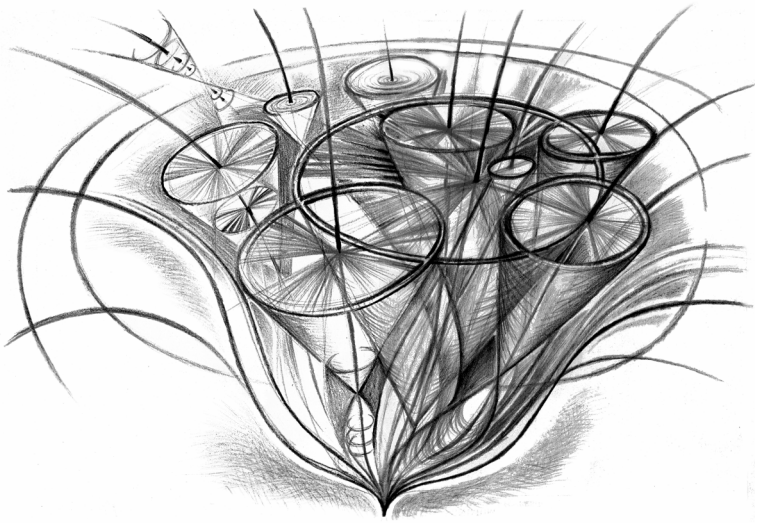
VYBRANÉ KAPITOLY Z TEORETICKÉ FYZIKY



Petr Kulhánek

AGA 2019

Text © Petr Kulhánek
ISBN: 978-80-904582-8-4

Obsah

PŘEDMLUVA **9**

ÚVOD **11**

1. TEORETICKÁ MECHANIKA **15**

1.1 INTEGRÁLNÍ PRINCIPY MECHANIKY **16**
1.1.1 Základní pojmy z mechaniky 16
1.1.2 Integrální principy 18
1.1.3 Hamiltonův princip nejmenší akce 20
1.1.4 Lagrangeovy rovnice 20
1.1.5 Jednoduché příklady 23
1.1.6 Další příklady 25

1.2 ZÁKONY ZACHOVÁNÍ V PŘÍRODĚ **27**
1.2.1 Teorém Emmy Noetherové 27
1.2.2 Zákon zachování hybnosti 28
1.2.3 Zákon zachování energie 29

1.3 HAMILTONOVY KANONICKÉ ROVNICE **33**
1.3.1 Hamiltonovy rovnice 33
1.3.2 Harmonický oscilátor 36
1.3.3 Poissonova formulace Hamiltonových rovnic 39
1.3.4 Numerické řešení Hamiltonových rovnic 40

1.4 VYBRANÉ ÚLOHY Z TEORETICKÉ MECHANIKY **42**
1.4.1 Pohyb nabité částice v elektromagnetickém poli 42
1.4.2 Pohyb v rotující soustavě 46
1.4.3 Problém dvou těles, Keplerova úloha 50
1.4.4 Lagrangeovy body 56
1.4.5 Disipace energie 61
1.4.6 Inverzní úloha 63
1.4.7 Adiabatické invarianty 67
1.4.8 Kanonické transformace 70

1.5 NELINEÁRNÍ DYNAMICKÉ SYSTÉMY **74**
1.5.1 Matice stability a fázový portrét systému 76
1.5.2 Metoda potenciálu 81
1.5.3 Bifurkace 83
1.5.4 Ljapunova stabilita, limitní cyklus, atraktor 86
1.5.5 Evoluční rovnice 93

1.6 LAGRANGEOVY ROVNICE PRO POLNÍ PROBLÉMY 98
1.6.1 Lagrangeovy rovnice, skalární pole 98
1.6.2 Kanonicky sdružené pole 102
1.6.3 Maxwellovy rovnice, elektromagnetické pole 103

2. KVANTOVÁ TEORIE 109

2.1 ÚVOD 110
2.1.1 Mikrosvět a makrosvět 110
2.1.2 Experimenty, které vedly ke kvantové teorii 111

2.2 ZÁKLADNÍ PRINCIPY KVANTOVÉ TEORIE 117
2.2.1 Základní axiomy a definice 117
2.2.2 Kompatibilita měření a Heisenbergovy relace 122
2.2.3 Vlastní stavy energie, Schrödingerova rovnice 129
2.2.4 Různé interpretace kvantové teorie 132

2.3 HARMONICKÝ OSCILÁTOR 138
2.3.1 Řešení pomocí vlnové mechaniky (Schrödinger) 138
2.3.2 Řešení bez volby reprezentace (Dirac) 144
2.3.3 Řešení pomocí maticové mechaniky (Heisenberg) 147

2.4 JEDNODUCHÉ JEDNOROZMĚRNÉ SYSTÉMY 150
2.4.1 Nekonečná jáma 150
2.4.2 Konečná jáma 152
2.4.3 Bariéra, tunelový jev a rozptyl 155
2.4.4 Periodický potenciál a pásové spektrum 160
2.4.5 Neutron v tíhovém poli 164

2.5 SFÉRICKY SYMETRICKÝ POTENCIÁL 167
2.5.1 Moment hybnosti 169
2.5.2 Řešení v *x* reprezentaci, kulové funkce 174
2.5.3 Jednoduché systémy: oscilátor, vodík, jáma 176

2.6 ČASOVÝ VÝVOJ 179
2.6.1 Evoluční operátor 179
2.6.2 Časová Schrödingerova rovnice 181
2.6.3 Oscilace neutrin 184
2.6.4 Dvouštěrbinový experiment, AB experiment, MZ interferometr 186
2.6.5 Ehrenfestovy teorémy, viriálový teorém 191

2.7 RELATIVISTICKÁ KVANTOVÁ TEORIE, SPIN 194
2.7.1 Prostorová rotace a Lorentzova transformace 194
2.7.2 Spin 196
2.7.3 Kleinova-Gordonova rovnice 200
2.7.4 Diracova rovnice 205
2.7.5 Pozitron, C symetrie 216
2.7.6 Elektron a jeho pole, U(1) symetrie 218

2.8 SOUSTAVA STEJNÝCH ČÁSTIC 223
2.8.1 Operátor výměny dvou částic 223
2.8.2 Bosony a fermiony, Pauliho princip 224
2.8.3 Druhé kvantování 225
2.8.4 Ukázka druhého kvantování pro Kleinovo-Gordonovo pole 228

2.9 KVANTOVÁ TEORIE A SKRYTÉ PARAMETRY 231
2.9.1 Akt měření a dekoherence 231
2.9.2 Skryté parametry 233
2.9.3 EPR paradox 234
2.9.4 Bellovy nerovnosti 236
2.9.5 A co dál? 239

3. STATISTICKÁ FYZIKA 241

3.1 VYBRANÉ PARTIE Z TERMODYNAMIKY 242
3.1.1 První a druhá věta termodynamická 243
3.1.2 Termodynamické potenciály 244

3.2 ZÁKLADNÍ POJMY STATISTICKÉ FYZIKY 248
3.2.1 Slovníček pojmů 248
3.2.2 Ergodický problém 252
3.2.3 Liouvillův teorém 253

3.3 GIBBSŮV KANONICKÝ SOUBOR 256
3.3.1 Odvození rozdělení 256
3.3.2 Konstanty rozdělení 257
3.3.3 Partiční suma a její význam 260

3.4 JEDNODUCHÉ PŘÍKLADY 263
3.4.1 Ideální plyn 263
3.4.2 Částice ve vnějším poli 265
3.4.3 Klasický oscilátor 270

3.5 DALŠÍ PŘÍKLADY 272
3.5.1 Kvantový oscilátor (vibrátor) 272
3.5.2 Kvantový rotátor 277
3.5.3 Dvouatomární plyn 280
3.5.4 Anharmonický oscilátor 282
3.5.5 Dvouhladinový systém 284

3.6 GRANDKANONICKÝ SOUBOR 286
3.6.1 Odvození rozdělení 286
3.6.2 Konstanty rozdělení 287
3.6.3 Partiční suma 288

3.7 FERMIONY A BOSONY 291
3.7.1 Fermiho-Diracovo a Boseho-Einsteinovo rozdělení 292
3.7.2 Soubory fermionů (trpaslík a neutronová hvězda) 295
3.7.3 Soubor fotonů (Planckův vyzařovací zákon) 298

3.8 FLUKTUACE A ENTROPIE 307
3.8.1 Fluktuace 307
3.8.2 Entropie 310

3.9 MAGNETICKY AKTIVNÍ SYSTÉMY 313
3.9.1 Základní pojmy 313
3.9.2 Magneticky aktivní materiály 317
3.9.3 Mřížové modely 323

DODATKY 329

DODATEK A – EINSTEINOVA SUMAČNÍ KONVENCE A JEJÍ POUŽITÍ 330
A1 Einsteinova sumační konvence 330
A2 Délkový element 334

DODATEK B – LIEOVA ALGEBRA 336
B1 Lineární vektorový prostor 336
B2 Lieova algebra 337
B3 Strukturní koeficienty Lieovy algebry 338

DODATEK C – TENZORY 340
C1 Kovariantní a kontravariantní indexy 340
C2 Skalární součin, zvyšování a snižování indexů 341
C3 Čtyřvektory, Minkowského metrika 342

DODATEK D – KUŽELOSEČKY 345
D1 Elipsa 345
D2 Hyperbola 346
D3 Parabola 347

DODATEK E – DIRACOVA SYMBOLIKA A OPERÁTORY V KVANTOVÉ TEORII 348
E1 Unitární prostory (prostory se skalárním součinem) 348
E2 Operátory 352
E3 Projekční operátory 359
E4 Rozvoj prvku do báze 361
E5 Spektrální teorie 364

DODATEK F – PFAFFOVY DIFERENCIÁLNÍ FORMY 371
F1 Věta o pěti ekvivalencích 371
F2 Věta o existenci integračního faktoru 374

DODATEK G – NĚKTERÉ INTEGRÁLY A ŘADY 376
G1 Výpočet Gaussova integrálu 377
G2 Výpočet integrálu ve Stefanově-Boltzmannově zákoně 377

SEZNAM SYMBOLŮ 379

REJSTŘÍK OSOBNOSTÍ 383
Teoretická mechanika 384
Kvantová teorie 388
Statistická fyzika 399

REJSTŘÍK POJMŮ 4042

LITERATURA 407

PŘÍLOHA ANEB O ČEM BYSTE MĚLI VĚDĚT 409



Předmluva

Milí čtenářové,

tento text vznikal v průběhu mnoha let na základě mých přednášek na Českém vysokém učení technickém v Praze, kde po roce 1989 konečně přestala platit omezení minulého režimu, a já mohl začít přednášet. Na elektrotechnické fakultě tehdy vzniknul čtyřsemestrální kurz teoretické fyziky pro magisterské a doktorské studium. Tento kurz po několika proměnách funguje dodnes a volně na něj navazuje dvousemestrální přednáška z teorie plazmatu. Paradoxně učebnice *Úvod do teorie plazmatu* [1] vyšla dříve než kniha *Vybrané kapitoly z teoretické fyziky*, kterou máte před sebou a která by ji měla předcházet. Důvod je jediný – učebnice teorie plazmatu byla dle mého názoru pro české studenty mnohem potřebnější než učebnice základů teoretické fyziky.

Učebnice je složena ze tří částí. V první z nich se čtenář seznámí se základy teoretické mechaniky, která je odrazovým můstkem ke studiu kvantové mechaniky, statistické fyziky, teorie plazmatu i dalších odvětví fyziky. Text obsahuje klasické pasáže týkající se Lagrangeových a Hamiltonových rovnic, zákonů zachování, Poissonových závorek a kanonických transformací. Z důvodu návaznosti na *Úvod do teorie plazmatu* [1] je zařazena kapitola o adiabatických invariantech. V kapitole 1.4 jsou probrané partie ukázány na některých důležitých úlohách. Je zde například odvozen pohyb v rotující soustavě, nalezeny pohybové rovnice v případě disipace energie nebo proveden výpočet Lagrangeových bodů v tzv. restriktivním problému tří těles. V kapitole 1.4.6 nalezne čtenář metodu, jak v některých případech vyřešit inverzní úlohu, tj. ze znalosti pohybových rovnic nalézt Lagrangeovu funkci problému. V závěru je nastíněna problematika Lagrangeových rovnic pro polní problémy, která končí Lagrangeovou formulací Maxwellových rovnic.

Druhá část této učebnice je věnována kvantové teorii. Relativně standardní partie týkající se stavby a interpretace kvantové teorie, momentu hybnosti, spinu, časového vývoje a jednoduchých příkladů nalezení spektra Hamiltonova operátoru jsou doplněny aktuální problematikou týkající se hranice mezi kvantovým a klasickým světem, vyvrácením existence skrytých parametrů, EPR paradoxem a Bellovými nerovnostmi. Problematika je většinou řešena v Diracově symbolice, která je objasněna v dodatku E. Závěr části věnované základům kvantové teorie se týká Kleinovy-Gordonovy a Diracovy rovnice. Jde o jakési minimum, které umožní čtenáři číst pokročilejší učebnice kvantové teorie.

Poslední část učebnice je věnována základům statistické fyziky. Student se zde seznámí s myšlenkou kanonické a grandkanonické partiční sumy, které jsou ústředním nástrojem při statistickém popisu přírodních dějů. Probrána jsou základní statistická rozdělení jak v klasické fyzice, tak Fermiho-Diracovo a Boseho-Einsteinovo rozdělení v kvantové mechanice. Aplikace statistického přístupu je ukázána na rotačních a vibračních stavech molekul. Probrány jsou i základy mřížových modelů feromagnetik. S nerovnovážnou statistikou se student setká až v navazující učebnici [1].

Matematické partie potřebné k pochopení probírané látky jsou přesunuty do dodatků. Čtenář, který potřebnou matematiku zná, se nemusí zdržovat přeskakováním matema-

tických vsuvek v hlavním textu. Ostatní si mohou potřebné znalosti oživit nebo doplnit v dodatcích, které jsou řazeny tak, jak to vyžaduje základní text učebnice, a proto na sebe nijak nenavazují. V dodatcích je zavedena Einsteinova sumační konvence, definována Lieova algebra, ukázány základy zacházení s kovariantními a kontravariantními složkami tenzorů, popsány základní kuželosečky, vysvětlena Diracova symbolika a probrány nejnutnější základy Pfaffových diferenciálních forem. Další užitečné matematické dodatky nalezne čtenář v navazující učebnici [1].

Proměnné jsou v této učebnici reprezentovány zásadně šikmým řezem písma. Základním řezem jsou zobrazeny funkce, zkratky, číslice a různé matematické operace. Tučným řezem písma jsou sázeny vektory, tenzory a složené objekty. Ve výjimečných případech, kdy by mohlo dojít k nejednoznačnosti či záměně, jsou nad vektory a tenzory šipky. Latinské indexy znamenají pořadí veličiny, souřadnicové osy atd. Řeckými písmeny jsou označeny složky čtyřvektorů, například A_α, kde $\alpha = 0$ (časová složka), 1, 2, 3 (prostorové složky).

Vzhledem k tomu, že počet písmen abecedy je omezený, jsou některé veličiny označeny stejným symbolem. Jejich význam lze ale snadno odhadnout z kontextu. Pomoci při tom může i seznam symbolů zařazený v závěru knihy. Při čtení nepřeskakujte poznámky, často jde o důležité postřehy potřebné k pochopení probíraného jevu. V knize je naleznete na šedém podkladu. Ilustrativní příklady jsou odděleny od ostatního textu na začátku a na konci černým půlkolečkem. Důležité vztahy jsou na levé straně označeny černým trojúhelníkem. Snad toto značení přispěje k lepší orientaci čtenáře v náročném studijním textu.

Co říci na závěr? Mé poděkování patří řadě mých studentů, kteří se z textů, na jejichž základě vznikala tato kniha, učili a pečlivě objevovali překlepy a nejasnosti. Dále bych chtěl poděkovat recenzentovi Ing. et Ing. Petru Endelovi, který mimořádně pečlivě přečetl celý rukopis, objevil řadu překlepů, nejasností a chyb, a výrazně tak přispěl ke zvýšení úrovně textu. Za všechny ostatní bych chtěl vyjádřit své díky alespoň Ing. Radku Beňovi, RNDr. David Břeňovi, Ph.D., Ing. Miroslavu Horkému, Ph.D. a Davidu Maňasovi. Velký dík patří Danielu Handlovi, který zcela nezištně celý kurz teoretické fyziky natočil na video. V neposlední řadě patří mé poděkování Ing. arch. Ivanu Havlíčkovi, který se postaral o úvodní grafiku k jednotlivým kapitolám, obálku a některé obrázky. Budoucím studentům bych chtěl popřát především bystrý úsudek, bez něhož by studium přírodních dějů nemělo žádný smysl. V dnešní uspěchané době jsou zde ale i další potřebné faktory: klid ke studiu, dostatek času a adekvátní rodinné a finanční zázemí. Doufám, že čtenáři této knihy naleznou vše potřebné k úspěšnému studiu učebnice, kterou právě otevřeli.

Petr Kulhánek, revidováno v listopadu 2017, Praha

Odkazy na kompletní nahrávky přednášek k této učebnici naleznou čtenáři na serveru aldebaran.cz v sekci *Studium*. Zde si také můžete stáhnout elektronickou podobu aktuální verze této učebnice a další doplňující materiály k přednáškám.

