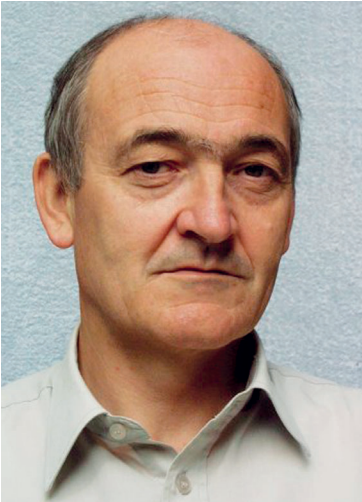




Termodinamika egyszerűen és érthetően

Beszélgetés Keszei Ernővel új tankönyvéről



A cím az interjú főszereplőjétől származik: így hirdette meg könyvbemutató előadását az Akadémia Kémiai Osztályán. Keszei Ernő az ELTE Fizikai Kémiai Tanszékének egyetemi tanára, 2010-től az ELTE tudományos, kutatási és innovációs rektorhelyettese. A Springer kiadó nemrégiben jelentette meg a „Chemical Thermodynamics. An Introduction” című munkáját, amely magyarul „Bevezetés a kémiai termodinamikába” címmel mindenki számára elérhető: <http://keszei.chem.elte.hu/fizkem1/Tankonyv.pdf>. A könyv axiomatikus alapon nyugszik; bemutatásához segítségül hívjuk a korábban említett előadás kivonatát is: „A klasszikus felépítés szerint a hőerőgépekkel kapcsolatos tapasztalatokból kiindulva, munkát és hőt tekintve alapmennyiségeknek, hosszadalmas érveléssel és a legtöbb tankönyvben nem túl meggyőző matematikai szigorúsággal eljutunk a termodinamikai potenciálfüggvényekhez; entrópiához, belső energiához, valamint ezekkel kapcsolatos további hasznos függvényekhez. Ez a felépítés jobbra követi a történeti fejleményeket, és a főtételekből származtatja a termodinamikai mennyiségeket. Például az (elsőként felfedezett) második főtétel két tipikus megfogalmazása: Hő spontán nem folyhat alacsonyabb hőmérsékletű helyről magasabb hőmérsékletűre (Clausius). Körfolyamatban lehetetlen hőt teljesen munkává

alakítani (Lord Kelvin). Másik hátránya a legtöbb klasszikus felépítésű tankönyvnek az, hogy azt a benyomást keltik az olvasóban, mintha a termodinamika ideális gázokkal lenne csak megalapozható – reális anyagokra csak toldozni-foldozni lehet.

A Tisza László által kidolgozott és Herbert B. Callen által leírt termodinamika ezzel szemben négy matematikailag egzakt axiómát mond ki, amelyek eleve termodinamikai potenciálfüggvényekre (belső energia és entrópia) vonatkoznak. Az axiómák kimondják ezek egzisztenciáját és fontos alaptulajdonságait. Az axiómák alapján már minden termodinamikai probléma könnyen megoldható, és közben nincs kihasználva az ideális gázok semmilyen tulajdonsága sem. (Kivéve az elegyek formalizmusának sajátos voltát, ami pont az ideális gázokból származtatható.)”

– Százötven évvel ezelőtt még azon vitakoztak, hogy különbözik-e a kémiai és a fizikai atom. Ennek a könyvnek a tárgya a kémiai termodinamika. Van külön kémiai, biológiai, fizikai termodinamika?

– A kémiai termodinamikát mindenképpen érdemes megkülönböztetni. A „fizikusi” termodinamikai tárgyalásmódban az összetélteli változó nem változik, mert majdnem mindig zárt rendszerekről van szó. Na, ebben különbözik a kémiai termodinamika a fizikaitól. Ez két szempontból is nagy különbség. Egyrészt minden más kölcsönhatásban van egy extenzív és egy intenzív változó, amelyik a kölcsönhatást jellemzi, és elegendő, hogy ez az egy intenzív változó azonos legyen egy egyensúlyi rendszer minden részében. A kémiai kölcsönhatással – amikor valamely komponens anyagmennyisége változik meg – nem ez a helyzet. Ha húsz komponens jár szabadon a rendszerben, akkor mind a húsz kémiai potenciáljának azonosnak kell lennie egyensúlyban. Hány szabadsági foka van egy rendszernek? $K + 2$ vagy $K + \text{néhány}$ – és a K , a komponensek száma, sokkal nagyobb lehet, mint a mellette álló szám. Emiatt okvetlenül más a kémiai termodinamika, mint a „fizikai”.

