagyni (a gyakorlatban el is hagyják), hiszen $(\mathbf{A}\cdot\mathbf{B})\times\mathbf{C}$ egy skalár és egy vektor vektoriális szorzatát jelentené, ami nincsen definiálva

(b) könnyen belátható a magas szimmetriája ennek a kifejezésnek, hiszen $\mathbf{A}\cdot\mathbf{B}\times\mathbf{C}=\mathbf{B}\cdot\mathbf{C}\times\mathbf{A}=\mathbf{C}\cdot\mathbf{A}\times\mathbf{B}=-\mathbf{A}\cdot\mathbf{C}\times\mathbf{B}=-\mathbf{B}\cdot\mathbf{A}\times\mathbf{C}=-\mathbf{C}\cdot\mathbf{B}\times\mathbf{A}$

(c) azt is érdemes megjegyezni, hogy a skaláris és a vektoriális szorzás sorrendje is megcserélhető: $\mathbf{A}\cdot\left(\mathbf{B}\times\mathbf{C}\right)=\mathbf{A}\times\mathbf{B}\cdot\mathbf{C}$

(d) ez a kifejezés is legkönnyebben egy determináns segítségével memorizálható:

$$\mathbf{A}\cdot\mathbf{B}\times\mathbf{C}=\begin{vmatrix} A_x & A_y & A_z \\ B_x & B_y & B_z \\ C_x & C_y & C_z \end{vmatrix}$$

(e) a hármas skaláris szorzat geometriai jelentése: a közös kezdőpontban felvett három vektor által definiált paralelepipedon térfogata

(f) három vektor, **A**, **B** és **C**, **hármas vektoriális szorzata** az alábbi módon kerül definiálásra: $\mathbf{A}\times\left(\mathbf{B}\times\mathbf{C}\right)$, vektort eredményez (innen az elnevezés), és a zárójelet nem lehet elhagyni, mivel a vektoriális szorzás nem asszociatív

(g) fennáll, hogy $\mathbf{A}\times\left(\mathbf{B}\times\mathbf{C}\right)=\mathbf{B}(\mathbf{A}\cdot\mathbf{C})-\mathbf{C}(\mathbf{A}\cdot\mathbf{B})$

V.4 Nabla (del)

Az itt megadott definíciók a megszokott 3D Descartes-térre vonatkoznak, a fizikai és fizikai-kémiai alkalmazásoknak megfelelően. A legtöbb fogalmat csak Descartes-koordináták esetében definiáljuk, más koordinátarendszerekre történő (amúgy sokszor alkalmazott) általánosításuk túlmutat tárgyalásunkon.

Fogalmak

(a) **nabla (del) vektor**: $\boxed{\nabla := \mathbf{i}\frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{j}\frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{k}\frac{\partial}{\partial z} \equiv \mathbf{e}_x\frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{e}_y\frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{e}_z\frac{\partial}{\partial z}}$, differenciáló vektor operátor (mindkét tulajdonság fontos a vele történő munkálkodáskor)

(b) **gradiens** (grad, ∇), a nabla vektor skalármezőre hat és vektormezőt eredményez

(c) **divergencia** (div, $\nabla\cdot$), egyszerű kiterjesztése a gradiensnek vektor függvényekre, azaz vektormezőre hat és skalármezőt eredményez

(d) **rotáció** (curl, $\nabla\times$), vektormezőre hat és a vektoriális szorzás eredményeként vektormezőt eredményez

Legyen a φ függvénynek három változója, x, y és z. Ekkor a teljes differenciálra azt írhatjuk, hogy

$$\begin{aligned} d\varphi(x,y,z) &\equiv \varphi(x+dx, y+dy, z+dz) - \varphi(x,y,z) = \\ &= \left[\varphi(x+dx, y+dy, z+dz) - \varphi(x, y+dy, z+dz)\right] \\ &+ \left[\varphi(x, y+dy, z+dz) - \varphi(x, y, z+dz)\right] \\ &+ \left[\varphi(x, y, z+dz) - \varphi(x,y,z)\right] = \frac{\partial\varphi}{\partial x}dx + \frac{\partial\varphi}{\partial y}dy + \frac{\partial\varphi}{\partial z}dz \end{aligned}$$

Azaz azt a fontos következtetést vonhatjuk le, hogy a teljes differenciál egy skalárszorzat, melynek egyik tagja a d$\mathbf{r}$ koordináta vektor, másik tagját pedig a φ függvény iránymenti deriváltjai alkotják.