Úvod

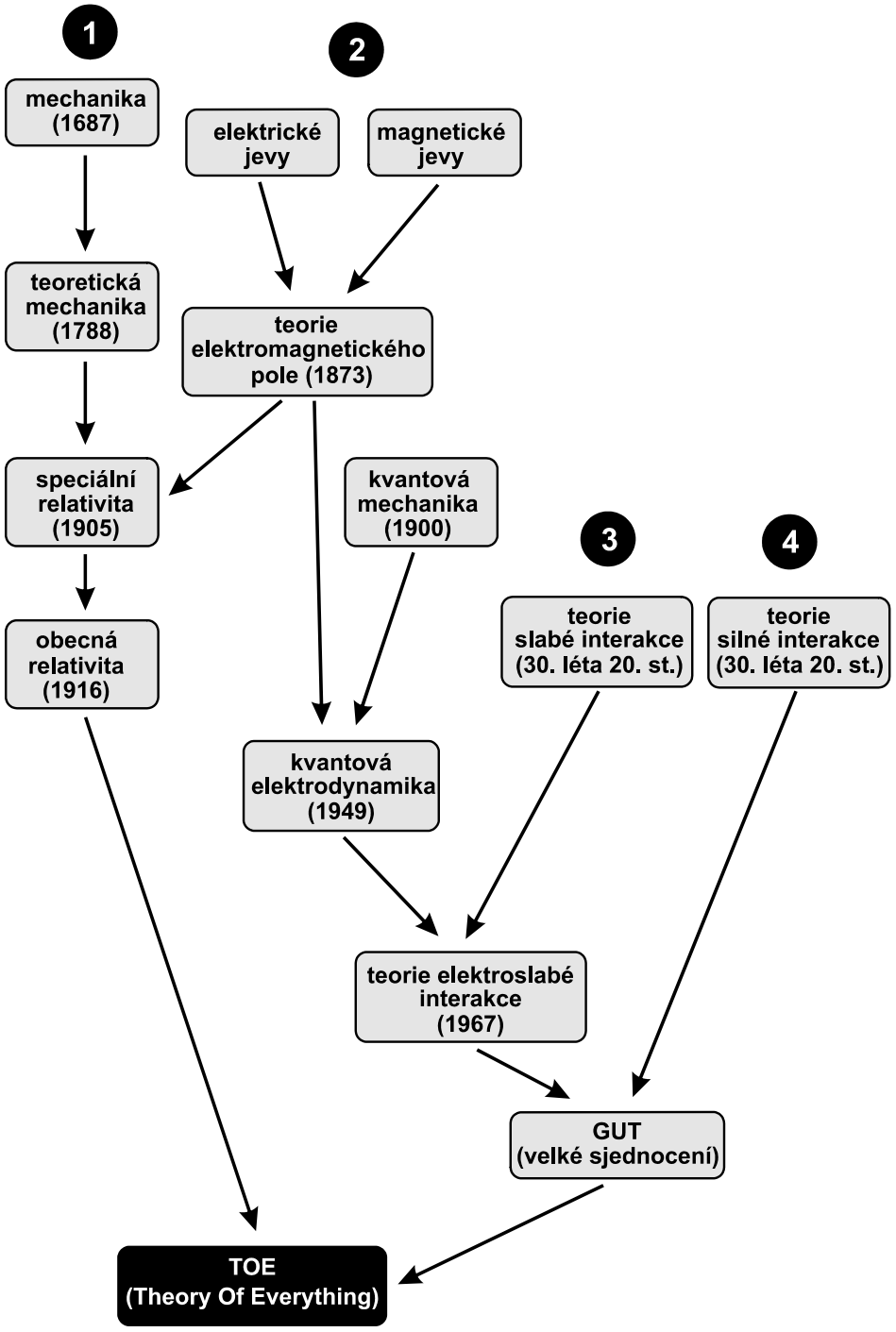
Není to tak dávno, co se fyzikové dělili na dvě velké skupiny – experimentátory a teoretiky. Příslušník každé skupiny věděl, že se bez členů druhé skupiny neobejde. Výsledkem byla plodná spolupráce plná zdánlivé řevnivosti a úsměvných historek. S nástupem výpočetní techniky se vše změnilo. Postupně vznikala skupina třetí, která se zabývá numerickými simulacemi. Bez nich si dnes fyziku nedovedeme představit. Numerické simulace umožňují první ověření výsledků nových teorií bez nákladných experimentů. Při zpracování experimentálních dat pomáhají hledat procesy, které se za naměřenými údaji skrývají. V současnosti má fyzika tři nedílné celky: teorii, experiment a numerické simulace. Tato učebnice je věnována, jak její název říká, vybraným kapitolám z teoretické fyziky. Je úvodem do teoretické mechaniky, kvantové teorie a statistické fyziky.

Fyzika zaznamenává v průběhu staletí dvě základní tendence. První z nich je postupné členění na další a další podobory. Tento vývoj souvisí s prohlubujícím se poznáním a je přirozenou cestou v každé vědní disciplíně. Postupně vznikají specialisté na stále užší a užší obory, vytvářejí si svůj vlastní vědecký jazyk a schopnost komunikace odborníků z dříve blízkých oblastí fyziky se stále zhoršuje. Na druhé straně dochází k hlubšímu pochopení souvislostí mezi jednotlivými částmi fyziky a k jejich postupnému sjednocování do univerzálnějších teorií. Možná se jednou podaří sjednotit fyzikální pohled na všechny základní přírodní interakce do jedné jediné teorie, kterou dnes nazýváme Teorie všeho (anglicky TOE, Theory Of Everything). Tyto integrační tendence ve fyzice jsou znázorněny na obrázku 1.

Mechanika jakožto vědecká fyzikální disciplína vznikala od 17. století. První známější vědecké experimenty prováděl Galileo Galilei (1564–1642). Teoretickou konstrukci klasické mechaniky, jakožto nástroje pro předpověď pohybu těles v daném silovém poli, navrhnul Isaac Newton (1642–1727) ve svých Principiích (*Philosophiæ Naturalis Principia Mathematica*) z roku 1687. V 18. století dovršil konstrukci klasické mechaniky Joseph Louis Lagrange (1736–1813), který mechanické úlohy formuloval nezávisle na volbě souřadnicové soustavy za pomoci variačního počtu.

V 19. století se úspěšně dařilo poznávat a postupně chápat elektrické a magnetické děje. Na experimentech se podílela celá řada významných fyziků, například Hans Oersted (1777–1881), André Ampère (1775–1836), Michael Faraday (1791–1867), Heinrich Hertz (1857–1894), Oliver Heaviside (1850–1925) a další. Celé toto údobí vyvrcholilo poznáním, že jevy elektrické a magnetické mají shodnou povahu a společný původ. V roce 1873 publikoval James Clerk Maxwell (1831–1879) pojednání *A Treatise on Electricity and Magnetism*, které obsahovalo rovnice, jež završily klasickou elektrodynamiku do jednoho jediného celku obsahujícího jak děje elektrické, tak magnetické.

Na konci 19. století podlehlo mnoho fyziků iluzi, že fyzika jako věda je dokončena. Byly známy zákony mechaniky na jedné straně a zákony elektřiny a magnetizmu na straně druhé. Na první pohled se zdálo, že veškeré přírodní děje jsou důsledkem těchto dvou vědních disciplin a budoucnost fyziky je pouze v aplikaci známých zákonů na neznámé situace. Šlo samozřejmě o krutý omyl, který se rychle projevil na počátku dvacátého století, kdy nebylo možné tehdejšími znalostmi vysvětlit řadu fyzikálních dějů.



Obr. 1: Integrační tendence ve fyzice

Ukázalo se, že jak klasická mechanika, tak klasická elektrodynamika nedokáží uspokojivě popsat svět na úrovni atomů. Důsledkem toho byla neschopnost objasnit chování elektronu v atomárním obalu, vysvětlit záření absolutně černého tělesa, pochopit fotoelektrický jev a smířit se s projevy objektů mikrosvěta, které vykazovaly někdy částicové a jindy vlnové vlastnosti. Zrodila se kvantová mechanika, ve které neplatí $ab = ba$, a nekomutativnost se stala nově objeveným rysem přírody na mikroskopické úrovni. Kvantová mechanika s sebou přinesla celou řadu těžko představitelných jevů – kvantování energie a momentu hybnosti, dualismus vln a částic, relace neurčitosti, nejednoznačnost aktu měření a pravděpodobnostní interpretaci výsledků vedoucí na nedeterminizmus kvantové fyziky.

A to byl teprve začátek. Spin elementárních částic objevený v roce 1925 znamenal další výrazný posun lidstva v chápání přírody. Je důsledkem relativistické fyziky, která se od počátku 20. století rozvíjela paralelně s kvantovou mechanikou. Spojení kvantové mechaniky se speciální relativitou vedlo na Diracovu rovnici, která se stala základem kvantového popisu pohybu elektronu. Paul Adrien Maurice Dirac (1902–1984) navrhnul svou rovnici v roce 1928 a téhož roku z ní odvodil existenci pozitronu, antičástice k elektronu. Pozitron byl experimentálně objeven až o 4 roky později Carlem Andersonem (1905–1991). Za svou práci získal Dirac Nobelovu cenu za fyziku pro rok 1933. V letech 1946 až 1949 byla dokončena první kvantově polní teorie – kvantová teorie elektromagnetického pole, které dnes říkáme kvantová elektrodynamika (QED, *Quantum Electro-Dynamics*). Za její formulaci získali Nobelovu cenu za fyziku pro rok 1965 Richard Feynman (1918–1988), Shin-Itiro Tomonaga (1906–1979) a Julian Schwinger (1918–1994). Kvantová elektrodynamika je kvantovou analogií Maxwellových rovnic. Elektromagnetická interakce je způsobena polními částicemi, v tomto případě fotony, které si mezi sebou posílají nabité částice. Klasický pojem síly ztrácí svůj smysl. Feynmanovi se podařilo složité rovnice interpretovat za pomoci názorných grafů, kterým dnes říkáme Feynmanovy diagramy. Na obdobném základě byla později vytvořena také současná kvantová teorie slabé a silné interakce. Základním rysem těchto teorií jsou tzv. kalibrační symetrie, které předurčují způsob působení dané interakce na elementární částice.

Od počátku 60. let probíhaly snahy o spojení elektromagnetické a slabé interakce do jednoho jediného celku. Podařilo se to Stevenu Weinbergovi (1933), Abdusu Salamovi (1926–1996) a Sheldonu Glashowovi (1932). Za svou práci získali Nobelovu cenu za fyziku pro rok 1979. Jimi předpovězené polní částice slabé interakce W^+, W^- a Z^0 byly objeveny na přelomu let 1983 a 1984 v evropském středisku jaderného výzkumu CERN. Jejich objevitelé, Carlo Rubbia (1934) a Simon van der Meer (1925–2011) získali Nobelovu cenu ještě téhož roku (1984).

K pochopení silné interakce přispěl již ve 30. letech japonský fyzik Hideki Yuakawa (1907–1981). Za svou práci získal Nobelovu cenu za fyziku pro rok 1949. Současná kvantově polní teorie silné interakce se nazývá kvantová chromodynamika (QCD, *Quantum Chromo-Dynamics*) a za její formulaci a zejména za objev asymptotické volnosti silné interakce kvarků a gluonů získali Nobelovu cenu za fyziku pro rok 2004 Frank Wilczek (1951), David Gross (1941) a David Politzer (1949).

Kvantová mechanika slavila v průběhu 20. století mimořádné úspěchy. Jednoduchá teorie popisující mechanické děje postupně přerostla v polní kvantovou teorii schopnou úspěšně popsat hned tři ze čtyř základních přírodních interakcí. Tato cesta se samozřejmě neobešla bez potíží a problémů, nicméně vyústila v dnešní standardní model elementárních částic a interakcí. Bez kvantové teorie a hlubokého pochopení zákonitostí mikrosvěta bychom dnes neměli ani počítače ani jinou elektroniku.

Na počátku 20. století ale vznikala ještě jedna, neméně úspěšná teorie – obecná relativita. Z Maxwellovy elektrodynamiky plynulo, že rychlost světla by ve vakuu měla být univerzální konstantou a že by se neměla sčítat s rychlostí zdroje elektromagnetického vlnění. Tento výsledek byl na první pohled v rozporu s klasickou mechanikou, ve které se rychlost zdroje s rychlostí signálu sčítá. Řada experimentů potvrdila správnost elektrodynamiky. Bylo tedy třeba přeformulovat mechaniku tak, aby byla v souladu s Maxwellovou elektrodynamikou. To se v roce 1905 podařilo Albertu Einsteinovi v rámci tzv. speciální teorie relativity. Daň za sjednocení obou teorií byla veliká. Čas spolu s prostorem přestaly být absolutní. Délka letící tyče a časový úsek mezi dvěma událostmi ve skutečnosti závisejí na volbě souřadnicové soustavy pozorovatele.

Einsteinovy snahy o zobecnění speciální relativity na neinerciální souřadnicové soustavy vedly v roce 1915 ke vzniku obecné relativity – zcela nové teorie gravitace, která popisuje tuto interakci za pomoci zakřiveného času a prostoru. Za základ nové teorie lze chápat dvě myšlenky:

- každé těleso svou přítomností zakřivuje časoprostor kolem sebe;
- každé těleso se v tomto zakřiveném časoprostoru pohybuje po nejrovnějších možných drahách – tzv. *geodetikách*.

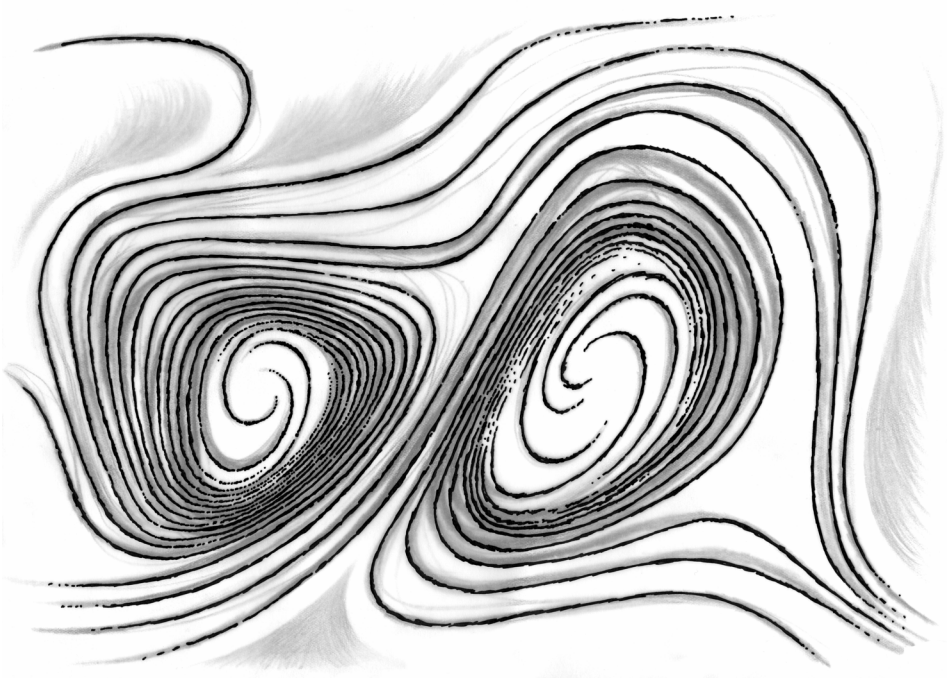
Nové chápání času a prostoru bylo zcela revoluční. Samotná tělesa se podílejí na vytváření času a prostoru, bez nich by čas a prostor neexistoval. Otázka, jak by vypadal vesmír bez přítomnosti těles, přestává mít smysl.

Fyzika dvacátého století se tak stala v jistém smyslu poněkud schizofrenní. Tři ze čtyř interakcí jsou popsány za pomoci výměnných (polních) částic v rámci kvantové teorie pole. A jedna interakce, gravitační, je popsána za pomoci pokřiveného světa obecné teorie relativity. Vyřešení mnoha fyzikálních hádanek s sebou přineslo ještě větší záhady. Existuje jednotná teorie všech čtyř interakcí? Je možné spojit kvantovou teorii a obecnou relativitu do jedné jediné teorie? Odpověď na tyto otázky zatím neznáme. Velké úspěchy slaví různé strunové teorie, ve kterých jsou částice chápány jako jednorozměrné kmitající útvary ve vícerozměrném světě, ale zda jde o krok správným směrem či nikoli, není v tuto chvíli jasné. V roce 2010 se objevila hypotéza holandského fyzika Erika Verlindeho, podle které by gravitace nemusela být skutečnou silou, ale jen statistickým projevem růstu entropie v mikrosvětě. Těžko odhadnout, zda tato odvážná myšlenka najde podporu v dalších experimentech, nebo jde o slepou uličku.

Pokud vás zajímají základní vlastnosti přírody a jejich teoretický popis, je třeba v první řadě začít se studiem klasické mechaniky, na kterou úzce navazuje mechanika kvantová. Další studium polních problémů zase není možné bez znalosti statistické fyziky. Proto by se tato učebnice pro vás mohla stát odrazovým můstkem k pochopení problémů současné fyziky a k dalšímu studiu podivných zákonitostí světa kolem nás.



1. Teoretická mechanika



1.1 Integrální principy mechaniky

V teoretické mechanice se hojně používá Einsteinova sumační konvence, diferenciálu a Lagrangeova věta o přírůstku. Pokud s těmito matematickými základy čtenář není seznámen, měl by si nejprve důkladně pročíst dodatek A, kde jsou tyto pojmy vysvětleny. Další informace ke studiu teoretické mechaniky může čtenář čerpat v učebnicích [2]–[6].

1.1.1 Základní pojmy z mechaniky

Mechanický systém

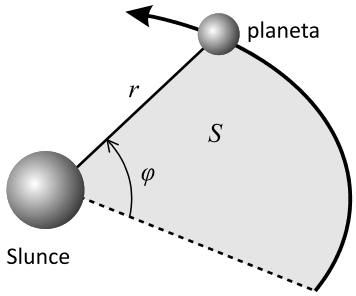
Mechanickým systémem nazýváme jakoukoli soustavu částic nebo těles, kterou se rozhodneme popisovat (elektron, atom, Zeměkoule, planetární systém, …).