De ez csak a könnyebbik rész, mert lineáris algebrai technikával lehet írni a sok változót. A kémiai potenciál megadása viszont már nem egyszerű, ugyanis minden komponensre más és más összefü-

gést kell használni, és az összefüggések alakjának százötven éves múltra visszatekintő hagyományai vannak. Ezek már megcsontosodtak, noha számítási szempontból nem mindig optimálisak. Még tovább megyek: ha a többkomponensű egyben összetételű függés is van – amivel sem a mérnökök, sem a fizikusok nem szeretnek foglalkozni –, akkor ez a hagyományos leírás még bonyolultabb, hiszen egy komponens kémiai potenciálja nemcsak az adott komponens összetételének változása miatt változik, hanem a többi komponens összetételének változása miatt is. Ennek leírásában szerepel egy vonatkoztatási rendszer is, amiből pedig nem egyféle van, hanem minimum négy. Itt a legkitartóbb fizikusok is elveszítik a fonalat, ha nincsenek rákényszerítve, hogy beleássák magukat a problémába. Ettől „kémiai” a termodinamika-könyv. A legnagyobb fejezet talán a fázisátalakulásokról jutott, de a következő leghosszabb az elegyek termodinamikája, ahol az említett problémák részletesen ki vannak fejtve.

– Ez a könyv szakít ugyan a hagyományos tárgyalással, de egy másik, újabb hagyomány mentén indul el, aminek a kezdeteit Tisza Lászlóhoz kötném.

– A régi meg az új megítélése relatív, mert az „új hagyományt” Gibbstől lehet számítani, és bizony ez is idősebb száz évnél. A „régiből” annál csak negyven-ötven évvel idősebb. Az igaz, hogy



korábban a termodinamikát kémiai egyszerű rendszerekre alkalmazták elsősorban – a biológiáról most ne is beszéljünk. Ez az oka annak, hogy a Gibbs előtti ötletek tovább éltek, és egészen a 20. század harmincas-nyolcvanas éveig meghatározók voltak. És mindannyian tudjuk – Planck nyomán –, hogy a régi felfogás hívei kihalnak, nem pedig a véleményüket változtatják meg.

– *A fizikai kémiai tankönyvek a termodinamikát még mindig a „régifelfogásban” tárgyalják.*

– Annak is jó oka van: kevesen veszik maguknak a fáradságot a kémikus szerzők közül, hogy igazán alaposan megértsék a termodinamikát. Egyszerűbb átvenni a régit – de azért vannak kivételek. Gibbsén kívül Denbigh nevét említeném. Beke Gyulától kaptam kölcsön a könyvét, aki még személyesen ismerte Denbighet. Ez a könyv a kémiai egyensúlyok terén olyan felfogású, mint az enyém, pontosabban szólva inkább megfordítva; sokat merítettem belőle. Mégsem Denbigh volt a meghatározó a tankönyvkiadásban, mert nem az okos emberek a meghatározók, hanem azok, akik nagy példányszámot érnek el.

– *Tisza László és tanítványa, Herbert Callen is népszerű könyveket írt. Egy ideje kerülgetjük a forró kását: szeretném, ha előszóban is megfogalmazná a kétféle felfogás közötti különbséget.*

– Ha tehetek egy kis kitérőt, szívesen elmesélek egy anekdotát. Egy vegyészmérnök tervezett egy olyan gépet, amelyik a Carnot-ciklusnál nagyobb hatásfokot ér el. Nem vettem volna komolyan, ha nem találkozom az egyik műegyetemi kollégájával, aki elmesélte, hogy megmutatta nekik a számításokat, és azok jók. Na, erre már kíváncsi lettem, elmentem a kémikus egyesületbeli sajtótájékoztatóra. Utána beszélgettünk is, mert minden, amit a mérnök mondott, rendben volt – a hatásfok kivételével. Szabadalmaztatni akarta a találmányát, amihez szakvélemény kellett volna, azt pedig senkitől sem kapott. Mondtam, hogy én elvállalom, de beszéljessünk még a gépéről. Azzal kezdtem, hogy egy körfolyamatban megmarad az entrópia és megmarad az energia. Ebből kijön a maximális hatásfok. Mire ő: Varsányi professzornál azt tanulta, még senki sem mért

olyat, hogy a hatásfok nagyobb lett volna a Carnot-ciklusénál – de miért ne lehetne nagyobb?