A gradiens geometriai jelentésének megértéséhez képezzük a $\nabla\varphi$ skalárszorzatát az elmozdulás $d\mathbf{r} = \mathbf{i}dx + \mathbf{j}dy + \mathbf{k}dz$ vektorával. Ekkor a következő, önmagában is tanulságos állítást kapjuk:

$$\nabla\varphi \cdot d\mathbf{r} = \frac{\partial\varphi}{\partial x}dx + \frac{\partial\varphi}{\partial y}dy + \frac{\partial\varphi}{\partial z}dz = d\varphi .$$

Most tekintsünk egy adott felület esetén két olyan közeli P és Q pontot, melyekre $\varphi(x,y,z) = C$, ahol C konstans, azaz Q távolsága P-től d$\mathbf{r}$. Természetesen, minthogy a választott felületről nem mozdulunk el, így $d\varphi = \nabla\varphi \cdot d\mathbf{r} = 0$. Ez azt mutatja, hogy a gradφ gradiensvektor merőleges a $\varphi(x,y,z) = C$ szintfelületre. Az is meggondolható, hogy amennyiben két, C_1-gyel illetve C_2-vel jellemezhető felület között mozgunk, úgy a gradφ gradiensvektor a legrövidebb utat definiálja a két felület között, azaz φ maximális megváltozásának irányába mutat. Ez abból is látszik, hogy a függvény $d\varphi = \nabla\varphi \cdot d\mathbf{r}$ megváltozása a skaláris a skaláris szorzat tulajdonságai alapján akkor a legnagyobb, amennyiben $d\mathbf{r} = \nabla\varphi$.

Mintafeladatok

- Számítsuk ki a $V(r) = V\left(\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}\right)$ potenciál gradiensét.

  Megoldás: $\nabla V(r) = \mathbf{i}\dfrac{\partial V(r)}{\partial x} + \mathbf{j}\dfrac{\partial V(r)}{\partial y} + \mathbf{k}\dfrac{\partial V(r)}{\partial z}$

  és $V(r)$ pl. x-től az $r(x)$ kapcsolaton keresztül függ. Minthogy

  $$\frac{\partial V(r)}{\partial x} = \frac{dV(r)}{dr}\frac{\partial r}{\partial x}$$

  és

  $$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{\partial\left(x^2 + y^2 + z^2\right)^{1/2}}{\partial x} = \frac{x}{\left(x^2 + y^2 + z^2\right)^{1/2}} = \frac{x}{r}\text{, stb., így}$$

  $$\nabla V(r) = \left(\mathbf{i}x + \mathbf{j}y + \mathbf{k}z\right)\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr} = \frac{\mathbf{r}}{r}\frac{dV(r)}{\partial r} = \hat{\mathbf{r}}\frac{dV(r)}{dr},$$

  ahol $\hat{\mathbf{r}}$ a pozitív irányba mutató radiális egységvektort jelöli.

Gyakorló feladatok

- Számítsa ki $S(x, y, z) = \left(x^2 + y^2 + z^2\right)^{-3/2}$ esetén a gradienst az (1, 2, 3) pontban.
- Egy vízet tartalmazó lombik közepébe injekciós tűvel egy csepp etanolt juttatunk. Az etanol koncentrációjának kezdeti eloszlása $c(r) = c_0 \exp(-x^2 - y^2 - z^2)$. Fick I. törvénye alapján adja meg a kezdeti anyagáramot a hely függvényében.

V.5 Divergencia, a $\nabla\cdot$ operátor

Vektormezők differenciálása egyszerű kiterjesztése a skalár mennyiségek differenciálásával kapcsolatban elmondottaknak. Ha egyszerre figyelünk a nabla vektor művelet kapcsán annak mind a differenciáló, mind a vektor tulajdonságára, akkor világos, hogy

$$\boxed{\nabla\cdot\mathbf{V}=\frac{\partial V_x}{\partial x}+\frac{\partial V_y}{\partial y}+\frac{\partial V_z}{\partial z}},$$

és ezt a skalármezőt a **V** vektorfüggvény **divergenciájának** nevezzük.

Mintafeladatok

- Számítsuk ki a koordinátavektor divergenciáját.

  Megoldás: $\nabla\cdot\mathbf{r}=\left(\mathbf{i}\frac{\partial}{\partial x}+\mathbf{j}\frac{\partial}{\partial y}+\mathbf{k}\frac{\partial}{\partial z}\right)\cdot(\mathbf{i}x+\mathbf{j}y+\mathbf{k}z)=\frac{\partial x}{\partial x}+\frac{\partial y}{\partial y}+\frac{\partial z}{\partial z}=3$.
- Számítsuk ki a centrális erőtér divergenciáját.