Kartézské souřadnice

Kartézské souřadnice vycházejí ze tří navzájem kolmých a přímých os. Pro souřadnice používáme označení $\mathbf{x} \equiv \mathbf{r} \equiv (x_1, x_2, x_3) \equiv (x, y, z)$, resp. $\mathbf{F} \equiv (F_1, F_2, F_3) \equiv (F_x, F_y, F_z)$. Pohybová rovnice hmotného bodu má tvar $m\,\mathrm{d}^2\mathbf{x}/\mathrm{d}t^2 = \mathbf{F}$.

Zobecněné souřadnice

Za zobecněné souřadnice považujeme jakékoli parametry popisující pohyb (úhly, vzdálenosti, plochy). Označujeme je $\mathbf{q} = (q_1, q_2, \ldots)$.



Obr. 2: Souřadnice pro planetu obíhající kolem Slunce.

Příklad 1: pohyb planety kolem Slunce

$q_1 = r(t)$ – vzdálenost od Slunce,
$q_2 = \varphi(t)$ – úhel průvodiče a zadané polopřímky,
$q_3 = S(t)$ – plocha opsaná průvodičem.

Zobecněné rychlosti

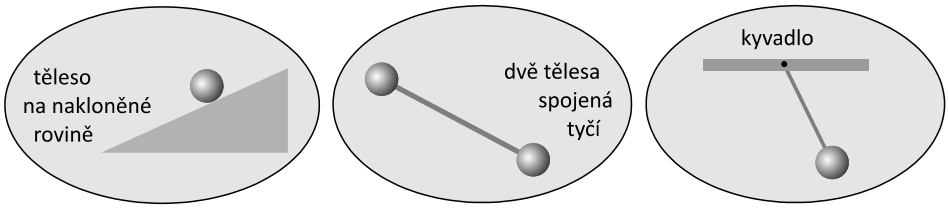
Zobecněnou rychlostí nazýváme časovou změnu zobecněné souřadnice.

Příklad 2

$v_r = \mathrm{d}r/\mathrm{d}t$	radiální rychlost,
$v_\varphi = \mathrm{d}\varphi/\mathrm{d}t$	úhlová rychlost,
$v_S = \mathrm{d}S/\mathrm{d}t$	plošná rychlost,
$v_x = \mathrm{d}x/\mathrm{d}t$	x-ová složka rychlosti.

Vazby

Těleso nebo některé jeho části se nemusí pohybovat zcela libovolně. Pak říkáme, že v systému jsou vazby. Příklad vazeb je na následujícím obrázku:



Obr. 3: Vazby v systému.

Stupeň volnosti

Stupni volnosti rozumíme počet nezávislých údajů (parametrů), kterými lze zcela popsat pohyb systému (značíme f).

Příklad 3

volný hmotný bod	$f = 3$,
N volných hmotných bodů	$f = 3N$,
hmotný bod na nakloněné rovině	$f = 2$,
2 hmotné body spojené tyčí	$f = 5$,
prostorové kyvadlo	$f = 2$,
rovinné kyvadlo	$f = 1$.

Pro systém N hmotných bodů s R vazbami platí $f = 3N - R$. Zobecněné souřadnice volíme vždy jako množinu nezávislých parametrů, které zcela popisují systém, tj. je jich právě f:

$$\mathbf{q} \equiv (q_1 , q_2 , ...q_f) .$$

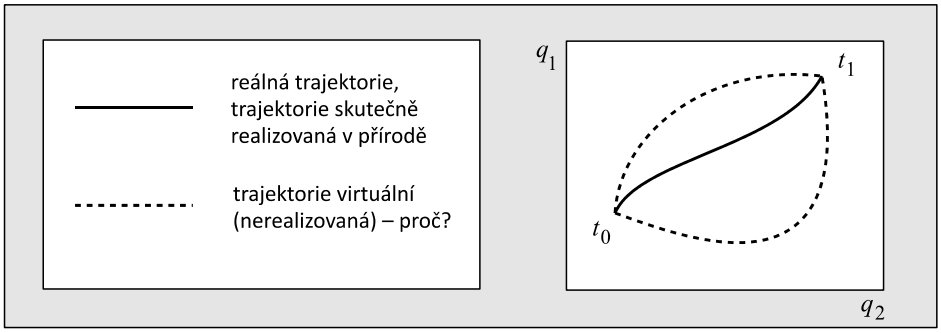
Konfigurační prostor

f-rozměrný prostor, do kterého zobrazujeme hodnoty zobecněných souřadnic. Bod konfiguračního prostoru nazýváme *konfigurací*. Časový vývoj konfigurace systému $\mathbf{q}(t)$ nazýváme *trajektorie*.

Stav systému

V klasické mechanice je v daném čase t_0 stav popisovaného systému zcela určen konfigurací $\mathbf{q} \equiv (q_1, q_2, \ldots q_f)$ a tendencí (zobecněnými rychlostmi) $\mathbf{v} \equiv (v_1, v_2, \ldots, v_f)$.

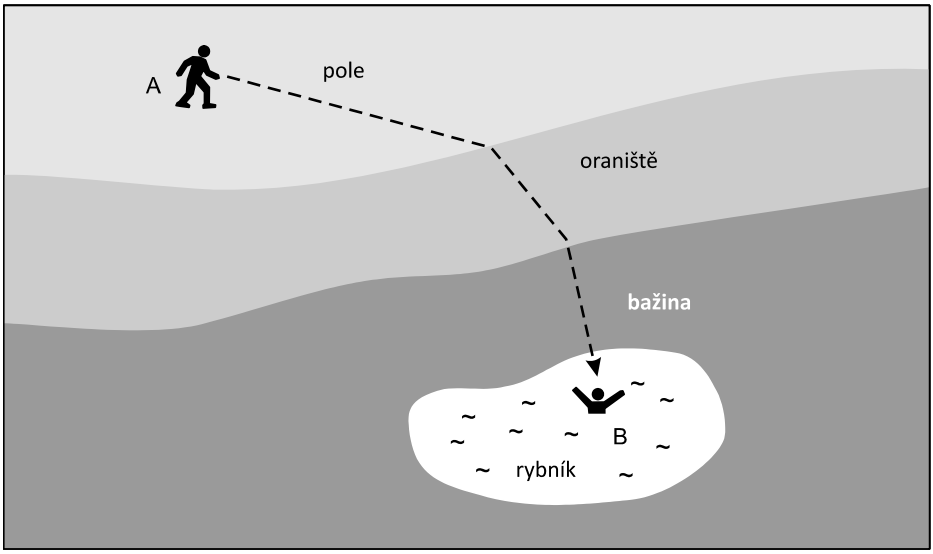
Reálná a virtuální trajektorie:



Obr. 4. Reálná a virtuální trajektorie.

1.1.2 Integrální principy

Příklad 4. Představme si, že v rybníku se topí člověk. Mezi zachráncem a rybníkem je bažinatý pás, ve kterém se velmi těžko pohybuje, pás orniště a pole. Zachránce musí volit optimální cestu, aby se k tonoucímu dostal co nejrychleji (takovou cestou nemusí být nejkratší spojnice mezi tonoucím a zachráncem):



Obr. 5: Jaká je optimální cesta k tonoucímu z hlediska času?

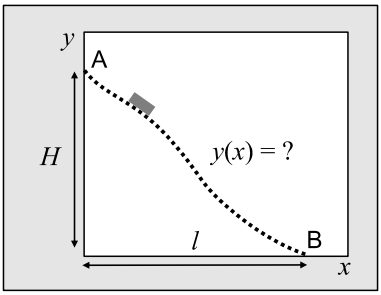
Celkový čas, po který se bude pohybovat zachránce, určíme takto:

$$v = \frac{\mathrm{d}l}{\mathrm{d}t} \quad \Rightarrow \quad \mathrm{d}t = \frac{\mathrm{d}l}{v} \quad \Rightarrow$$
$$T = \int_{t_A}^{t_B} \frac{\mathrm{d}l}{v} = \int_{t_A}^{t_B} \frac{\sqrt{\mathrm{d}x^2 + \mathrm{d}y^2}}{v(x,y)} = \int_{x_A}^{x_B} \frac{\sqrt{1+y'^2}}{v(x,y)}\,\mathrm{d}x\,.$$

Předpokládáme, že známe prostorovou závislost rychlosti $v(x, y)$. Ta je dána typem terénu (pole, oraniště, bažina). Nyní hledáme takovou křivku $y(x)$, aby předchozí integrál měl minimální hodnotu. Řešením úloh tohoto typu se zabývá variační počet.

◗

◖ **Příklad 5: brachystochrona.** Řešme následující úlohu. Těleso má klouzat po nakloněné rovině obecného tvaru mezi dvěma body A a B, které jsou v různé výšce. Úkolem je nalézt rovnici tvaru nakloněné roviny tak, aby se těleso do bodu B dostalo za nejkratší čas. Název křivky pochází z řečtiny (βραχιστος = nejkratší, χρονος = čas).



Obr. 6: Brachystochrona.

Výpočet je obdobný předchozímu:

$$v = \frac{\mathrm{d}l}{\mathrm{d}t} \quad \Rightarrow \quad \mathrm{d}t = \frac{\mathrm{d}l}{v} \quad \Rightarrow$$
$$T = \int_{t_A}^{t_B} \frac{\mathrm{d}l}{v(y)} = \int_{t_A}^{t_B} \frac{\sqrt{\mathrm{d}x^2 + \mathrm{d}y^2}}{v(y)} = \int_{x_A}^{x_B} \frac{\sqrt{1+y'^2}}{v(y)}\,\mathrm{d}x\,.$$

Rychlost určíme ze zákona zachování energie

$$mgy + \frac{1}{2}mv^2 = mgH\,.$$

Výsledná doba pohybu je

$$T = \int_{x_A}^{x_B} \sqrt{\frac{1+y'^2}{2g(H-y)}}\,\mathrm{d}x\,. \tag{1.1}$$

Nyní je nutné nalézt křivku $y(x)$, pro kterou nabývá integrál (1.1) svého minima – jde opět o typickou úlohu variačního počtu. Dokončení řešení naleznete na konci kapitoly 1.2.3. Variačně lze zformulovat i základní zákony mechaniky, teorii elektromagnetic-

kého pole i další fyzikální disciplíny. V této kapitole se budeme zabývat jedním z integrálních principů mechaniky – tzv. *Hamiltonovým principem*.

1.1.3 Hamiltonův princip nejmenší akce

Oba dva úvodní příklady vedly na optimalizaci integrálu typu

$$T(x_A, x_B) = \int_{x_A}^{x_B} F\left(x, y(x), y'(x)\right) \mathrm{d}x \,. \tag{1.2}$$

Integrand je funkcí nezávislé proměnné x, hledané funkce $y(x)$ a její první derivace $y'(x)$. Výsledkem optimalizace by měla být hledaná trajektorie či křivka $y(x)$. V úvodním příkladu zachránce volil trajektorii tak, aby celkový čas byl nejkratší. Všechny ostatní trajektorie (tzv. *virtuální* – nerealizované) jsou sice v principu možné, ale zachránce se po nich bude pohybovat delší dobu. Obdobně je tomu v příkladu s klouzajícím tělesem. Integrály výše uvedeného typu se nazývají *funkcionály*. Funkcionál je zobrazení, při kterém funkci přiřadíme číslo (v našem případě celkový čas).

Základní myšlenka integrálních principů mechaniky je velmi podobná. Ze všech možných trajektorií systému se realizovala jen ta, která je nějakým způsobem výhodnější než ostatní. Hledisko výhodnosti se uvažuje obdobné úvodnímu příkladu, jen je ale nezávislou proměnnou čas, protože hledáme křivku $\mathbf{q}(t)$.

Hamiltonův princip

Budeme předpokládat, že existuje funkce času t, zobecněných souřadnic a jejich prvních derivací (tj. stavu)

► $$L(t, q_1, \ldots, q_f, \dot{q}_1, \ldots, \dot{q}_f)$$

taková, že ze všech možných závislostí $q_k(t) = f_k(t)$ se v přírodě realizuje ta, pro kterou má integrál

► $$S(t_A, t_B) \equiv \int_{t_A}^{t_B} L(t, q_1, \ldots, q_f, \dot{q}_1, \ldots, \dot{q}_f)\, \mathrm{d}t \tag{1.3}$$

extrém (minimum). Funkci $L(t, \mathbf{q}, \mathrm{d}\mathbf{q}/\mathrm{d}t)$ nazýváme *Lagrangeovou funkcí* (*lagranžiánem*) a integrál $S(t_A, t_B)$ *integrálem akce.* Hamiltonův princip je základní axiom teorie.

1.1.4 Lagrangeovy rovnice

Zaveďme *virtuální posunutí*

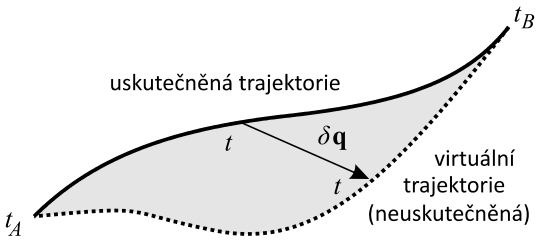
$$\begin{aligned} \delta q_k &= q_{k,\mathrm{virt}}(t) - q_{k,\mathrm{real}}(t)\,, \quad \text{resp.} \\ \delta \mathbf{q} &= \mathbf{q}_{\mathrm{virt}}(t) - \mathbf{q}_{\mathrm{real}}(t) \end{aligned} \tag{1.4}$$

jako infinitezimální rozdíl virtuální (myšlené) trajektorie a reálné (uskutečněné) trajektorie. Body na obou trajektoriích si odpovídají ve stejném čase (tzv. *izochronní variace*). Uveďme základní vlastnosti virtuálních posunutí:

► 1) $\delta\mathbf{q}(t_A) = \delta\mathbf{q}(t_B) = 0\,,$ (1.5)

► 2) $\delta\dot{\mathbf{q}} = \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\delta\mathbf{q}\,.$ (1.6)

První vlastnost vyjadřuje, že virtuální i reálné trajektorie začínají a končí ve stejném bodě konfiguračního prostoru. Druhá vlastnost vyjadřuje záměnnost operací derivace d/dt a variace δ.



Obr. 7: K definici virtuálního posunutí.

Poznámka: Vazby jsou v daném systému zahrnuty volbou zobecněných souřadnic – jejich celkový počet je roven počtu stupňů volnosti. Virtuální posunutí jsou posunutí ve shodě s vazbami v daném čase.

Odvoďme nyní nutné podmínky extremálnosti integrálu akce:

$$\delta\int_{t_A}^{t_B} L(t,\mathbf{q},\dot{\mathbf{q}})\,\mathrm{d}t = 0 \quad\Rightarrow\quad \int_{t_A}^{t_B} \delta\, L(t,\mathbf{q},\dot{\mathbf{q}})\,\mathrm{d}t = 0 \quad\Rightarrow\quad \int_{t_A}^{t_B}\left(\frac{\partial L}{\partial q_k}\delta q_k + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\delta\dot{q}_k\right)\mathrm{d}t = 0\,,$$

kde jsme z důvodu izochronnosti vynechali diferenciaci podle času. Druhý člen nyní za pomoci (1.6) integrujeme per partes:

$$\int_{t_A}^{t_B}\left(\frac{\partial L}{\partial q_k}\delta q_k - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\right)\delta q_k\right)\mathrm{d}t \;+\; \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\delta q_k\right]_{t_A}^{t_B} \;=\; 0\,.$$

Poslední člen je vzhledem k (1.5) nulový, a proto

$$\int_{t_A}^{t_B}\left(\frac{\partial L}{\partial q_k} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\right)\delta q_k\mathrm{d}t \;=\; 0\,.$$

Tato rovnost musí platit pro každé dva časy t_A, t_B a pro každé virtuální posunutí δq_k. Vzhledem k tomu, že δq_k jsou nezávislá (počet zobecněných souřadnic je roven počtu stupňů volnosti systému), musí být závorka v předchozím vztahu pro každé k nutně nulová, tj.:

► $$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \;-\; \frac{\partial L}{\partial q_k} \;=\; 0\,; \qquad k = 1,\ldots,f\,.$$ (1.7)

Tyto rovnice představují *nutné podmínky* extremálnosti integrálu akce a nazývají se *Lagrangeovy rovnice*. Z matematického hlediska jde o obyčejné diferenciální rovnice druhého řádu pro extremální trajektorii $q_k(t)$; $k = 1 \ldots f$, která je realizována v přírodě.

Poznámka 1: Lagrangeovy rovnice jsou pohybovými rovnicemi našeho systému v zobecněných souřadnicích. Jejich tvar nezávisí na volbě souřadnicové soustavy. Newtonovy rovnice musí být speciálním případem v kartézském souřadnicovém systému.

Poznámka 2: Rovnice je třeba doplnit o počáteční podmínky v čase $t_0 = t_A$

$$\blacktriangleright \qquad \begin{aligned} q_k(t_0) &= q_{k0}\,, \\ \dot{q}_k(t_0) &= \dot{q}_{k0}\,, \end{aligned} \tag{1.8}$$

tj. zadat stav v nějakém počátečním čase t_0.