Hát ez a különbség a két felfogás között. Ha az ember abból indult ki, hogy „még senki sem mért olyat”, és nem tudja matematikailag végigvezetni, hogy milyen posztulátumból vagy főtételből és hogyan származtatja az entrópiát meg az energiát, amiből belátná, hogy annak kutya kötelessége megmaradni a körfolyamatban, akkor nem érti az egészet. Az új felfogás azt mondja, hogy minek veszkődjünk itt hőerőgépekkel, munkával, hővel, amelyek nem is a termodinamikai rendszer jellemzői, nem is állapotfüggvények, hanem koncentráljunk inkább a rendszerre meg az állapotfüggvényekre.

Annak, aki a régi felfogást tanulta, fel kell adnia, hogy ő is azt „mondja vissza”, és azzal az igénnyel kell fellépnie, hogy megértse, miről van szó. Tehát aki nem akar a végére járni a dolgoknak, az nem fog eljutni addig, hogy értékelni tudja az újat – ami idestova már százötven- százhatvan éves.

– *Azért az sem buta, aki a főtételekben gondolkodik.*

– Azt nem mondom, hogy buta, csak a termodinamika megértésének az igénye hiányzik belőle – vagy olyan szinten műveli a matematikát, hogy nem fárasztja ki a hosszú, bonyolult érvelésrendszer, amiből kijön a termodinamika alkalmazható szerkezete.

– *Őn is idézte korábban Sommerfeldet, a neves fizikust: „A termodinamika igen furcsa tudomány. Amikor az ember először tanulja, egyáltalán nem érti. Emiatt másodsor is áttanulmányozza, amikor rájön, hogy már érti, kivéve egy-két dolgot. Ezért harmadszor is nekiáll. Eközben rájön, hogy ezt nem is lehet érteni, viszont ekkorra úgy megszokja, amit olvas, hogy ez már egyáltalán nem zavarja.”*

– Valószínűleg Sommerfeld is a hagyományos felépítés szerint tanulta a termodinamikát. Ismerjük Tisza László esetét: ő elmondta, hogy Landaunál jött rá, hogy világosabban, tisztábban kellene kezelni a termodinamikát.

– *Tisza visszaemlékezése alapján úgy gondolom, Landau inkább a statisztikus fizikai és kvantummechanikai aspektusokat kérhette tőle*

Kétféle felfogás

A termodinamika axiómái

1. Léteznek olyan állapotok, amelyeket egyensúlyi állapotnak nevezünk, és amelyeket egyszerű rendszerekben makroszkopikusan egyértelműen meghatároz azok U belső energiája, V térfogata, valamint a rendszert alkotó K anyagfajta n_1, n_2, \dots, n_K anyagmennyisége.
2. Létezik az extenzív paramétereknek egy entrópiának nevezett, S -sel jelölt függvénye, amely minden egyensúlyi állapotra értelmezhető. Egy izolált összetett rendszerben adott belső kényszerfeltétel hiányában az extenzív változók olyan egyensúlyi értékeket vesznek fel, amelyek maximalizálják az entrópiát az összes lehetséges olyan egyensúlyi rendszer felett, amelyben az adott belső kényszerfeltétel fennáll.
3. Egy összetett rendszer entrópiája additív a rendszer részei fölött. Az entrópia folytonos, differenciálható, és a belső energiának szigorúan monoton növekvő függvénye.