  Megoldás:

  $$\nabla\cdot(\mathbf{r}f(r))=\frac{\partial}{\partial x}[xf(r)]+\frac{\partial}{\partial y}[yf(r)]+\frac{\partial}{\partial z}[zf(r)]=3f(r)+\frac{x^2}{r}\frac{df}{dr}+\frac{y^2}{r}\frac{df}{dr}+\frac{z^2}{r}\frac{df}{dr}=$$
  $$=\underline{\underline{3f(r)+r\frac{df}{dr}}}.$$

Gyakorló feladatok

- Mutassa meg, hogy amennyiben a centrális erőtér alakja $f(r)=r^{n-1}$, úgy annak divergenciája $n=-2$ -re eltűnik (zérus).
- Mutassa meg, hogy $\nabla\cdot(f\,\mathbf{V})=(\nabla f)\cdot V+f\,\nabla\cdot\mathbf{V}$, ami egy skalárfüggvény és egy vektorfüggvény szorzataként kapott mennyiség divergenciájának kiszámítására szolgáltat formulát (az eredmény nagyban emlékeztet a szorzatfüggvény differenciálása kapcsán tanultakra).

V.6 Rotáció (curl), a $\nabla\times$ operátor

Egy másik lehetőség a nabla vektor és a vektormezők kapcsolatában az, hogy a kettő vektoriális szorzatát („keresztszorzatát”) képezzük. Ekkor a következő összefüggést állapíthatjuk meg a vektorok vektoriális szorzása kapcsán tanultak alapján:

$$\boxed{\nabla\times\mathbf{V}=\begin{vmatrix}\hat{\mathbf{i}} & \hat{\mathbf{j}} & \hat{\mathbf{k}}\\ \dfrac{\partial}{\partial x} & \dfrac{\partial}{\partial y} & \dfrac{\partial}{\partial z}\\ V_x & V_y & V_z\end{vmatrix}},$$

ezt a vektormezőt a **V** vektormező **rotációjának** nevezzük.

Mintafeladatok

- Számítsuk ki a centrális erőtér rotációját.
  Megoldás: $\nabla\times(\mathbf{r}f(r))=f(r)\nabla\times\mathbf{r}+[\nabla f(r)]\times r$, ahogy az első gyakorló feladat mutatja. Könnyen megmutatható, hogy $\nabla\times\mathbf{r}=\mathbf{0}$ (minden képzendő „vegyes” derivált zérus). Korábbról tudjuk, hogy $\nabla f(r)=\hat{\mathbf{r}}(df/dr)$, tehát $\nabla\times(\mathbf{r}f(r))=\dfrac{df}{dr}\hat{\mathbf{r}}\times\mathbf{r}=\mathbf{0}$, azaz a centrális erőtér rotációja nulla.

Gyakorló feladatok

- Mutassa meg (legegyszerűbb először az egyik komponensre megmutatni), hogy $\nabla\times(f\,\mathbf{V})=f\,\nabla\times V+(\nabla f)\times\mathbf{V}$, ami egy skalármező és egy vektormező szorzataként kapott mennyiség rotációjának kiszámítására szolgáltat jól alkalmazható formulát (az eredmény analóg a divergenciánál megismert eredménnyel).

V.7 Nabla többszöri alkalmazása

A gradiens (skalárból vektor), a divergencia (vektorból skalár) és a rotáció (vektorból vektor) fogalmának megismerése után felmerülhet a kérdés, hogy mi történik, ha a kapott mennyiségekre ismételten hattatjuk a nabla vektor operátort. Az alábbi öt esetet különböztethetjük meg, amennyiben φ skalármező, míg **V** vektormező:

(a) $\nabla \cdot \nabla\varphi \equiv \text{div grad}\,\varphi$
(b) $\nabla \times \nabla\varphi \equiv \text{rot grad}\,\varphi$
(c) $\nabla\nabla \cdot \mathbf{V} \equiv \text{grad div}\,\mathbf{V}$
(d) $\nabla \cdot \nabla \times \mathbf{V} \equiv \text{div rot}\,\mathbf{V}$
(e) $\nabla \times (\nabla \times \mathbf{V}) \equiv \text{rot rot}\,\mathbf{V}$.

Minden egyes esetben második deriváltakat magukban foglaló kifejezéseket kapunk a műveletek eredményeként és minden fellépő mennyiség szerepel a fizikában és a fizikai kémiában, különös tekintettel az elektromágnesség elméletére (lásd **Maxwell-egyenletek**). Mindazonáltal a kifejezések nem egyformán fontosak, így jelen helyen csak az első kettővel foglalkozunk részletesebben.