Poznámka 3: Lagrangeova funkce není jednoznačně určitelná, liší-li se například dvě Lagrangeovy funkce o úplnou časovou derivaci libovolné funkce, potom pro obě Lagrangeovy funkce vyjdou stejné rovnice a tedy i stejné fyzikální řešení:

$$\tilde{L} = L + \mathrm{d}f/\mathrm{d}t\,; \qquad f = f(q,\dot{q}) \qquad \Rightarrow$$

$$\delta\int_{t_A}^{t_B}\tilde{L}\,\mathrm{d}t = \delta\int_{t_A}^{t_B}L\,\mathrm{d}t + \delta\int_{t_A}^{t_B}\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t}\mathrm{d}t = 0 + \delta\int_{A}^{B}\mathrm{d}f = \delta\big[f(B) - f(A)\big] = 0\,. \tag{1.9}$$

Tedy splňuje-li Hamiltonův variační princip původní Lagrangeova funkce, splňuje ho i nová (posunutá o d*f*/d*t*). Toho lze využít při úpravě hledané Lagrangeovy funkce (viz příklad 20 na konci kapitoly 1.4.6).

Poznámka 4: Hamiltonův princip v uvedené podobě platí jen pro nedisipativní systémy, tj. systémy, ve kterých nedochází k tepelným ztrátám.

Poznámka 5: Lagrangeovy rovnice jsou jen nutnými podmínkami extremálnosti integrálu akce, nikoli postačujícími.

Poznámka 6: V případě úvodních dvou příkladů, kdy nejde o hledání časové závislosti trajektorie, ale obecné řešení extremálnosti funkcionálu (1.2), jsou nutnými podmínkami Eulerovy rovnice

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\frac{\partial F}{\partial y'} - \frac{\partial F}{\partial y} = 0\,.$$

Poznámka 7: V matematice se nutné podmínky minima funkcionálu nazývají Eulerovy rovnice, ve fyzice nutné podmínky extremálnosti integrálu akce Lagrangeovy rovnice. Někdy se těmto rovnicím jednoduše společně říká Eulerovy-Lagrangeovy rovnice.

Nejdůležitější úlohou daného vědního oboru je volba správné Lagrangeovy funkce. Zvolíme-li určitý tvar Lagrangeovy funkce, můžeme řešit příslušné Lagrangeovy rovnice a tato řešení porovnat s experimentálním průběhem trajektorií. Nesouhlasí-li, je vybraná Lagrangeova funkce špatná. Volba Lagrangeovy funkce patří mezi základní *axiomy* budované teorie. Zpravidla se za L vybírá vhodná skalární funkce (její hodnota

nezávisí na volbě souřadnic). Pro jednoduché mechanické problémy známe dvě důležité skalární funkce: kinetickou a potenciální energii. V nejjednodušším případě by Lagrangeova funkce mohla být jejich lineární kombinací $L = \alpha T + \beta V$. Skutečně lze ukázat, že pro volbu $\alpha = 1$, $\beta = -1$ dostáváme správné pohybové rovnice, v kartézském souřadnicovém systému jde o rovnice Newtonovy (viz příklad 6 v následující kapitole). Proto

$$L(t, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) = T(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) - V(t, \mathbf{q}) \,. \tag{1.10}$$

Potenciální energie závisí na poloze (potence – poloha). Pro komplikovanější systémy je rozdělení Lagrangeovy funkce na kinetickou a potenciální energii značně obtížné a navíc zbytečné. Jedinou úlohou mechaniky je volba správné Lagrangeovy funkce pro daný systém tak, aby řešení příslušných Lagrangeových rovnic odpovídalo pozorovaným trajektoriím. Naopak, jak uvidíme později, na základě různých symetrií systému lze za pomoci Lagrangeovy funkce definovat takové veličiny, jako je energie, hybnost, moment hybnosti systému atd.

Vhodnou Lagrangeovu funkci lze nalézt i pro relativistickou mechaniku, pohyby nabitých částic v elektrických a magnetických polích, pro teorii elektromagnetického pole, pro obecnou teorii relativity i pro další fyzikální obory. Vždy z ní potom plynou rovnice popisující daný problém – např. v teorii elektromagnetického pole Maxwellovy rovnice.

1.1.5 Jednoduché příklady

◖ **Příklad 6: hmotný bod v potenciálním poli *V*.** Hmotný bod má tři stupně volnosti, za zobecněné souřadnice zvolíme

$$q_1 = x \,; \qquad q_2 = y \,; \qquad q_3 = z \,,$$

potom

$$\begin{aligned} T(\dot{x}, \dot{y}, \dot{z}) \;&=\; \frac{1}{2} m \left(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2 \right) ; \\ V(x, y, z) \;&\cdots\; \text{daná funkce} \,; \\ L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) \;&=\; T - V \;=\; \frac{1}{2} m \left(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2 \right) \;-\; V(x, y, z) \,. \end{aligned}$$

Příslušné Lagrangeovy rovnice mají tvar

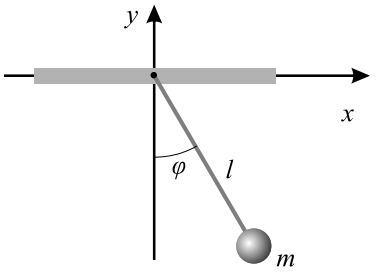
$$\begin{aligned} &\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} \;=\; 0 \qquad \Rightarrow \qquad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} (m\dot{x}) + \frac{\partial V}{\partial x} \;=\; 0 \qquad \Rightarrow \qquad m\,\ddot{x} \;=\; -\frac{\partial V}{\partial x} \,; \\ &\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} - \frac{\partial L}{\partial y} \;=\; 0 \qquad \Rightarrow \qquad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} (m\dot{y}) + \frac{\partial V}{\partial y} \;=\; 0 \qquad \Rightarrow \qquad m\,\ddot{y} \;=\; -\frac{\partial V}{\partial y} \,; \\ &\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \frac{\partial L}{\partial \dot{z}} - \frac{\partial L}{\partial z} \;=\; 0 \qquad \Rightarrow \qquad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} (m\dot{z}) + \frac{\partial V}{\partial z} \;=\; 0 \qquad \Rightarrow \qquad m\,\ddot{z} \;=\; -\frac{\partial V}{\partial z} \,. \end{aligned}$$

Všechny tři pohybové rovnice můžeme přepsat do běžného tvaru

$$m\,\ddot{\mathbf{x}} \;=\; \mathbf{F} \,; \quad \mathbf{F} \;\equiv -\nabla V \,.$$

◗

◖ **Příklad 7: rovinné kyvadlo.** Rovinné kyvadlo má jediný stupeň volnosti. Za zobecněnou souřadnici zvolíme úhel φ:



$$x(t) = l\sin\varphi(t)\,; \quad y(t) = -l\cos\varphi(t)\,,$$
$$\dot{x} = l\dot{\varphi}\cos\varphi\,; \quad \dot{y} = l\dot{\varphi}\sin\varphi\,,$$
$$T = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2+\dot{y}^2) = \frac{1}{2}ml^2\dot{\varphi}^2\,,$$
$$V = mgy = -mgl\cos\varphi\,,$$
$$L = T - V = \frac{1}{2}ml^2\dot{\varphi}^2 + mgl\cos\varphi\,.$$

Odpovídající Lagrangeova rovnice je

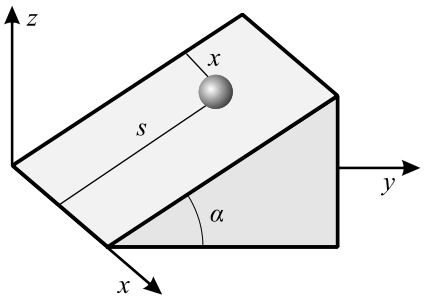
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial\dot{\varphi}} - \frac{\partial L}{\partial\varphi} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \ddot{\varphi} + \frac{g}{l}\sin\varphi = 0\,.$$

Pro malé úhly je $\sin\varphi \approx \varphi$ a rovnice přejde ve známou rovnici pro matematické kyvadlo

$$\ddot{\varphi} + \frac{g}{l}\varphi = 0\,.$$

◗

◖ **Příklad 8: pohyb po nakloněné rovině.** Pohyb po nakloněné rovině má dva stupně volnosti. Za zobecněné souřadnice budeme volit vzdálenosti od hran nakloněné roviny x, s. Standardním postupem získáme



$$x(t) = x(t)\,,$$
$$y(t) = s(t)\cos\alpha\,,$$
$$z(t) = s(t)\sin\alpha\,,$$
$$T = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2+\dot{y}^2+\dot{z}^2) = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2+\dot{s}^2)\,,$$
$$V = mgz = mgs\sin\alpha\,,$$
$$L(s,\dot{x},\dot{s}) = T - V = \frac{m}{2}(\dot{x}^2+\dot{s}^2) - mgs\sin\alpha$$

a pohybové rovnice jsou

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial\dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} = 0\,,$$
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial\dot{s}} - \frac{\partial L}{\partial s} = 0\,.$$

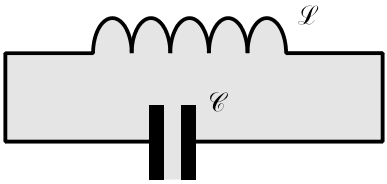
Po dosazení za L získáme finální tvar rovnic pro pohyb na nakloněné rovině:

$$\ddot{x} = 0\,,$$
$$\ddot{s} = -g\sin\alpha\,.$$

◗

1.1.6 Další příklady

◖ **Příklad 9: LC obvod.** Za zobecněnou souřadnici budeme volit náboj $Q(t)$ odteklý z kondenzátorové baterie. Zobecněnou rychlostí je elektrický proud $I = \mathrm{d}Q/\mathrm{d}t$.



Obr. 10: LC obvod.

Označíme-li indukčnost $\mathscr{L}$ a kapacitu $\mathscr{C}$, potom Lagrangeova funkce

$$L(Q,\dot{Q}) = \frac{1}{2}\mathscr{L}\dot{Q}^2 - \frac{Q^2}{2\mathscr{C}}$$

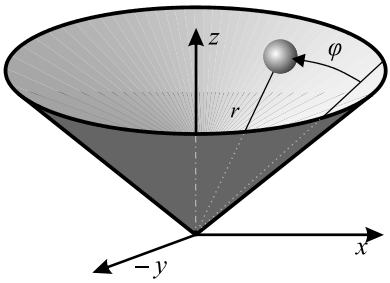
poskytne správnou rovnici LC obvodu:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}} - \frac{\partial L}{\partial Q} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \ddot{Q} + \frac{1}{\mathscr{L}\mathscr{C}}Q = 0\,.$$

Povšimněte si, že první člen v Lagrangeově funkci je energie vázaná v magnetickém poli cívky a druhý člen energie kondenzátorové baterie. Lagrangeova funkce má opět strukturu podobnou jako v mechanice. Úlohu kinetické energie přebírá energie na cívce a úlohu potenciální energie má v tomto příkladu energie vázaná na kondenzátoru.

◗

◖ **Příklad 10: hmotný bod v tíži na kuželové ploše.** Pohyb má dva stupně volnosti. Za zobecněné souřadnice budeme volit vzdálenost částice od vrcholu kužele r a polární úhel φ. Využijeme tedy dvě ze sférických souřadnic, třetí – odklon θ_0 od osy z je na kuželové ploše konstantní. Za použití (A.30) příp. (A.33) snadno odvodíme



$$x(t) = r(t)\cos\varphi(t)\sin\theta_0\,,$$
$$y(t) = r(t)\sin\varphi(t)\sin\theta_0\,,$$
$$z(t) = r(t)\cos\theta_0\,;$$
$$T(r,\dot{r},\dot{\varphi}) = \frac{m}{2}(\dot{r}^2 + r^2\sin^2\theta_0\,\dot{\varphi}^2)\,;$$
$$V(r) = mgz = mgr\cos\theta_0\,;$$
$$L(r,\dot{r},\dot{\varphi}) = \frac{m}{2}(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2\sin^2\theta_0) - mgr\cos\theta_0\,.$$

Odpovídající Lagrangeovy rovnice jsou

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{r}} - \frac{\partial L}{\partial r} = 0\,; \qquad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} - \frac{\partial L}{\partial \varphi} = 0\,.$$

Po dosazení máme:

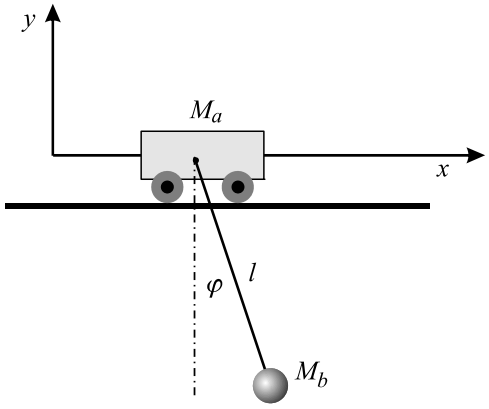
$$m\ddot{r} = mr\sin^2\theta_0\dot{\varphi}^2 - mg\cos\theta_0\,,$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(mr^2\dot{\varphi}\sin^2\theta_0\right) = 0\,.$$

Povšimněte si, že v rovnici pro r na pravé straně vystupuje součet síly odstředivé a příslušné komponenty síly gravitační. Rovnice pro úhel φ není nic jiného než zákon zachování momentu hybnosti.

Příklad 11: kyvadlo na vozíčku. Vodorovně pohyblivý závěs můžeme realizovat např. vozíčkem na kolejničce. Systém má dva stupně volnosti. Za zobecněné souřadnice zvolíme vodorovnou polohu $x(t)$ vozíčku a úhel $\varphi(t)$ kyvadla. Kartézské souřadnice vozíčku budeme značit indexem a a kartézské souřadnice kyvadla indexem b. Další postup je již standardní.

$$x_a(t) = x(t)\,; \qquad x_b(t) = x(t) + l\sin\varphi(t)\,,$$
$$y_a(t) = 0\,; \qquad y_b(t) = -\,l\cos\varphi(t)\,;$$
$$L(\varphi,\dot{x},\dot{\varphi}) = \frac{1}{2}M_a\left(\dot{x}_a^2 + \dot{y}_a^2\right) + \frac{1}{2}M_b\left(\dot{x}_b^2 + \dot{y}_b^2\right) - M_a g y_a - M_b g y_b =$$
$$= \frac{1}{2}M_a\,\dot{x}^2 + \frac{1}{2}M_b\left(\dot{x}^2 + l^2\dot{\varphi}^2 + 2l\dot{x}\dot{\varphi}\cos\varphi\right) + M_b\,gl\cos\varphi\,.$$



Obr. 12: Kyvadlo na vozíčku (příklad pochází od Lva Davidoviče Landaua).

1.2 Zákony zachování v přírodě

1.2.1 Teorém Emmy Noetherové

Objev každé veličiny, která se v průběhu časového vývoje systému nemění (zachovává), je pro fyziku velmi důležitý. Tyto veličiny v mechanice nazýváme integrály pohybu. Připomeňme některé zákony zachování: zákon zachování hybnosti, momentu hybnosti, energie; v kvantové teorii zákon zachování elektrického náboje, spinu, izospinu, baryonového čísla, parity atd.

Je třeba vyjasnit, jaká je podstata těchto zákonů zachování a za jakých podmínek jsou splněny. To se teoreticky podařilo Emmě Noetherové v roce 1916:

> S každou symetrií v přírodě souvisí nějaká zachovávající se fyzikální veličina. Tato veličina je danou symetrií definována a zachovává se jen tehdy, dokud výchozí symetrie platí.

Při pozorování jevů kolem nás je tedy velmi důležité vyhledávat nejrůznější symetrie. Uveďme nyní příklady některých symetrií:

1) Na pracovním stole jsme zkonstruovali nějaký mechanický stroj. Stroj spustíme a budeme sledovat jeho chování. Jestliže stejný experiment provedeme na stejném psacím stole v sousední místnosti, výsledek bude stejný. Provedeme-li ale tentýž experiment na stole v místnosti o patro výše, může dopadnout jinak, protože gravitační pole Země má na tomto stole jinou hodnotu. Tato fyzikální situace je *symetrická vzhledem k vodorovnému posunutí*, ale není symetrická vzhledem k svislému posunutí.

2) Vodičem teče konstantní proud. Kolem vodiče se vytvořilo časově neproměnné (stacionární) magnetické pole. Do tohoto pole vypustíme elektron a budeme sledovat jeho trajektorii. Vypustíme-li elektron o minutu později (počáteční rychlost a poloha elektronu musí být stejná), bude výsledná trajektorie totožná. Zde hovoříme o *symetrii vzhledem k časovému posunutí*. Kdyby proud nebyl konstantní, tato symetrie bude porušena, magnetické pole bude v různých časech různé a trajektorie elektronů budou odlišné.

3) Při silné interakci (ta udržuje pohromadě atomové jádro) se neutron i proton chovají stejně, při elektromagnetické interakci různě (proton je nabitý). *Výměna neutronu za proton nebo protonu za neutron je symetrickou operací při silné interakci*, nesymetrickou při elektromagnetické.

4) *Příklady dalších symetrií*: rotační symetrie; zrcadlová symetrie (záměna levého a pravého); výsledek experimentů je stejný ve všech souřadnicových systémech pohybujících se vůči sobě rovnoměrně přímočaře (Lorentzova symetrie).

V teoretické mechanice se seznámíme se zákonem zachování hybnosti, momentu hybnosti a energie a se symetriemi, které těmto zákonům zachování odpovídají. V kvantové

teorii se seznámíme s některými z dalších důležitých symetrií, které vedou k zachování elektrického náboje, spinu, izospinu, parity, barvy a vůně kvarků a dalších kvantových čísel.