4. Bármely rendszer entrópiája zérus abban az állapotában, amelyben a $\left(\frac{\partial U}{\partial S}\right)_{V,n}$ derivált értéke zérus. *(Keszey Ernő: Bevezetés a kémiai termodinamikába)*

A termodinamika főtételei

0. Ha A termikus egyensúlyban van B-vel, és B termikus egyensúlyban van C-vel, akkor C is termikus egyensúlyban van A-val.
1. A rendszer belső energiája mindaddig állandó, míg azt munkavégzés, vagy hőcsere meg nem változtatja. (Ha w jelöli a rendszeren végzett munkát, q azt az energiát, amely hő formájában áramlott a rendszerbe, akkor a ΔU belsőenergia-változást a következő összefüggés adja meg: $\Delta U = q + w$.)
2. Egy izolált rendszer entrópiája valamely spontán, önként lejátszódó folyamat során növekszik: $\Delta S_{\text{tot}} > 0$, ahol S_{tot} az izolált rendszer valamennyi részletének teljes entrópiája.
3. Ha minden elem entrópiáját $T = 0$ -n stabilis állapotban nullának vesszük, akkor minden anyagnak pozitív az entrópiája, ami $T = 0$ -nál nullává válhat, és biztosan nulla lesz valamennyi tökéletes kristályos anyagra, beleértve a vegyületeket is.

(P. W. Atkins „Fizikai kémia” c. könyve nyomán)



számon. Amikor már ő tanított termodinamikát, többféle módon próbálta bevezetni az entrópiát; végül posztulálta.¹

– De ez már a Landauval eltöltött évek után volt.

– Igen, jóval.

– Azt az igényt, hogy minden kristálytisza, világos legyen, Landau fejlesztette ki Tiszában is. Szóval fontos, hogy ez az igény meglegyen. Ha engem nem zavart volna egyetemista koromban, hogy nem értem a termodinamikát, és történetesen nem egy évvel előttem járó fizikusok a szobatársaim a kollégiumban, akkor nem biztos, hogy hamar tovább léptem volna.

– Mi a különbség a főtételeken alapuló és az axiomatikus felépítés között?

– A klasszikus főtételektől egy matematikusnak égne állna a haja. Amikor Carathéodory matematikusként „hozzányúlt” a termodinamikához, azzal kezdte, hogy a hőt hagyjuk ki, mert nem jól kezelhető. A munkát azonban meghagyta. Az ő tevékenysége nyomán nagyon elegáns előrelépés bontakozott ki a fenomenologikus termodinamikában. De mint tudjuk, a matematikusok később elővették, szétszedték ezt a konstrukciót, és azt mondták, hogy körülbelül tizenöt axiómára van szükség. Az axióma a matematikusok számára csak egyetlen állítás lehet. A főtételek több állítást tömörítenek, ennek mintájára a Callen-féle, vagy inkább a Tisza-féle axiómák is több állítást tartalmaznak. Tisza, illetve a tankönyvíró Callen úgy fogalmazták meg ezeket, hogy alkalmazkodjanak a négy főtételhez, ezért van pont négy axiómájuk.

De a hagyománnyal radikálisan szakítani kellett, és a nagy különbség az, hogy az axiómák csak a rendszerre jellemző állapotfüggvényekkel foglalkoznak. Ami pedig nem jellemző a rendszerre, azzal nem foglalkoznak. Ilyen például a hő meg a munka. Ez a nagy koncepcióbeli különbség a két felfogás között.

Beke Gyula azt szokta mondani, hogy egy vegyész minek szenvedje végig a hőerőgépektől a reagáló rendszerekig elvezető hosszú és tekervényes utat, amit ráadásul – mint Sommerfeld megfogalmazta – nem is lehet érteni. Miért nem mutatjuk meg neki, hogyan ér könnyebben célba, és így nem is esik abba a hibába, mint az előbb idézett vegyész mérnök, aki a Carnot-körfolyamatnál hatékonyabbat keresett, mert még senki sem talált olyat. Amúgy a hibája abból eredt, hogy a kritikus ponthoz közeli állapotokkal számolt, ahol rosszak voltak a táblázatok adatai a mérések pontatlansága miatt.

– A főtételek nem azt állítják, hogy még senki nem talált nagyobb hatásfokú gépet...

– Azért majdnem így fogalmaznak: például hogy nem létezik olyan gép, amelyik egy hőtartály hőtartalmát teljes egészében mechanikai munkává alakítja át. És ezt honnan tudjuk? A különbség picit emlékeztet a newtoni axiómák és a lagrange–hamiltoni axiómák esetéhez. A newtoni axiómákban fura mennyiségek vannak. Ilyen például az erő, és keletkezik egy állandó az egyik differenciálegyenletben – ez vektoriális mennyiségekre vonatkozó differenciálegyenlet –, amit aztán elnevezünk elegánsan tömegnek. Ezzel szemben a hamiltoni legkisebb hatás elve egyszerű, könnyen érthető.