Összefoglaló táblázat a nabla-t alkalmazó kifejezésekről, ahol U és V skalármezők, míg **A** és **B** vektormezők:

Kifejezés	Értelmezés
$\nabla(U+V) = \text{grad}(U+V)$	$\nabla U + \nabla V = \text{grad}U + \text{grad}V$
$\nabla \cdot (\mathbf{A}+\mathbf{B}) = \text{div}(\mathbf{A}+\mathbf{B})$	$\nabla \cdot \mathbf{A} + \nabla \cdot \mathbf{B} = \text{div}\,\mathbf{A} + \text{div}\,\mathbf{B}$
$\nabla \times (\mathbf{A}+\mathbf{B}) = \text{rot}(\mathbf{A}+\mathbf{B})$	$\nabla \times \mathbf{A} + \nabla \times \mathbf{B} = \text{rot}\,\mathbf{A} + \text{rot}\,\mathbf{B}$
$\nabla \cdot (U\mathbf{A})$	$\nabla(U) \cdot \mathbf{A} + U(\nabla \cdot \mathbf{A})$
$\nabla \times (U\mathbf{A})$	$\nabla(U) \times \mathbf{A} + U(\nabla \times \mathbf{A})$
$\nabla \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B})$	$\mathbf{B} \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) - \mathbf{A} \cdot (\nabla \times \mathbf{B})$
$\nabla \times (\mathbf{A} \times \mathbf{B})$	$(\mathbf{B} \cdot \nabla)\mathbf{A} - \mathbf{B}(\nabla \cdot \mathbf{A}) - (\mathbf{A} \cdot \nabla)\mathbf{B} + \mathbf{A}(\nabla \cdot \mathbf{B})$
$\nabla \cdot (\nabla U) \equiv \nabla^2 U$	$\dfrac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2 U}{\partial y^2} + \dfrac{\partial^2 U}{\partial z^2}$
$\nabla \times (\nabla U)$	$\mathbf{0}$ $(\text{rot grad}\,U = \mathbf{0})$
$\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{A})$	0 $(\text{div rot}\,\mathbf{A} = 0)$
$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A})$	$\nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A}$

Mintafeladatok

- Számítsuk ki a $\nabla\cdot\nabla\varphi \equiv \operatorname{div}\operatorname{grad}\varphi$ kifejezést.

  Megoldás: $\nabla\cdot\nabla\varphi = \left(\mathbf{i}\frac{\partial}{\partial x}+\mathbf{j}\frac{\partial}{\partial y}+\mathbf{k}\frac{\partial}{\partial z}\right)\cdot\left(\mathbf{i}\frac{\partial\varphi}{\partial x}+\mathbf{j}\frac{\partial\varphi}{\partial y}+\mathbf{k}\frac{\partial\varphi}{\partial z}\right)$, és így könnyen megmutatható, hogy $\nabla\cdot\nabla\varphi = \frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2}$. Gyakran előfordul, hogy a $\nabla\cdot\nabla$ helyett a ∇^2 jelölést alkalmazzuk.

- Számítsuk ki a $\nabla\times\nabla\varphi \equiv \operatorname{rot}\operatorname{grad}\varphi$ kifejezést.

  Megoldás: $\nabla\times\nabla\varphi = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial\varphi}{\partial x} & \frac{\partial\varphi}{\partial y} & \frac{\partial\varphi}{\partial z} \end{vmatrix}$. A determináns kifejtéséből adódik, hogy $\nabla\times\nabla\varphi = \mathbf{i}\left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial y\partial z}-\frac{\partial^2\varphi}{\partial z\partial y}\right)+\mathbf{j}\left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial z\partial x}-\frac{\partial^2\varphi}{\partial x\partial z}\right)+\mathbf{k}\left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial x\partial y}-\frac{\partial^2\varphi}{\partial y\partial x}\right)=\mathbf{0}$, feltéve, hogy a parciális differenciálás sorrendje felcserélhető. Ez fennáll, amennyiben a φ függvény második parciális deriváltjai folytonosak. Azaz azt az általánosan érvényes eredményt kaptuk, hogy a gradiens rotációja azonosan nulla, a probléma fizikai körülményeitől függetlenül.

Gyakorló feladatok

- Mutassa meg, hogy amennyiben a centrális potenciál alakja $V(r)=r^n$, úgy $\operatorname{div}\operatorname{grad}V = n(n+1)r^{n-2}$, ami eltűnik $n = 0$ (a potenciál konstans) és $n = -1$ (Coulomb potenciál) esetére (azaz a Coulomb-potenciál megoldása a $\nabla^2 V(r)=0$ ún. Laplace-egyenletnek).
- Mutassa meg, hogy tetszőleges vektormező rotációjának divergenciája azonosan nulla.