1.2.2 Zákon zachování hybnosti

Představme si, že Lagrangeova funkce nezávisí na některé zobecněné souřadnici, konkrétně q_k :

$$L = L(t, q_1, \ldots, q_{k-1}, q_{k+1}, \ldots, q_f, \dot{q}_1, \ldots, \dot{q}_f) \qquad \Leftrightarrow \qquad \frac{\partial L}{\partial q_k} = 0 \,. \tag{1.11}$$

Zobecněnou souřadnici, která se nevyskytuje v Lagrangeově funkci, nazýváme *cyklickou*. Na q_k potom nezávisí ani pohybové rovnice, a tím ani výsledek experimentu. *Situace je symetrická vůči prostorovému posunutí v zobecněné souřadnici* q_k (translační symetrie, viz první příklad symetrií). Z pohybové rovnice pro tuto souřadnici q_k máme

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial L}{\partial q_k} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} = \text{const} \,.$$

Nalezli jsme tedy příslušnou zachovávající se veličinu.

Definice zobecněné hybnosti

Zobecněnou hybností odpovídající zobecněné souřadnici q_k nazveme

► $$p_k \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \,, \qquad k = 1, \ldots, f \,. \tag{1.12}$$

Tato veličina se zachovává, je-li zobecněná souřadnice q_k cyklická (nevyskytuje se v L), tj. fyzikální situace je symetrická vzhledem k prostorovému posunutí v zobecněné souřadnici q_k. Určeme nyní zobecněné hybnosti k příkladům 6 až 11 z kapitol 1.1.5 a 1.1.6.

◖ **Příklad 6: hmotný bod v potenciálovém poli V (dokončení)**

$$p_x \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} \,; \qquad p_y \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} = m\dot{y} \,; \qquad p_z \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{z}} = m\dot{z} \,.$$

Zachování či nezachování hybnosti bude záviset na tvaru potenciální energie $V(x, y, z)$.

Příklad 7: rovinné kyvadlo (dokončení)

$$p_\varphi \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = m l^2 \dot{\varphi} \,.$$

Fyzikální situace není symetrická vzhledem k pootočení o úhel $\delta\varphi$ (změní se gravitační pole), proto se souřadnice φ vyskytuje v L a tato zobecněná hybnost se nezachovává.

Poznámka: Zobecněná hybnost k úhlové proměnné se v klasické mechanice nazývá *moment hybnosti*.

Příklad 8: pohyb po nakloněné rovině (dokončení)

$$p_x \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}\,; \qquad p_s \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{s}} = m\dot{s}\,.$$

Situace je symetrická vzhledem k posunutí v souřadnici x, souřadnice x je cyklická a hybnost p_x se zachovává. Při posunutí v souřadnici s se mění gravitační pole, L závisí na s a hybnost p_s se nezachovává.

Příklad 9: LC obvod (dokončení)

$$p_Q \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}} = \mathscr{L}\dot{Q}\,.$$

Zobecněná hybnost p_Q (magnetický indukční tok) se nezachovává, Q není cyklická souřadnice.

Příklad 10: hmotný bod v tíži na kuželové ploše (dokončení)

$$p_r \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m\dot{r}\,; \qquad p_\varphi \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = mr^2 \sin^2\theta_0\ \dot{\varphi}\,.$$

Radiální hybnost p_r se nezachovává (při posunutí v r se mění gravitační pole), moment hybnosti p_φ se zachovává – situace je symetrická vzhledem k pootočení v úhlu φ, který je cyklickou souřadnicí.

Příklad 11: kyvadlo na vozíčku (dokončení)

$$p_x \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = (M_a + M_b)\,\dot{x} + M_b l\dot{\varphi}\cos\varphi\,; \qquad p_\varphi \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = M_b\, l^2\,\dot{\varphi} + M_b \dot{x} l\cos\varphi\,.$$

Zachovává se hybnost soustavy p_x , nezachovává se moment hybnosti p_φ

◗

1.2.3 Zákon zachování energie

Nechť Lagrangeova funkce nezávisí explicitně na čase (postačí, aby některé z nekonečně mnoha ekvivalentních vyjádření Lagrangeovy funkce nezáviselo na čase), tj.

$$L = L(q_1,\ldots,q_f,\dot{q}_1,\ldots,\dot{q}_f) \qquad \Leftrightarrow \qquad \frac{\partial L}{\partial t} = 0\,. \tag{1.13}$$

To odpovídá situaci symetrické vůči časovému posunutí. Najděme úplnou časovou derivaci Lagrangeovy funkce:

$$\frac{\mathrm{d}L}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial L}{\partial t} + \frac{\partial L}{\partial q_k}\dot{q}_k + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\dot{q}_k)\,.$$

Vzhledem k předpokladu je první člen na pravé straně nulový, $\partial L/\partial q_k$ vyjádříme z Lagrangeovy rovnice (1.7) a máme

$$\frac{\mathrm{d}L}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\right)\dot{q}_k + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\dot{q}_k)\,.$$

Členy napravo upravíme za pomoci vztahu pro derivaci součinu dvou funkcí

$$\frac{\mathrm{d}L}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\,\dot{q}_k\right)$$

a po převedení na jednu stranu rovnosti zjistíme, že

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\dot{q}_k - L\right) = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\dot{q}_k - L = \mathrm{const}\,.$$

Opět jsme tedy našli zachovávající se veličinu.

Definice zobecněné energie

Zobecněnou energií nazveme

► $$E \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\dot{q}_k - L\,. \tag{1.14}$$

Tato veličina se zachovává, nezávisí-li Lagrangeova funkce explicitně na čase, tj. je-li fyzikální situace symetrická vzhledem k časovému posunutí.

V příkladech 6 až 11 se energie zachovává, Lagrangeovy funkce nezávisí explicitně na čase, všechny situace jsou symetrické vůči časovému posunutí. Postupně máme:

$$E_6 = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\dot{x} + \frac{\partial L}{\partial \dot{y}}\dot{y} + \frac{\partial L}{\partial \dot{z}}\dot{z} - L = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) + V(x,y,z)\,,$$

$$E_7 = \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}}\dot{\varphi} - L = \frac{1}{2}ml^2\dot{\varphi}^2 - mgl\cos\varphi\,,$$

$$E_8 = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\dot{x} + \frac{\partial L}{\partial \dot{s}}\dot{s} - L = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{s}^2) + mgs\sin\alpha\,,$$

$$E_9 = \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}}\dot{Q} - L = \frac{1}{2}\mathscr{L}\dot{Q}^2 + \frac{Q^2}{2\mathscr{C}}\,,$$

$$E_{10} = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}}\dot{r} + \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}}\dot{\varphi} - L = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\sin^2\theta_0\dot{\varphi}^2) + mgr\cos\theta_0\,,$$

$$E_{11} = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\dot{x} + \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}}\dot{\varphi} - L = \frac{1}{2}M_a\dot{x}^2 + \frac{1}{2}M_b(\dot{x}^2 + l^2\dot{\varphi}^2 + 2l\dot{x}\dot{\varphi}\cos\varphi) - M_b gl\cos\varphi\,.$$

Povšimněte si, že ve všech těchto jednoduchých příkladech je

$$E = T + V\,. \tag{1.15}$$

Tato relace ale platí jen pro speciální tvary Lagrangeovy funkce. V obecném případě *nelze Lagrangeovu funkci ani energii rozdělit na kinetickou a potenciální část*. Energie je však i nadále vždy definována vztahem (1.14).

◖ **Příklad 12: nezachování energie.** Uveďme na závěr příklad, kdy se energie nezachovává. Uvažujme kyvadlo, jehož závěs je pomalu namotáván pomocným motorkem v místě úchytu (jeřáb se zavěšeným břemenem). Délka závěsu se s časem zkracuje

$$l = l_0 - ct\,,$$

c je rychlost navíjení. Lagrangeova funkce kyvadla

$$L = \frac{1}{2} m(l_0 - ct)^2 \dot{\varphi}^2 + mg(l_0 - ct)\cos\varphi$$

nyní explicitně závisí na čase a energie se nezachovává. Rozhoupejme kyvadlo a sledujme jeho kmity. Udělejme totéž o minutu později. Experiment dopadne jinak, protože se závěs mezitím poněkud zkrátil. Fyzikální situace není symetrická vzhledem k časovému posunutí. Důvod nezachování energie je zde zřejmý – přídavný motorek, který není započten do našeho systému.

◗

Vidíme tedy, že základní zákony zachování v mechanice jsou přímým důsledkem vlastností prostoru a času kolem nás. Je-li prostor homogenní (stejný ve všech svých bodech), zachovává se hybnost; je-li prostor izotropní (stejný ve všech směrech), zachovává se moment hybnosti; je-li prostor neměnný v čase, zachovává se energie.

homogenita prostoru	→	zachování hybnosti
izotropie prostoru	→	zachování momentu hybnosti
neměnnost v čase	→	zachování energie

◖ **Příklad 5: brachystochrona (dokončení)**

Nyní máme dostatečné matematické znalosti na vyřešení příkladu na brachystochronu z úvodu kapitoly 1.1.2. Úkolem bylo nalézt křivku mezi dvěma body, po které se těleso dostane za nejkratší dobu samovolným klouzáním z bodu A do bodu B, jejichž výškový rozdíl je H. Úloha vedla na hledání minima funkcionálu (1.1)

$$T = \int_{x_A}^{x_B} \sqrt{\frac{1+y'^2}{2g(H-y)}}\,\mathrm{d}x\,.$$

Nezávislou proměnnou v této úloze není čas, ale prostorová souřadnice x. Eulerovy-Lagrangeovy rovnice proto budou mít tvar:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\frac{\partial F}{\partial y'} - \frac{\partial F}{\partial y} = 0\,; \qquad F = \sqrt{\frac{1+y'^2}{2g(H-y)}}\,.$$

Přímé řešení by bylo značně nevýhodné. Pokud si povšimneme, že nezávislá proměnná x není ve funkcionálu zastoupena, musí se zachovávat „energie“

$$E \equiv \frac{\partial F}{\partial y'}y' - F \qquad \Rightarrow \qquad \frac{y'}{\sqrt{2g(H-y)}}\frac{1}{\sqrt{1+y'^2}}y' - \sqrt{\frac{1+y'^2}{2g(H-y)}} = E_0\,.$$

Jde o první integrál Eulerových-Lagrangeových rovnic a tedy o diferenciální rovnici prvního řádu. Povšimněte si, že „energie“ není v tomto případě rozdělitelná na „kinetic-

kou“ část s derivacemi hledané funkce a „potenciální“ bez derivací. Po jednoduché úpravě máme

$$E_0\sqrt{2g(H-y)}\sqrt{1+y'^2}=-1\,.$$

Výraz umocníme na druhou

$$2E_0^2 g(H-y)(1+y'^2)=1 \qquad \Rightarrow$$
$$H-y=\frac{K}{1+y'^2}\,; \qquad K\equiv\frac{1}{2E_0^2 g}\,.$$

Nejjednodušší integrace je parametrická, tj. substituce $y' = \mathrm{tg}\,\varphi$. Parametrické řešení pro y potom je

$$H-y=\frac{K}{1+\mathrm{tg}^2\,\varphi} \qquad \Rightarrow \qquad y=H-K\cos^2\varphi\,. \tag{1.16}$$

Zbývá nalézt řešení pro x z definičního vztahu pro substituci, $\mathrm{d}y/\mathrm{d}\varphi$ vyjádříme z (1.16):

$$y'=\mathrm{tg}\,\varphi \qquad \Rightarrow \qquad \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}\varphi}\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x}=\frac{\sin\varphi}{\cos\varphi} \qquad \Rightarrow \qquad 2K\sin\varphi\cos\varphi\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x}=\frac{\sin\varphi}{\cos\varphi}\,.$$

Separací máme

$$\mathrm{d}x=2K\cos^2\varphi\,\mathrm{d}\varphi\ ,$$

po integraci

$$x=K\varphi+K(\sin 2\varphi)/2+L\,. \tag{1.17}$$

Integrační konstanty K a L ve vztazích (1.16), (1.17) lze určit z toho, že řešení musí procházet body $(0, H)$ a $(l, 0)$. Pro naše účely postačí jen obecné řešení, které je částí cykloidy:

$$x=K\varphi+K(\sin 2\varphi)/2+L\,;$$
$$y=H-K\cos^2\varphi\,.$$

1.3 Hamiltonovy kanonické rovnice

V této kapitole se seznámíme s jiným tvarem pohybových rovnic – Hamiltonovými rovnicemi. Na rozdíl od Lagrangeových rovnic (diferenciální rovnice 2. řádu) jsou Hamiltonovy rovnice diferenciální rovnice 1. řádu, ale je jich dvojnásobné množství.

1) Pro řešení diferenciálních rovnic prvního řádu je vypracováno velké množství numerických metod, a tak Hamiltonovy rovnice bývají většinou pro numerické řešení vhodnější než rovnice Lagrangeovy.

2) Za pomoci Hamiltonových rovnic lze snadno zapsat časový vývoj libovolné dynamické proměnné, tj. nejenom zvolených zobecněných souřadnic.

3) Hamiltonovy rovnice lze přepsat do velmi jednoduchého tvaru za pomoci tzv. Poissonových závorek, které z matematického hlediska představují Lieovu algebru. Vlastnosti Lieovy algebry jsou určeny nezávisle na objektech, které ji tvoří. Proto bude možné tuto strukturu snadno přenést do kvantové mechaniky.

1.3.1 Hamiltonovy rovnice

S pomocí definice zobecněné hybnosti (1.12) můžeme Lagrangeovy rovnice (1.7) přepsat do tvaru

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial L}{\partial q_k} = 0 \quad \wedge \quad p_k \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \qquad \Rightarrow \qquad \dot{p}_k \equiv \frac{\partial L}{\partial q_k}, \tag{1.18}$$

který silně připomíná Newtonovy rovnice v kartézských souřadnicích. Najděme nyní diferenciál energie za pomoci jejího definičního vztahu (1.14)

$$E = p_k \dot{q}_k - L(t, q, \dot{q}) \qquad \Rightarrow$$
$$\mathrm{d}E = \dot{q}_k \,\mathrm{d}p_k + p_k \,\mathrm{d}\dot{q}_k - \frac{\partial L}{\partial t}\mathrm{d}t - \frac{\partial L}{\partial q_k}\mathrm{d}q_k - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\mathrm{d}\dot{q}_k .$$

V předposledním členu vyjádříme $\partial L/\partial q_k$ z pohybové rovnice (1.18), v posledním členu využijeme definici zobecněné hybnosti:

$$\mathrm{d}E = \dot{q}_k \,\mathrm{d}p_k + p_k \,\mathrm{d}\dot{q}_k - \frac{\partial L}{\partial t}\mathrm{d}t - \dot{p}_k \,\mathrm{d}q_k - p_k \,\mathrm{d}\dot{q}_k .$$

Členy s diferenciály zobecněných rychlostí se odečtou a zbývá

$$\mathrm{d}E = -\frac{\partial L}{\partial t}\mathrm{d}t - \dot{p}_k \,\mathrm{d}q_k + \dot{q}_k \,\mathrm{d}p_k . \tag{1.19}$$

Funkci, jejíž diferenciál jsme právě nalezli, označíme

$$E = H(t, \mathbf{q}, \mathbf{p}). \tag{1.20}$$

Koeficienty v diferenciálu (1.19) musí být příslušné parciální derivace funkce H:

$$-\frac{\partial L}{\partial t}=\frac{\partial H}{\partial t}; \qquad -\dot{p}_k=\frac{\partial H}{\partial q_k}; \qquad \dot{q}_k=\frac{\partial H}{\partial p_k}. \tag{1.21}$$

Funkce H se nazývá *Hamiltonova funkce*. Hamiltonova funkce je energie přepsaná do proměnných t, q_k, p_k. V (1.19) se odečetly diferenciály rychlostí, proto lze vždy nalézt takovou transformaci

$$t, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}} \qquad \rightarrow \qquad t, \mathbf{q}, \mathbf{p}, \tag{1.22}$$

aby energie byla funkcí zobecněných souřadnic a zobecněných hybností. Tato transformace se nazývá *Legendreova duální transformace*. Poslední dvě rovnice z relace (1.21) jsou *Hamiltonovy kanonické rovnice* (kanos = zákon, souhrn pravidel):

► $$\dot{q}_k=\frac{\partial H}{\partial p_k}; \qquad \dot{p}_k=-\frac{\partial H}{\partial q_k}. \tag{1.23}$$

Při řešení problému Hamiltonovými rovnicemi

1) určíme z Lagrangeovy funkce zobecněné hybnosti a zobecněnou energii,
2) ze zobecněné energie vyloučíme zobecněné rychlosti. Vyjádříme je za pomoci zobecněných hybností, tj. provedeme tzv. *Legendreovu duální transformaci*,
3) sestavíme Hamiltonovy rovnice,
4) řešíme je současně pro polohy i hybnosti.