– A fizika, kémia „levelezhető” lenne axiómákból? Mondjuk, az elektrokémia is?

■

¹ „Egy elméleti fizikus vándorútja Budapesttől Bostonig.” Tisza Lászlóval Frenkel Andor beszélgetett. A többrészes interjú megjelent a Természet Világa 2007-es számában, megtalálható a www.termeszettvilaga.hu honlapon.

² Hraskó Péter: A fizika axiomatizálásáról, Fizikai Szemle, 2009. július–augusztus, <http://www.kfki.hu/fszemle/archivum/fsz090708/hrasko0907.html>

– Ez érdekes dolog, mert a termodinamikában például csak a töltéshordozó részecskéket tekintjük „létezőnek”.

– És a töltés?

– Az a töltéshordozó részecske egyik tulajdonsága, ami a részecske nélkül nem létezik. Az anyagi részecskék viselkedésére pedig a kémiai termodinamika érvényes.

Az elektrosztatika axiómái alapján kizárólag olyan helyzeteket tudunk kezelni, amelyekben absztrakt töltés szerepel. Mihelyt felteszünk, hogy különböző töltéshordozók léteznek, és azok másfajta egyensúlyokban is részt vesznek, akkor már nem használható az elektrosztatika. A termodinamika beláttatja velünk, hogy ha ugyanabból az anyagból van az egész rendszer, akkor az elektrosztatika

alkalmazható. Különböző elő kell venni a termodinamikai tárgyalást, ami igazából elektrokémia.

– De a termodinamika nem mondja meg, hogyan vonzzák egymást a töltések.

– Azt nem, azt az elektrosztatikából kell beleírni a termodinamikába. De ha beírjuk, akkor a termodinamika már tudja tárgyalni a galváncella működését is.

– Most olvastam egy cikket a fizika axiomatizálásáról, amelyben az a megállapítás ragadott meg a legjobban, hogy a fizikusnak mindig mérlegelnie kell, mi a fontos.²

– Így van. Éppen ezért nem az elektrosztatikából indulok ki, ha egy galváncellát akarok leírni, mert az nem vezet eredményre. A matematikusok könnyebb helyzetben vannak: ők találják ki az objektumaikat. Kimondják azok tulajdonságait, onnantól minden világos. A körülöttünk lévő világ minket sajnos folyton zavar abban, hogy ilyen békésen, egyszerűen dolgozhassunk.

– Hogyan fogadják a könyv alapjául szolgáló kurzust a hallgatók?

– Tetszik nekik. Amikor még innen-onnan kellett összeszednem az előadások részleteit, nagy szerencsém volt, mert angolul tanítottam fizikai kémiát, vállalkozó magyar hallgatóknak is. Ez talán húsz évig is eltartott. Az órákra nem járt sok hallgató, de ők régebben a legjobbak közül kerültek ki, amikor az angoltudás még jól korrelált a felkészültséggel, a szorgalommal meg a tehetséggel. Akkor alaposan elmondtam az összefüggéseket – és a hallgatók nagyon élveztek.

Amikor viszont elindult az osztott képzés, a megnövekedett létszámú és szerényebb előképzettséggel rendelkező hallgatókkal ez a megoldás tarthatatlanná vált. Jegyzetet kellett írni, ebből lett aztán ez a tankönyv. A tankönyvet olvasva viszont megint csak örülnek a hallgatók, mert ebben minden benne van, amit a vizsgára tudni kell. Néhány hallgatótól eltekintve a többség azt mondja, hogy meg is lehet érteni. De az a gyanúm, hogy nem a tankönyv hibái okozzák a nehézséget azoknak, akik nem igazán értik.

– Hogyan jutott el a Springer kiadóhoz?

– Régen úgy kerültek ki Magyarországról angol tankönyvek, hogy lefordították, ami az Akadémiai vagy a Műszaki Kiadónál magyarul megjelent. Később közvetlenül külföldi kiadónál is jelentek meg könyvek – az elsők között például Hargittai István a Springer-nél publikálta egy molekulaszervezetről szóló könyvét. Inzelt György kollégám az egyik társszerzője annak az elektrokémiai lexikonnak, amit ugyancsak a Springer adott ki. Néhány évvel ezelőtt még létezett a Springer Hungarica kiadó, ők szerzőket is toboroztak az egyetemen. Akkor nem jutott eszembe, hogy jelentkezsem, de ezek a momentumok is arrafelé tereltek, hogy először a Springernek küldjem el a tervezetemet. Nagyon pozitív visszhangot váltott ki a kiadónál.