Hamiltonovy rovnice jsou rovnice pro určení časového vývoje proměnných $q_k(t)$, $p_k(t)$. Jsou diferenciálními rovnicemi prvního řádu, je jich ale dvojnásobné množství než Lagrangeových rovnic 2. řádu. Soustavu Hamiltonových rovnic musíme doplnit počátečními podmínkami

$$q_k(t_0)=q_{k0}; \qquad p_k(t_0)=p_{k0}. \tag{1.24}$$

◖ Příklad 13: rovinný pohyb planety (2D úloha)

Hmotnost planety označíme m, hmotnost Slunce M. Předpokládáme $M \gg m$; tj. Slunce se nepohybuje. Pohyb má dva stupně volnosti, za zobecněné souřadnice zvolíme polární souřadnice $q_1 = r(t)$; $q_2 = \varphi(t)$, tj. vzdálenost planety od Slunce a úhel spojnice planety se Sluncem měřený od zvolené polopřímky. Z (A.33) a z gravitačního zákona víme, že

$$T=\frac{1}{2}m(\dot{r}^2+r^2\dot{\varphi}^2), \qquad V=-G\frac{mM}{r}, \quad \text{tj.}$$

$$L(r,\dot{r}\dot{\varphi})=T-V=\frac{1}{2}m(\dot{r}^2+r^2\dot{\varphi}^2)+G\frac{mM}{r}. \tag{1.25}$$

Kdybychom řešili úlohu z Lagrangeových rovnic, měli bychom

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{r}} - \frac{\partial L}{\partial r} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \ddot{r} - r\dot{\varphi}^2 + G\frac{M}{r^2} = 0\,,$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} - \frac{\partial L}{\partial \varphi} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad r^2\ddot{\varphi} + 2r\dot{r}\dot{\varphi} = 0\,.$$

Povšimněme si, že pohybové rovnice nezávisí na hmotnosti sledované planety m. To je pro gravitaci typické, tělesa se v daném gravitačním poli pohybují po stejných trajektoriích. Proto je možné gravitaci popisovat za pomoci zakřiveného prostoru a času. Určeme nyní zobecněné hybnosti a zobecněnou energii systému:

$$p_r \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m\dot{r}\,; \qquad p_\varphi \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = mr^2\dot{\varphi}\,,$$

$$E = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}}\dot{r} + \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}}\dot{\varphi} - L \;=\; \frac{1}{2}m\dot{r}^2 + \frac{1}{2}mr^2\dot{\varphi}^2 - G\frac{mM}{r} \;=\; T_r + T_\varphi + V\,.$$

Zachovává se moment hybnosti p_φ (φ je cyklická souřadnice) a zobecněná energie E. Energie se rozpadá na tři členy – radiální kinetickou energii, úhlovou energii (souvisící s oběhem planety) a potenciální energii. Zobecněné rychlosti vyjádříme ze zobecněných hybností

$$\dot{r} = \frac{p_r}{m}\,; \qquad \dot{\varphi} = \frac{p_\varphi}{mr^2}$$

a dosadíme do zobecněné energie (provedeme Legendreovu duální transformaci). Tím získáme Hamiltonovu funkci

$$H(r, \varphi, p_r, p_\varphi) = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\varphi^2}{2mr^2} - G\frac{mM}{r}\,.$$

Hamiltonovy kanonické rovnice jsou

$$\dot{r} = \frac{\partial H}{\partial p_r} = \frac{p_r}{m}\,, \qquad \dot{p}_r = -\frac{\partial H}{\partial r} = +\frac{p_\varphi^2}{mr^3} - G\frac{mM}{r^2}\,,$$

$$\dot{\varphi} = \frac{\partial H}{\partial p_\varphi} = \frac{p_\varphi}{mr^2}\,, \qquad \dot{p}_\varphi = -\frac{\partial H}{\partial \varphi} = 0\,.$$

Tyto rovnice je třeba doplnit počátečními podmínkami $r(t_0)$, $\varphi(t_0)$, $p_r(t_0)$, $p_\varphi(t_0)$. Jde o soustavu čtyř diferenciálních rovnic pro funkce $r(t)$, $\varphi(t)$, $p_r(t)$, $p_\varphi(t)$.

Definice fázového prostoru

Fázovým prostorem nazýváme $2f$ rozměrný prostor, do kterého zobrazujeme hodnoty zobecněných souřadnic a zobecněných hybností. Bod fázového prostoru nám reprezentuje stav systému. Časový vývoj $\mathbf{q}(t)$, $\mathbf{p}(t)$ stavu systému se ve fázovém prostoru zobrazí jako *fázová trajektorie*. Konfigurační prostor je podprostorem fázového prostoru. V následující kapitole si ukážeme fázovou trajektorii harmonického oscilátoru.

1.3.2 Harmonický oscilátor

Harmonický oscilátor je jedním z nejdůležitějších fyzikálních systémů. Lze jím v prvním přiblížení nahradit chování částice v potenciálním poli s minimem, setkáme se s ním v kvantové teorii i v kvantové teorii pole. Jakékoli pole (například elektromagnetické) si lze vždy představit jako soustavu harmonických oscilátorů. Proto se budeme harmonickým oscilátorem zabývat podrobněji.

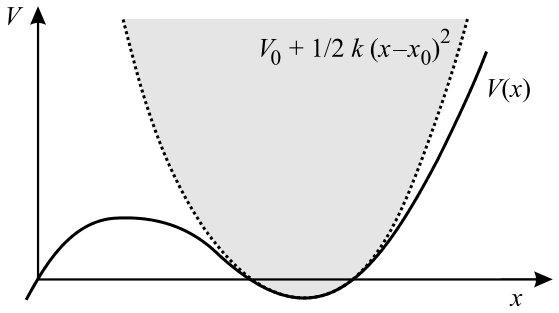
Představme si částici v poli potenciální energie s minimem v bodě x_0 a hodnotou minima $V_0 = V(x_0)$. Proveďme Taylorův rozvoj $V(x)$ v okolí minima do druhého řádu:

$$V(x) = V(x_0) + V'(x_0)\cdot(x-x_0) + \frac{1}{2}V''(x_0)\cdot(x-x_0)^2 + \cdots \quad .$$

V minimu je $V'(x_0) = 0$, a proto

$$V(x) \approx V(x_0) + \frac{1}{2}V''(x_0)(x-x_0)^2 \approx V_0 + \frac{1}{2}k(x-x_0)^2 \,, \qquad k \equiv V''(x_0)\,. \tag{1.26}$$

Potenciální energii jsme tedy nahradili parabolickou závislostí – viz obrázek 13.



Obr. 13: Harmonický oscilátor.

Harmonickým oscilátorem nazýváme systém s parabolickou závislostí potenciální energie (1.26). Dosti přesně tuto závislost splňuje například těleso zavěšené na pružině v gravitačním poli. Veličina $k \equiv V''(x_0)$ se nazývá *tuhost oscilátoru*.

Volme pro jednoduchost souřadnicový systém tak, aby minimum potenciální energie bylo v počátku ($x_0 = 0$), a zvolme $V(x_0) = 0$ (potenciální energii můžeme změnit o aditivní konstantu, síla $F = -\,\mathrm{d}V/\mathrm{d}x$ se nezmění), průběh potenciální energie je při této volbě $V(x) = 1/2\ kx^2$. Řešme nejprve harmonický oscilátor za pomoci Lagrangeových rovnic:

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}kx^2 \qquad \Rightarrow \qquad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \ddot{x} + \frac{k}{m}x = 0\,. \tag{1.27}$$

Obecné řešení této rovnice je

$$x(t) = c_1\cos\omega t + c_2\sin\omega t\,, \qquad \omega \equiv \sqrt{\frac{k}{m}}\,. \tag{1.28}$$

Pro následující počáteční podmínky plyne řešení:

$$x(0) = A\,; \qquad \dot{x}(0) = 0 \qquad \Rightarrow \qquad x(t) = A\cos\omega t\,. \tag{1.29}$$

V okolí minima potenciální energie koná částice kmitavý pohyb úhlovou frekvencí $\omega = (k/m)^{1/2}$. Jako parametr oscilátoru se častěji používá úhlová frekvence ω než jeho tuhost k. Lagrangeova funkce potom je

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\,. \tag{1.30}$$

Řešme nyní úlohu za pomoci Hamiltonových rovnic, nejprve nalezneme zobecněnou hybnost a energii:

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} \qquad \Rightarrow \qquad \dot{x} = \frac{p}{m}\,,$$
$$E = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\dot{x} - L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\,.$$

Po vyloučení rychlosti z energie E dostáváme Hamiltonovu funkci

► $$H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{1.31}$$

a Hamiltonovy rovnice

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}\,, \qquad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -m\omega^2 x\,.$$

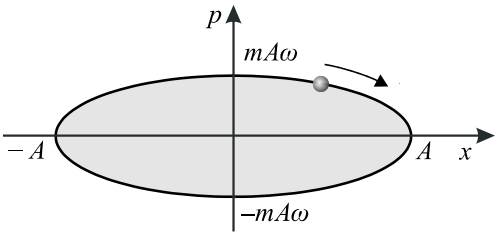
Řešení této soustavy se stejnými počátečními podmínkami vede ke vztahům

$$x(t) = A\cos\omega t\,,$$
$$p(t) = -mA\omega\sin\omega t\,. \tag{1.32}$$

Povšimněte si, že $p = m\dot{x}$. Vyloučíme-li z (1.32) čas (na pravých stranách ponecháme jen trigonometrické funkce, rovnice umocníme na druhou a sečteme), získáme rovnici trajektorie ve fázových proměnných x, p:

► $$\left(\frac{x}{A}\right)^2 + \left(\frac{p}{mA\omega}\right)^2 = 1\,. \tag{1.33}$$

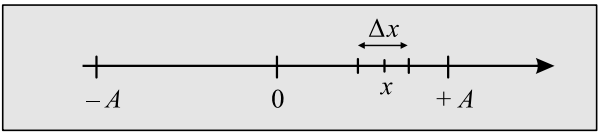
Fázovou trajektorií harmonického oscilátoru je elipsa. Pohyb si můžeme představit jako souřadnice bodu obíhajícího po elipse (jeho projekci do obou os).



Obr. 14: Fázový portrét harmonického oscilátoru.

Na závěr určeme klasickou hustotu pravděpodobnosti výskytu částice mezi krajními polohami $-A$, A. Pro pravděpodobnost, že se částice nachází v okolí Δx bodu x platí:

$$\Delta P \cong \frac{2\Delta t}{T} = \frac{2\Delta x/v(x)}{2\pi/\omega} = \frac{\omega}{\pi v(x)}\Delta x\,.$$



Obr. 15: K odvození pravděpodobnosti výskytu oscilátoru.

Periodu jsme označili T, doba, po kterou částice pobývá v okolí bodu x je $2\Delta t$. Tímto okolím prolétá částice za periodu T dvakrát (tam a zpět), proto je v čitateli $2\Delta t$. Hustota pravděpodobnosti je

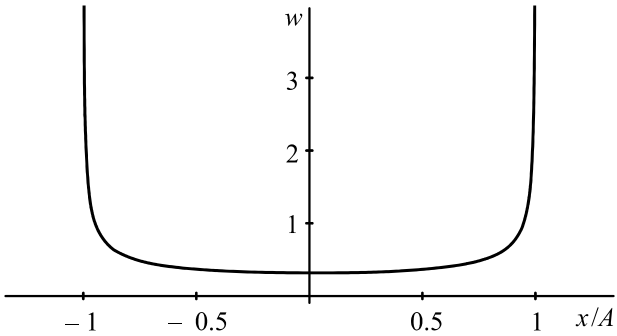
$$w(x) = \frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}x} = \frac{\omega}{\pi v(x)}\,. \tag{1.34}$$

Závislost $v(x)$ určíme ze zákona zachování energie

$$\frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \;=\; \frac{1}{2}m\omega^2 A^2 \qquad \Rightarrow \qquad v(x) = \omega\sqrt{A^2 - x^2}\,. \tag{1.35}$$

Konečný vztah má tvar

► $$w(x) = \frac{1}{\pi\sqrt{A^2 - x^2}}\,. \tag{1.36}$$



Obr. 16: Pravděpodobnost výskytu harmonického oscilátoru.

Hustota pravděpodobnosti výskytu částice je nejvyšší v bodech obratu $-A$, A a nejnižší v místě minima potenciální energie. V kvantové teorii poznáme modifikaci tohoto průběhu pro částice mikrosvěta (viz kapitola 2.3). Poznamenejme ještě, že celková pravděpodobnost výskytu částice v oblasti $(-A, A)$ je rovna jedné, bez ohledu na to, že hustota pravděpodobnosti v krajních bodech diverguje:

$$\int_{-A}^{+A} w(x)\,\mathrm{d}x \;=\; \int_{-A}^{+A} \frac{1}{\pi\sqrt{A^2 - x^2}}\,\mathrm{d}x \;=\; \frac{1}{\pi}\left[\arcsin\left(\frac{x}{A}\right)\right]_{-A}^{+A} \;=\; 1\,. \tag{1.37}$$

1.3.3 Poissonova formulace Hamiltonových rovnic

Před čtením této kapitoly by měl být čtenář seznámen s definicí a vlastnostmi Lieovy algebry (viz dodatek B). Uvažujme obecnou dynamickou proměnnou $A(\mathbf{q}, \mathbf{p})$, která je funkcí zobecněných souřadnic a zobecněných hybností (souřadnice, hybnost, potenciální energie, součin potenciální a kinetické energie…). Její časový vývoj je dán vztahem

$$\dot{A} = \frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial A}{\partial q_k}\dot{q}_k + \frac{\partial A}{\partial p_k}\dot{p}_k = \frac{\partial A}{\partial q_k}\cdot\frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial A}{\partial p_k}\cdot\frac{\partial H}{\partial q_k}, \tag{1.38}$$

kde jsme časové derivace fázových proměnných **q**, **p** vyjádřili z Hamiltonových rovnic.

Definice Poisssonových závorek

Nechť $f(\mathbf{q}, \mathbf{p})$, $g(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ jsou dvě funkce fázových proměnných **q**, **p** . Funkci

► $$\{f, g\} \equiv \frac{\partial f}{\partial q_k}\cdot\frac{\partial g}{\partial p_k} - \frac{\partial f}{\partial p_k}\cdot\frac{\partial g}{\partial q_k} \tag{1.39}$$

nazýváme Poissonovou závorkou funkcí *f*, *g*. Časový vývoj (1.38) obecné dynamické proměnné je vzhledem k definici (1.39) dán jako Poissonova závorka příslušné dynamické proměnné a Hamiltonovy funkce:

► $$\dot{A} = \{A, H\}. \tag{1.40}$$

Poznámka: Pro $A = A(t, \mathbf{q}, \mathbf{p})$ bude $\mathrm{d}A/\mathrm{d}t = \partial A/\partial t + \{A, H\}$. V mnoha případech vystačíme se systémy, u kterých dynamické proměnné nezávisí explicitně na čase.

Vlastnosti Poissonových závorek:

$$\begin{aligned}
&1)\ \{f, g\} = -\{g, f\}, \\
&2)\ \{f + g, h\} = \{f, h\} + \{g, h\}; \quad \{\alpha f, h\} = \alpha\{f, h\}; \quad \alpha \in R, \\
&3)\ \{f, \{g, h\}\} + \{g, \{h, f\}\} + \{h, \{f, g\}\} = 0, \\
&4)\ \{f g, h\} = f\{g, h\} + \{f, h\} g, \\
&5)\ \{f, g h\} = g\{f, h\} + \{f, g\} h.
\end{aligned} \tag{1.41}$$

Důkaz těchto vztahů je triviální a plyne přímo z definice Poissonovy závorky (1.39). *Poissonovy závorky tvoří Lieovu algebru na prostoru funkcí* (viz dodatek B). Velmi důležité je znát Poissonovy závorky mezi zobecněnými souřadnicemi a hybnostmi:

$$\{q_i, q_j\} = \frac{\partial q_i}{\partial q_k}\cdot\frac{\partial q_j}{\partial p_k} - \frac{\partial q_i}{\partial p_k}\cdot\frac{\partial q_j}{\partial q_k} = \delta_{ik}\cdot 0 - 0\cdot\delta_{jk} = 0,$$

$$\{p_i, p_j\} = \frac{\partial p_i}{\partial q_k}\cdot\frac{\partial p_j}{\partial p_k} - \frac{\partial p_i}{\partial p_k}\cdot\frac{\partial p_j}{\partial q_k} = 0\cdot\delta_{jk} - \delta_{ik}\cdot 0 = 0,$$

$$\{q_i, p_j\} = \frac{\partial q_i}{\partial q_k}\cdot\frac{\partial p_j}{\partial p_k} - \frac{\partial q_i}{\partial p_k}\cdot\frac{\partial p_j}{\partial q_k} = \delta_{ik}\cdot\delta_{jk} = \delta_{ij}.$$

Poissonova závorka je nenulová jedině pro zobecněnou souřadnici a jí odpovídající hybnost, potom je rovna jedné.

$$\{q_i, q_j\} = \{p_i, p_j\} = 0\,; \qquad \{q_i, p_j\} = \delta_{ij}\,. \tag{1.42}$$

Těmito relacemi je určena celá Lieova algebra Poissonových závorek. Známe-li jejich vlastnosti (1.41) a relace (1.42), můžeme řešit problémy mechaniky, aniž bychom potřebovali definici (1.39).

Příklad 14: harmonický oscilátor

$$T = \frac{p^2}{2m}, \qquad V = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2\,; \qquad H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2\,;$$

$$\dot{x} = \{x, H\} = \frac{\partial x}{\partial x}\cdot\frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial x}{\partial p}\cdot\frac{\partial H}{\partial x} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m},$$

$$\dot{p} = \{p, H\} = \frac{\partial p}{\partial x}\cdot\frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial p}{\partial p}\cdot\frac{\partial H}{\partial x} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -m\omega^2 x\,.$$

Snadno určíme i časový vývoj libovolné dynamické proměnné, například potenciální energie:

$$\dot{V} = \{V, H\} = \frac{\partial V}{\partial x}\cdot\frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial V}{\partial p}\cdot\frac{\partial H}{\partial x} = \omega^2 xp\,.$$

Časový vývoj můžeme ale určit i z vlastností Lieovy algebry Poissonových závorek (1.41) a (1.42) bez znalosti jejich definice. Ukažme to na příkladu zobecněné hybnosti:

$$\dot{x} = \{x, H\} = \frac{\partial x}{\partial x}\cdot\frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial x}{\partial p}\cdot\frac{\partial H}{\partial x} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \quad ,$$

$$\dot{p} = \{p, H\} = \left\{ p, \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right\} \overset{(1.41.2)}{=} \frac{1}{2m}\{p, p^2\} + \frac{1}{2} m\omega^2 \{p, x^2\} =$$

$$\overset{(1.41.4)}{=} \frac{1}{2m}\left(p\{p, p\} + \{p, p\}\, p \right) + \frac{1}{2} m\omega^2 \left(x\{p, x\} + \{p, x\}\, x \right) =$$

$$= \frac{p}{m}\{p, p\} + m\omega^2 x\{p, x\} \overset{(1.41.1)}{=} \frac{p}{m}\{p, p\} - m\omega^2 x\{x, p\} \overset{(1.42)}{=} -m\omega^2 x \quad .$$

Analogicky bychom postupovali u dalších dynamických proměnných. V kvantové teorii zůstane tato struktura zachována, jen objekty, se kterými budeme pracovat, budou jiné.

1.3.4 Numerické řešení Hamiltonových rovnic

Jen ve výjimečných případech lze nalézt explicitní řešení. Zpravidla jsme odkázáni na numerické řešení problému. V dosavadním textu jsme se naučili problém zformulovat za pomoci soustavy diferenciálních rovnic doplněných vhodnými počátečními podmínkami. Většina matematických programů (např. „Mathematica“, „Reduce“, „Maple“,…)

dokáže takto zformulovanou úlohu numericky a někdy i analyticky vyřešit. Uveďme zde pro hloubavější studenty, kteří by si chtěli sami vývoj systému nasimulovat na počítači, alespoň jednu numerickou metodu vhodnou pro numerické vyhledání řešení. Zvolili jsme Rungeovu-Kuttovu metodu 4. řádu, která je snadno implementovatelná a přitom dostatečně přesná.

Označme $\boldsymbol{\xi} = (\mathbf{q}, \mathbf{p})$ množinu zobecněných souřadnic a hybností. Nechť množina hledaných funkcí $\xi_k\ (t)$; $k = 1$, ... $2f$ splňuje soustavu rovnic

$$\dot{\xi}_k = f_k(t, \xi)\,.$$

Časovou osu rozdělíme na dílky s intervalem Δt. Předpokládejme, že známe řešení v nějakém čase t (například v t_0 – počáteční podmínka). Potom určíme

$$\begin{aligned}
K_{1,k} &= f_k(t, \xi_1, \cdots, \xi_{2f})\,,\\
K_{2,k} &= f_k\left(t + \frac{1}{2}\Delta t, \xi_1(t) + \frac{1}{2}K_{1,1}\,\Delta t, \cdots, \xi_{2f}(t) + \frac{1}{2}K_{1,2f}\,\Delta t\right),\\
K_{3,k} &= f_k\left(t + \frac{1}{2}\Delta t, \xi_1(t) + \frac{1}{2}K_{2,1}\,\Delta t, \cdots, \xi_{2f}(t) + \frac{1}{2}K_{2,2f}\,\Delta t\right),\\
K_{4,k} &= f_k\left(t + \Delta t, \xi_1(t) + K_{3,1}\,\Delta t, \cdots, \xi_{2f}(t) + K_{3,2f}\,\Delta t\right)
\end{aligned}$$

a přibližné řešení v čase $t + \Delta t$ dostaneme ze vztahů

$$\xi_k(t + \Delta t) \cong \xi_k(t) + \frac{1}{6}(K_{1,k} + 2K_{2,k} + 2K_{3,k} + K_{4,k}) \cdot \Delta t \quad ; \quad k = 1, \ldots, 2f\,.$$

Tím známe řešení v čase $t + \Delta t$ a postup můžeme opakovat. Otázky přesnosti výpočtu, konvergence a řadu jiných metod lze nalézt v literatuře specializované na tuto problematiku. Některé další metody řešení obyčejných diferenciálních rovnic jsou také uvedeny ve volně navazující učebnici [1].



1.4 Vybrané úlohy z teoretické mechaniky

1.4.1 Pohyb nabité částice v elektromagnetickém poli

Pohyb částic v elektromagnetickém poli je podrobně probrán v učebnici [1], která volně navazuje na tento učební text. Nyní jen pro úplnost uvedeme základní vztahy v nerelativistickém případě v předem daném elektromagnetickém poli. Elektrická a magnetická pole můžeme popsat buď elektrickou intenzitou **E** a magnetickou indukcí **B,** nebo za pomoci čtyřpotenciálu (ϕ, **A**). Převodní vztahy jsou

► $$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{x}}, \tag{1.43}$$

► $$\mathbf{B} = \operatorname{rot} \mathbf{A}. \tag{1.44}$$

Předpokládáme, že $\phi(t, \mathbf{x})$ a $\mathbf{A}(t, \mathbf{x})$ jsou předem dané funkce. Problém pohybu nabité částice v konzervativním elektrostatickém poli je dán Lagrangeovou funkcí ve tvaru $L = T - V$, tj.

$$L = \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 - Q\phi. \tag{1.45}$$

Pokud je přítomno magnetické pole, systém již není konzervativní (neexistuje potenciální energie) a Lagrangeova funkce má tvar

► $$L = \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 - Q\phi + Q\,\mathbf{A} \cdot \mathbf{v}. \tag{1.46}$$

První člen je kinetická energie volné částice, zbylé dva členy reprezentují interakci částice s elektrickým a magnetickým polem. Odvození naleznete buď v kapitole 1.6.3 vztah (1.257), nebo v učebnici [1]. Druhý a třetí člen jsou ve skutečnosti skalárním součinem čtyřpotenciálu pole a čtyřvektoru toku náboje způsobeného pohybem částice. Tím je zaručeno, že jde o skalární veličinu. Zde budeme předpokládat, že jsme správnou Lagrangeovu funkci „uhodli“. Pak ale musíme dokázat, že z ní plynoucí pohybové rovnice jsou ve shodě s přírodou. Ukážeme, že příslušné Lagrangeovy rovnice jsou totožné s dobře známou Lorentzovou pohybovou rovnicí. Ve složkách máme

$$L = \frac{1}{2} m v_j v_j - Q\phi(t, \mathbf{x}) + Q A_j(t, \mathbf{x}) v_j;$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \frac{\partial L}{\partial v_i} - \frac{\partial L}{\partial x_i} = 0,$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(m v_i + Q A_i) + Q \frac{\partial \phi}{\partial x_i} - Q \frac{\partial A_j}{\partial x_i} v_j = 0,$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(mv_i) + Q\frac{\partial A_i}{\partial t} + Q\frac{\partial A_i}{\partial x_j}\frac{dx_j}{dt} + Q\frac{\partial \phi}{\partial x_i} - Q\frac{\partial A_j}{\partial x_i}v_j = 0,$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(mv_i) = Q\left[-\frac{\partial A_i}{\partial t} - \frac{\partial \phi}{\partial x_i} + v_j\left(\frac{\partial A_j}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_j}\right)\right],$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(m\,\mathbf{v}) = Q\left[-\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{x}} + \mathbf{v}\times\mathrm{rot}\,\mathbf{A}\right],$$

► $$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(m\,\mathbf{v}) = Q\left[\,\mathbf{E} + \mathbf{v}\times\mathbf{B}\right], \tag{1.47}$$

což je známá Lorentzova pohybová rovnice. Úpravu členu $\mathbf{v}\times\mathrm{rot}\,\mathbf{A}$ lze udělat standardně za pomoci Levi-Civitova tenzoru (viz dodatek A2 v [1]). Nyní standardním postupem odvodíme hybnost, energii a Hamiltonovu funkci částice:

► $$\mathbf{p} \equiv \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} = m\,\mathbf{v} + Q\,\mathbf{A} \tag{1.48}$$

► $$\mathscr{E} = \frac{\partial L}{\partial\,\mathbf{v}}\cdot\mathbf{v} - L = \frac{1}{2}\,m\,\mathbf{v}^2 + Q\,\phi \tag{1.49}$$

► $$H = \frac{(\mathbf{p} - Q\,\mathbf{A})^2}{2m} + Q\,\phi \tag{1.50}$$

Poznámka 1: Energii v této kapitole značíme $\mathscr{E}$, abychom ji odlišili od intenzity elektrického pole **E**.

Poznámka 2: Povšimněte si, že $\mathscr{E} \neq T + V$. Energie nezávisí na vektorovém potenciálu **A**. To je důsledkem toho, že magnetické pole nemění energii, ale pouze směr rychlosti. Hybnost již také není rovna svému mechanickému protějšku, $\mathbf{p} \neq m\mathbf{v}$.

◖ Příklad 15: konstantní homogenní elektrické pole

Předpokládejme, že na částici působí konstantní homogenní elektrické pole **E**. Pohybovou rovnici částice můžeme zapsat ve tvaru

$$m\ddot{\mathbf{r}} = Q\mathbf{E}\,. \tag{1.51}$$

Přímou integrací postupně dostaneme

$$\mathbf{v}(t) = \frac{Q}{m}t\,\mathbf{E} + \mathbf{v}_0\,; \tag{1.52}$$

$$\mathbf{r}(t) = \frac{Q}{2m}t^2\,\mathbf{E} + \mathbf{v}_0 t + \mathbf{r}_0\,. \tag{1.53}$$

Na první pohled je patrné, že se rychlost s rostoucím časem zvětšuje nade všechny meze. Pro vyšší rychlosti je nutné použít relativistickou Lagrangeovu funkci. Výpočet je v [1]. Urychlování probíhá jen ve směru pole, kolmo na pole se částice pohybuje volně.

Pokud pole míří v ose x, tj. $\mathbf{E} = (E, 0, 0)$ a částice je v počátku souřadnic s počáteční rychlostí $\mathbf{v}_0 = (0, v_0, 0)$, tj. kolmou na pole, má nalezené řešení tvar

$$x = \frac{QE}{2m} t^2 , \qquad y = v_0 t , \qquad z = 0 \ . \tag{1.54}$$

Vyloučíme-li z řešení čas, získáme rovnici paraboly:

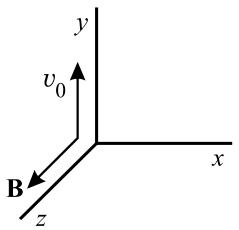
$$x = \frac{QE}{2m v_0^2} y^2 . \tag{1.55}$$

Nabitá částice se v přítomnosti homogenního elektrického pole pohybuje po parabole. Ve směru pole je pohyb rovnoměrně zrychlený. Pokud bychom provedli relativistický výpočet (viz [1]), bude skutečnou křivkou hyperbolický kosinus.

◗

◖ Příklad 16: konstantní homogenní magnetické pole

Uvažujme nyní druhou nejjednodušší situaci – pohyb nabité částice v homogenním magnetickém poli. Pro určitost budeme předpokládat, že magnetické pole míří v ose z, tj. $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ a částice je na začátku v počátku souřadnicové soustavy a má počáteční rychlost ve směru osy y, tj. $\mathbf{x}(t_0) = (0, 0, 0)$, $\mathbf{v}(t_0) = (0, v_0, 0)$.



Obr. 17: Orientace jednotlivých vektorů.

Pohybovou rovnici $m\mathrm{d}\mathbf{v}/\mathrm{d}t = Q\,\mathbf{v}\times\mathbf{B}$ rozepíšeme do složek:

$$\begin{aligned} m\ddot{x} &= QB\,\dot{y} , \\ m\ddot{y} &= -QB\,\dot{x} , \\ m\ddot{z} &= 0 . \end{aligned} \tag{1.56}$$

Řešení třetí rovnice je jednoduché, v případě našich počátečních podmínek nulové, tj. pohyb se bude dít jen v rovině (x, y). Soustavu prvních dvou rovnic budeme řešit v komplexním oboru. První rovnici budeme chápat jako reálnou část, druhou jako imaginární:

$$m\ddot{x} + \mathrm{i}\,m\ddot{y} = QB\,\dot{y} - \mathrm{i}\,QB\,\dot{x} .$$

Tato operace je vratná, kdykoli můžeme oddělit reálnou a imaginární část a dostat zpět původní rovnice. Po jednoduché úpravě a označení kombinace QB/m jako ω_c (později zjistíme význam této veličiny) dostaneme

$$\ddot{x} + \mathrm{i}\,\ddot{y} = -\mathrm{i}\,\omega_\mathrm{c}\,(\dot{x} + \mathrm{i}\,\dot{y})\,; \qquad \omega_\mathrm{c} \equiv \frac{QB}{m}\,. \tag{1.57}$$

Nyní zavedeme komplexní polohu $\xi \equiv x + \mathrm{i}\,y$, pro kterou má rovnice jednoduchý tvar

$$\ddot{\xi} + \mathrm{i}\,\omega_\mathrm{c}\,\dot{\xi} = 0\,; \qquad \xi \equiv x + \mathrm{i}\,y\,. \tag{1.58}$$

Samozřejmě bude kdykoli možné se vrátit k původním proměnným x a y. Řešení této lineární rovnice bez pravé strany budeme hledat v exponenciálním tvaru $\exp(\lambda t)$. Po dosazení získáme charakteristickou rovnici

$$\lambda^2 + \mathrm{i}\,\omega_\mathrm{c}\lambda = 0\,; \qquad \Rightarrow \qquad \lambda_1 = 0\,; \quad \lambda_2 = -\mathrm{i}\,\omega_\mathrm{c}\,. \tag{1.59}$$

Obecné řešení je lineární kombinací obou nalezených modů:

$$\begin{aligned} \xi(t) &= c_1 + c_2\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\omega_\mathrm{c} t}\,; \\ \dot{\xi}(t) &= -\mathrm{i}\,c_2\omega_\mathrm{c}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\omega_\mathrm{c} t}\,. \end{aligned} \tag{1.60}$$

Integrační konstanty nalezneme snadno z počátečních podmínek

$$\begin{aligned} \xi(0) &= x(0) + \mathrm{i}\,y(0) = 0\,; \\ \dot{\xi}(0) &= \dot{x}(0) + \mathrm{i}\,\dot{y}(0) = \mathrm{i}\,v_0\,. \end{aligned} \tag{1.61}$$

Dosadíme-li tyto počáteční podmínky do rovnic (1.60), dostaneme

$$\begin{aligned} c_1 + c_2 &= 0\,; \\ -\mathrm{i}\,c_2\omega_\mathrm{c} &= \mathrm{i}\,v_0\,, \end{aligned} \qquad \Rightarrow \qquad \begin{aligned} c_1 &= +v_0/\omega_\mathrm{c}\,; \\ c_2 &= -v_0/\omega_\mathrm{c}\,. \end{aligned} \tag{1.62}$$

Výsledné řešení má proto tvar

► $$\xi(t) = R_\mathrm{L} - R_\mathrm{L}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\omega_\mathrm{c} t}\,; \qquad R_\mathrm{L} \equiv v_0/\omega_\mathrm{c} = mv_0/QB\,. \tag{1.63}$$

Po oddělení reálné a imaginární části získáme obě souřadnice pohybující se částice

► $$\begin{aligned} x(t) &= R_\mathrm{L} - R_\mathrm{L}\cos\omega_\mathrm{c} t\,, \\ y(t) &= R_\mathrm{L}\sin\omega_\mathrm{c} t\,. \end{aligned} \tag{1.64}$$

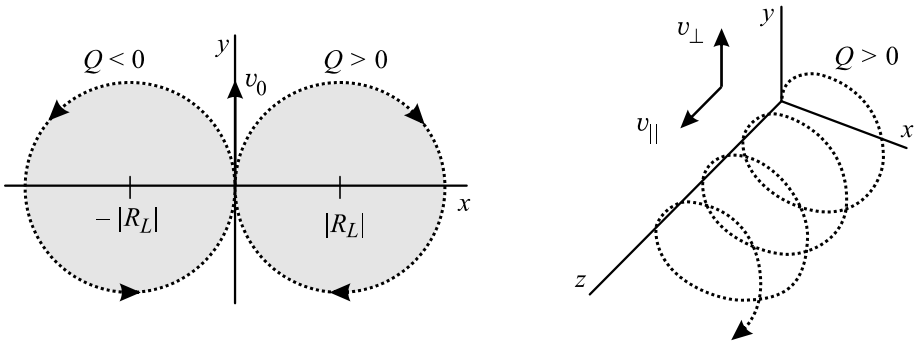
Rovnici trajektorie nalezneme po vyloučení času z (1.64):

► $$(x - R_\mathrm{L})^2 + y^2 \;=\; R_\mathrm{L}^2\,. \tag{1.65}$$

Vidíme, že pohyb se děje po kružnici s poloměrem $|R_\mathrm{L}|$, se středem $S = [R_\mathrm{L}, 0]$ a s úhlovou frekvencí oběhu ω_c. Veličinu R_L nazýváme Larmorův (gyrační) poloměr a veličinu ω_c cyklotronní (gyrační) frekvence. Podle náboje částice může mít Larmorův poloměr kladnou i zápornou hodnotu, stejně tak může mít obě znaménka cyklotronní frekvence (záporná hodnota znamená oběh proti směru chodu hodinových ručiček).

Magnetické pole nepůsobí na pohyb částice ve směru podél pole. Kolmo na směr pole působí Lorentzova síla, která zakřivuje trajektorii částice na kružnici. Při nenulové počáteční rychlosti $v_z(0)$ je pohyb částice složen z rovnoměrného přímočarého pohybu podél pole a Larmorovy rotace (gyrace), tím vzniká pohyb po šroubovici.

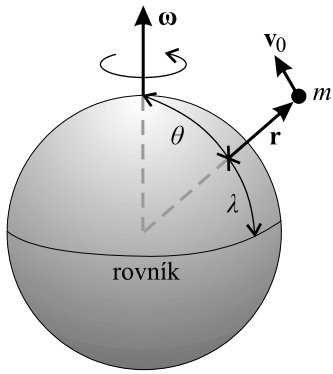
Samotné elektrické pole naopak nepůsobí na pohyb částice napříč pole (v nerelativistickém případě) nebo jen velmi málo (v relativistickém případě). Ve směru pole dochází k urychlování.