– Csak úgy, „az utcáról” jelentkezett?



– Igen. Amikor megvolt a mostani tizenegyből nyolc fejezet magyarul, folyamatosan feltettem őket a hálóra a hallgatóimnak. Elküldtem a Springernek egy szinopszist, valamint egy kétoldalas összefoglalót arról, hogy mi fán terem az axiomatikus termodinamika. Azt a meglepő választ kaptam a kémiai szerkesztőtől, hogy a dolog nagyon érdekli, és bár alap-tankönyveket nem szoktak kiadni, megkérdezi a főnököket. Egy héten belül jött a válasz, hogy kiadnák, de nem lévén angolul hozzáférhető fejezet, tudok-e valakit, aki ért magyarul és lektori véleményt küldene nekik. Az ismerősök között keresve rátaláltam a newporti Salve Regina Egyetemen tanító Kádár Sándorra, aki lelkesen elvállalta a feladatot. Mint később megtudtam, a kiadó még a recenzió megérkezése előtt megkötötte velem a szerződést.

– *Ezután lefordította a kész fejezeteket?*

– Nem. Azt a nyolc fejezetet, ami már megvolt magyarul, elkezdtem angolul írni. Nem fordítottam, hanem újra megírtam angolul. A hiányzó három és fél fejezetet eleve angolul írtam – a mostani magyar verzióban egy fejezet még mindig angolul van. Azt még le kell fordítanom magyarra.

– *Milyen az itthoni szakmai visszhang?*

– Fiatal kollégáimnak általában nagyon tetszett a könyv, az idősebbek között volt, aki azt mondta: jó ez, de jó a régi is. Amikor már elkészültem néhány fejezettel, elküldtem őket debreceni, szegedi, veszprémi kollégáimnak is. Debrecenből nagyon kedvező véleményt kaptam Gáspár Vilmostól, a Fizikai Kémiai Tanszék mostani vezetőjétől. Azt mondta, ő is jól tudja használni ezt a fajta tárgyalást. A Springerrel kötött szerződésbe részben ezért került bele, hogy a magyar változat hozzáférhető az Interneten.

– *Megváltozott attól a tanári attitűdje, hogy rektorhelyettesként több „hegyet-völgyet” lát, mint a Kémiai Intézetből, és a történések hátterét is jobban ismeri?*

– A rektorhelyettesi munka sok időt, energiát von el. Már rég lefordítottam volna a hiányzó fejezetet, és rendesebben gondoznám – úgy, mint régen – a kurzusom weboldalát, ahol mindig naprakész infók vannak. A nagyobb áttekintés abból a szempontból fontos, hogy teljesen meggyőződtem róla: egy olyan egyetemen, amilyen az ELTE, vagy amilyen az ELTE fejlődni akar, kulcsfontosságú tankönyveket írni a hallgatóinknak. Ha pedig nemzetközivé akarjuk tenni az egyetemet – ami most nagyon aktuális célkitűzés –, talán még ennél is fontosabb, hogy ilyen könyveket írjunk; világpiacra, angol nyelven. Ahhoz, hogy áradjanak hozzánk a külföldi hallgatók, szintén angol nyelvű tankönyvek kelljenek.

– *Miért nem jó az, ami mindenhol kapható?*

– Mert többségük olyan, mint amiről korábban beszélünk. Úgy gondolom, hogy nem szolgálják a könnyű, egyszerű megértést.

– *Nem a termodinamikára gondoltam.*

– Ez – azt hiszem – mindenre érvényes. A régi, osztatlan képzésben, amikor a korosztálynak csak a hat százalékka jutott el egyetemre, akármit taníthattunk, megtanulták, vagy ha kellett, meg is szokták, hogy miről van itt szó. Ez most nem megy. A képzési rend egészen átalakult. Az alapszak azért jó, mert a hallgató tanul valamit, három év múlva kap egy diplomát, és utána már nem nézik részleteiben, hogy mit tanult, hanem bárhol az európai felsőoktatási térségben folytathatja a tanulmányait mester szakon. Ebbe a rendszerbe viszont nem fér bele a régi, elmélyült tanulás. Következésképp új eszközöket kell a hallgatóknak adni, amelyek segítségével könnyen megérthetik az összefüggéseket. És nem elég, hogy ezek oktatástechnológiai eszközök legyenek a szó fizikai értelmében, hanem újfajta, hallgatóközpontú tananyag-közéltetésre, módszerekre is szükség van. Én azt gondolom, hogy ez a tankönyv megfelel ezeknek az elvárásoknak, és remélem, akadnak követőim egyetemi kollégáim között.

Silberer Vera

Részlet Tisza László visszaemlékezéséből¹

– Ahogy mondtam, az MIT-n elsősorban másodéveseknek kellett feladatmegoldó gyakorlatot tartanom. Ez nem volt nehéz, a nyelvet leszámítva. Nekem azonban a termodinamika oktatására szóló megbízás volt a legfontosabb. Kinevezésem után két hét állt rendelkezésemre a tananyag felvázolásához. Slater a saját könyvéből tanított, az „Introduction to Chemical Physics”-ből. Rám bízta, hogy én is ezt használom-e. Úgy döntöttem, nem egyetlen könyvet választok. Három fogságból állítottam össze a menüt: Slater könyvéből, Landau és Lifsic „Statisztikus fizika”-jából, amelynek első kiadását 1938-ban jelentette meg az Oxford University Press angolul, valamint göttingeni jegyzeteimből, amelyeket Max Born előadásán készítettem. Mindhárom forrás tartalmazott olyan részeket, amelyek összhangban voltak egymással és az én programommal. Főként a bevezető lépésben, az entrópia definíciójában különböztek.

1941-ben a termodinamikai megközelítéssel kezdtem, de az entrópiát klasszikus statisztikus mechanikai úton definiáltam. Ebben Landaut és Lifsicut követtem. Másodjára azonban nem tetszett ez a megoldás, és már 1942-ben lemondtam a statisztikus kezdésről. Helyette Carathéodory megalapozását választottam, ahogyan Borntól hallottam, de ez még kevésbé volt a kedvemre. El is vetettem, de valamit megtartottam Born előadásai-ból: azt a mnemotechnikai eszközt, amely segít eligazodni az alapvető termodinamikai változókat tartalmazó parciális deriváltak útvesztőjében.

Az entrópiával kapcsolatos patthelyzetet elpanaszoltam egy barátomnak, a doktori disszertációja védéséhez közeledő Roland Lichtensteinnek. „Miért nem posztulárod?” – kérdezte. Ezt tettem, és ma is zavarban vagyok, hogy rendszerem egyik sarokkövét egy kívülálló megjegyzése szolgáltatta. Igaz, az entrópia létezését maga Gibbs is posztulálta, de az eljárást nem nevezték néven.

Az entrópia posztulálásával és a statisztikus definíció elhagyásával teljesen fenomenologikus tárgyalást vezettem be. Ezt a kissé egyedi építmenyt később a „Makroszkopikus termodinamikai egyensúly” elméletének neveztem el, röviden MTE-nek. Valójában a Gibbs-féle termodinamika modernizált változata volt.

– *Hogyan posztuláltad az entrópiát?*

– Létezik az energiának és a térfogatnak egy függvénye, amelynek maximuma a termodinamikai egyensúlyi állapotokat jellemzi; ezt a függvényt entrópiának nevezzük. Az energia-egyensúly megadja a rendszer hőmérsékletének homogenitását; hasonlóan, a térfogat-egyensúly a nyomás, a tömeg-egyensúly pedig a kémiai potenciál homogenitására vezet. Ez az egységes módszer ma már széles körben – vagy talán általánosan is – használatos. Fontos megjegyezni, hogy a termodinamika ilyen elegáns tárgyalásához egy összetett rendszert kell tekintenünk, például egy alkalmas rendszert és egy tartályt. Kezdetben el vannak szigetelve egymástól, azután termikusan érintkeznek. Azt, hogy a szélsőértékhez vezető állapotok pontos definíciójához ez a megközelítés szükséges, Planck ismerte fel, Landau már magától értetődően használta. Az entrópia létezését valószínűleg én kezeltem először explicit posztulátumként.