Obr. 18. Pohyb nabité částice v homogenním magnetickém poli.

Složitější případy pohybů nabitých částic v elektrických a magnetických polích jsou řešeny (z Hamiltonových rovnic) v navazující učebnici [1].

1.4.2 Pohyb v rotující soustavě



Obr. 19: Rotující soustava

K nalezení pohybové rovnice v neinerciální rotující soustavě potřebujeme znát některé vektorové identity:

$$(\mathbf{a}\times\mathbf{b})\cdot\mathbf{c} = (\mathbf{b}\times\mathbf{c})\cdot\mathbf{a} = (\mathbf{c}\times\mathbf{a})\cdot\mathbf{b}\,, \tag{1.66}$$

$$\mathbf{a}\times(\mathbf{b}\times\mathbf{c}) = \mathbf{b}(\mathbf{a}\cdot\mathbf{c}) - \mathbf{c}(\mathbf{a}\cdot\mathbf{b})\,, \tag{1.67}$$

$$(\mathbf{a}\times\mathbf{b})\cdot(\mathbf{c}\times\mathbf{d}) = (\mathbf{a}\cdot\mathbf{c})(\mathbf{b}\cdot\mathbf{d}) - (\mathbf{a}\cdot\mathbf{d})(\mathbf{b}\cdot\mathbf{c})\,. \tag{1.68}$$

Jejich odvození je snadné za pomoci definice vektorového součinu přes Levi-Civitův tenzor (viz dodatek A2 v [1]). První identita ukazuje, že v součinu $(\mathbf{a}\times\mathbf{b})\cdot\mathbf{c}$ lze jednot-

livé součinitele cyklicky zaměňovat. Druhá identita je známé „*bác cáb*“ pravidlo. Důkaz třetí identity lze provést (stejně jako u prvních dvou) pouhým rozepsáním levé strany z definice vektorového součinu přes Levi-Civitův tenzor (viz dodatek A2 v [1]).

Pro určitost předpokládejme, že budeme sledovat pohyby na rotující Zemi. Jedna souřadnicová soustava je pevná v prostoru (inerciální) a druhá rotuje spolu se Zemí (rotující, neinerciální). Obě soustavy mají počátek ve středu Země a polohový vektor sledovaného tělesa je v obou soustavách shodný, tj.

$$\mathbf{r}_{\text{in}} = \mathbf{r}_{\text{rot}} = \mathbf{r} \,. \tag{1.69}$$

Rychlosti tělesa o hmotnosti m (viz obrázek 19) budou v obou soustavách různé, budou se lišit o rychlost v_0 způsobenou rotací Země. Ta je úměrná velikosti úhlové rychlosti, vzdálenosti od středu Země a sinu polárního úhlu θ (na pólu je rychlost nulová, na rovníku maximální), tj.

$$v_0 = \omega r \sin\theta \,. \tag{1.70}$$

Směr této rychlosti je kolmý na vektory $\boldsymbol{\omega}$ i $\mathbf{r}$, tedy platí

$$\mathbf{v}_0 = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r} \,. \tag{1.71}$$

Mezi rychlostí tělesa v inerciální a rotující soustavě proto existuje jednoduchý vztah

$$\mathbf{v}_{\text{in}} = \mathbf{v}_{\text{rot}} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r} \,, \tag{1.72}$$

To je vše, co potřebujeme vědět k sestavení Lagrangeovy funkce. V inerciální soustavě bude Lagrangeova funkce rovna

$$L = \frac{1}{2} m \mathbf{v}_{\text{in}}^2 - V(\mathbf{r}_{\text{in}}) \,. \tag{1.73}$$

Do vztahu dosadíme za rychlost z (1.72) a za polohový vektor z (1.69)

$$L = \frac{1}{2} m \left(\mathbf{v}_{\text{rot}} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r} \right)^2 - V(\mathbf{r}) \,. \tag{1.74}$$

Rychlost v rotující soustavě, která nás zajímá, přeznačíme na $\mathbf{v}$. Výsledná Lagrangeova funkce pro pohyb v neinerciální rotující soustavě je

$$L = \frac{1}{2} m (\mathbf{v} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r})^2 - V(\mathbf{r}) \,. \tag{1.75}$$

K nalezení hybnosti, energie a k sestavení pohybové rovnice budeme potřebovat parciální derivace $\partial L / \partial \mathbf{r}$, $\partial L / \partial \mathbf{v}$. Za tím účelem najdeme diferenciál Lagrangeovy funkce (úhlovou rychlost předpokládáme konstantní). U prvního členu budeme diferencovat nejprve vnitřní funkci a poté derivovat kvadratickou funkci:

$$\mathrm{d}L = \frac{1}{2} m (\mathrm{d}\mathbf{v} + \boldsymbol{\omega} \times \mathrm{d}\mathbf{r}) \cdot 2 (\mathbf{v} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}) - \frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathrm{d}\mathbf{r} \qquad \Rightarrow$$

$$\mathrm{d}L = \; m\mathbf{v} \cdot \mathrm{d}\mathbf{v} + m(\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}) \cdot \mathrm{d}\mathbf{v} + m(\boldsymbol{\omega} \times \mathrm{d}\mathbf{r}) \cdot \mathbf{v} + m(\boldsymbol{\omega} \times \mathrm{d}\mathbf{r}) \cdot (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}) - \frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathrm{d}\mathbf{r} \,.$$

Za pomoci vektorových identit (1.67) a (1.68) přeskupíme třetí a čtvrtý člen tak, aby diferenciál $\mathrm{d}\mathbf{r}$ stál samostatně ve skalárním součinu:

$$\mathrm{d}L = m\mathbf{v}\cdot\mathrm{d}\mathbf{v} + m(\boldsymbol{\omega}\times\mathbf{r})\cdot\mathrm{d}\mathbf{v} + m(\mathbf{v}\times\boldsymbol{\omega})\cdot\mathrm{d}\mathbf{r} +$$

$$+ m\omega^2\mathbf{r}\cdot\mathrm{d}\mathbf{r} - m(\boldsymbol{\omega}\cdot\mathbf{r})(\boldsymbol{\omega}\cdot\mathrm{d}\mathbf{r}) - \frac{\partial V}{\partial\mathbf{r}}\cdot\mathrm{d}\mathbf{r}\ .$$

Čtvrtý a pátý člen na pravé straně upravíme za pomoci vektorové identity (1.67) do podoby dvojného vektorového součinu:

$$\mathrm{d}L = m\mathbf{v}\cdot\mathrm{d}\mathbf{v} + m(\boldsymbol{\omega}\times\mathbf{r})\cdot\mathrm{d}\mathbf{v} +$$

$$+ m(\mathbf{v}\times\boldsymbol{\omega})\cdot\mathrm{d}\mathbf{r} + m\,\boldsymbol{\omega}\times(\mathbf{r}\times\boldsymbol{\omega})\cdot\mathrm{d}\mathbf{r} - \frac{\partial V}{\partial\mathbf{r}}\cdot\mathrm{d}\mathbf{r}\ .$$

Vzhledem k tomu, že $\mathrm{d}L = (\partial L/\partial\,\mathbf{r})\cdot\mathrm{d}\,\mathbf{r} + (\partial L/\partial\,\mathbf{v})\cdot\mathrm{d}\,\mathbf{v}$, snadno nalezneme hledané derivace jako koeficienty u příslušných diferenciálů:

$$\frac{\partial L}{\partial\,\mathbf{r}} = m(\mathbf{v}\times\boldsymbol{\omega}) + m\,\boldsymbol{\omega}\times(\mathbf{r}\times\boldsymbol{\omega}) - \frac{\partial V}{\partial\,\mathbf{r}}\ , \tag{1.76}$$

$$\frac{\partial L}{\partial\,\mathbf{v}} = m\mathbf{v} + m(\boldsymbol{\omega}\times\mathbf{r})\ . \tag{1.77}$$

Nyní již můžeme vypočítat hybnost a energii v neinerciální soustavě

► $$\mathbf{p} \equiv \frac{\partial L}{\partial\,\mathbf{v}} = m\mathbf{v} + m(\boldsymbol{\omega}\times\mathbf{r})\ , \tag{1.78}$$

► $$E \equiv \frac{\partial L}{\partial\,\mathbf{v}}\cdot\mathbf{v} - L = \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 - \frac{1}{2}m(\boldsymbol{\omega}\times\mathbf{r})^2 + V(\mathbf{r})\ . \tag{1.79}$$

Hybnost se skládá z klasické mechanické hybnosti $m\,\mathbf{v}$ a neinerciálního rotačního členu $m\boldsymbol{\omega}\times\mathbf{r}$. Energie je součtem kinetické energie, rotační energie a potenciální energie. Rotační energie je z hlediska pozorovatele v inerciální soustavě záporná. Pro predikci pohybu těles je nejdůležitější znát pohybovou rovnici, kterou nyní již snadno odvodíme:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial\,\mathbf{v}} - \frac{\partial L}{\partial\,\mathbf{r}} = 0 \qquad \Rightarrow$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\big(m\mathbf{v} + m(\boldsymbol{\omega}\times\mathbf{r})\big) - \left(m(\mathbf{v}\times\boldsymbol{\omega}) + m\,\boldsymbol{\omega}\times(\mathbf{r}\times\boldsymbol{\omega}) - \frac{\partial V}{\partial\,\mathbf{r}}\right) = 0 \qquad \Rightarrow$$

► $$\frac{\mathrm{d}m\mathbf{v}}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial V}{\partial\,\mathbf{r}} + 2m(\mathbf{v}\times\boldsymbol{\omega}) + m\,\boldsymbol{\omega}\times(\mathbf{r}\times\boldsymbol{\omega})\ . \tag{1.80}$$

Rovnice (1.80) je hledaná pohybová rovnice tělesa pohybujícího se v rotující neinerciální soustavě. Nalevo je časová změna mechanické hybnosti, první člen napravo je síla působící na částici v potenciálním poli, druhý člen je Coriolisova síla a třetí odstředivá síla. Coriolisova síla je zodpovědná za směr roztáčení víru ve výlevce (na každé polokouli je jiný), za stáčení roviny kyvadla i za další jevy. Coriolisova síla nepůsobí na tělesa pohybující se rovnoběžně se zemskou rotační osou. Odstředivá síla je nulová na pólech a maximální na rovníku, kde dosáhne hodnoty $mr\omega^2$.

◖ Příklad 17: padající kámen

Představte si, že pustíte kámen z výšky 65 metrů (odpovídá Petřínské rozhledně). Jakou odchylku od kolmice bude mít kámen po dopadu na zem vlivem Coriolisovy síly? Jakým směrem se kámen odchýlí od kolmice při pádu? Počítejte pro Prahu (zeměpisná šířka $\lambda = 50°$).

Řešení: Budeme řešit pohybovou rovnici s tíhovou a Coriolisovou silou

$$\frac{\mathrm{d}m\mathbf{v}}{\mathrm{d}t} = m\mathbf{g} + 2m(\mathbf{v}\times\boldsymbol{\omega}).$$

Druhý člen na pravé straně je podstatně menší než první a můžeme ho chápat jako malou poruchu. Řešení je možné hledat iterační metodou, tj.

$$\frac{\mathrm{d}m\mathbf{v}^{(k+1)}}{\mathrm{d}t} = m\mathbf{g} + 2m(\mathbf{v}^{(k)}\times\boldsymbol{\omega}).$$

Zvolíme nějaké řešení $\mathbf{v}^{(0)}$, které dosadíme do pravé strany a vypočteme $\mathbf{v}^{(1)}$. Poté dosadíme $\mathbf{v}^{(1)}$ do pravé strany a vypočteme $\mathbf{v}^{(2)}$ atd. Pro počáteční nulové řešení máme posloupnost

$$\mathbf{v}^{(0)} = 0;$$
$$\mathbf{v}^{(1)} = \mathbf{g}t;$$
$$\mathbf{v}^{(2)} = \mathbf{g}t + (\mathbf{g}\times\boldsymbol{\omega})t^2.$$

První iterační řešení $\mathbf{v}^{(1)}$ je volný pád neovlivněný Coriolisovou silou. Druhé iterační řešení $\mathbf{v}^{(2)}$ již v sobě zahrnuje vliv Coriolisovy síly. Vzhledem k tomu, že považujeme Coriolisovu sílu za malou poruchu, můžeme iteraci po druhém členu ukončit. Při integraci jsme použili nulovou počáteční rychlost, tedy jednoduchý volný pád. V případě nenulové počáteční rychlosti $\mathbf{v}_0$ by bylo $\mathbf{v}^{(1)} = \mathbf{v}_0 + \mathbf{g}t$. Pro volný pád postačí nalezené řešení bez počáteční rychlosti. Integrace iteračního řešení nám dá polohu kamene:

$$\mathbf{r}(t) \doteq \mathbf{r}^{(2)}(t) = \mathbf{r}_0 + \mathbf{g}\frac{t^2}{2} + (\mathbf{g}\times\boldsymbol{\omega})\frac{t^3}{3}. \tag{1.81}$$

Zvolme nyní konkrétní souřadnicový systém na povrchu Země (řešení posuneme ze středu Země k povrchu, poloha vystupuje jen v prvním členu na pravé straně). Osa z bude mířit svisle, osu x orientujeme na východ a osu y na sever. Jde o pravotočivý souřadnicový systém, což ve výsledku zajišťuje správná znaménka vektorových součinů. Na obrázku 19 je θ polární úhel a $\lambda = 90° - \theta$ zeměpisná šířka. Jednotlivé vektory v řešení (1.81) budou:

$$\mathbf{r}^{(0)} = (0, 0, H);$$
$$\mathbf{g} = (0, 0, -g); \tag{1.82}$$
$$\boldsymbol{\omega} = (0, \omega\cos\lambda, \omega\sin\lambda).$$

Volný pád kamene je tedy po rozepsání vektorového součinu popsán vztahy

$$x = \frac{g\omega t^3}{3}\cos\lambda\,;$$
$$y = 0\,; \tag{1.83}$$
$$z = H - \frac{gt^2}{2}\,.$$

Kámen se bude při pádu odchylovat vlivem Coriolisovy síly ve směru osy x, tedy na východ. Nyní zbývá určit velikost odklonu. Položíme-li v třetí rovnici (1.83) $z = 0$, zjistíme dobu, za kterou kámen dopadl. Tu dosadíme do vztahu pro x a máme výslednou vzdálenost

$$\Delta x = x_{\text{fin}} - x_0 = \frac{g\omega}{3}\left(\frac{2H}{g}\right)^{3/2}\cos\lambda \approx 7\ \text{mm}. \tag{1.84}$$

◗

1.4.3 Problém dvou těles, Keplerova úloha

Mějme dvě tělesa, která na sebe vzájemně působí silou (gravitační, elektrostatickou nebo jinou silou působící na spojnici obou těles). Jejich pohybové rovnice jsou:

$$m_1\ddot{\mathbf{r}}_1 = \mathbf{F}_{12}\,;$$
$$m_2\ddot{\mathbf{r}}_2 = \mathbf{F}_{21}\,. \tag{1.85}$$

Ze zákona akce a reakce platí:

$$\mathbf{F}_{12} = -\mathbf{F}_{21} \qquad \Rightarrow \qquad \mathbf{F}_{12} + \mathbf{F}_{21} = 0\,. \tag{1.86}$$

Od polohových vektorů $\mathbf{r}_1$ a $\mathbf{r}_2$ přejdeme k jiné šestici souřadnic – poloze těžiště a relativní poloze druhého tělesa vzhledem k prvnímu:

$$\mathbf{r}_{\text{T}} \equiv \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}\,;$$
$$\mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1\,. \tag{1.87}$$

Z rovnic (1.85) snadno nalezneme pohybové rovnice v nových proměnných:

$$\ddot{\mathbf{r}}_{\text{T}} = \frac{\mathbf{F}_{12} + \mathbf{F}_{21}}{m_1 + m_2} = 0\,;$$

$$\ddot{\mathbf{r}} = \ddot{\mathbf{r}}_2 - \ddot{\mathbf{r}}_1 = \frac{\mathbf{F}_{21}}{m_2} - \frac{\mathbf{F}_{12}}{m_1} = \left(\frac{1}{m_2} + \frac{1}{m_1}\right)\mathbf{F}_{21}\,.$$

V nových proměnných mají tedy pohybové rovnice velmi jednoduchý tvar

$$\ddot{\mathbf{r}}_{\mathrm{T}} = 0\,; \qquad \mu\,\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F}_{21}\,, \tag{1.88}$$

kde μ je tzv. redukovaná hmotnost daná vztahem

$$\mu \equiv \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}\,. \tag{1.89}$$

Z první rovnice (1.88) je vidět, že těžiště soustavy se může pohybovat jen konstantní rychlostí. Z druhé rovnice je zřejmé, že pohyb dvou těles lze řešit jako pohyb jediného tělesa s redukovanou hmotností μ, které se pohybuje vzhledem k prvnímu z obou těles. Pokud je hmotnost prvního tělesa podstatně větší než hmotnost druhého tělesa, je redukovaná hmotnost přibližně rovna hmotnosti menšího z obou těles. Velké těleso se v tomto přiblížení vůbec nepohybuje. Jde například o pohyb planet kolem Slunce. Obíhající planety ovlivní pohyb Slunce minimálně.

Není bez zajímavosti, že pohyb dvou těles, které na sebe působí silami na jejich spojnici, je vždy rovinný. Vyplývá to ze zákona zachování momentu hybnosti:

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{b}}{\mathrm{d}t} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\mathbf{r}\times m\mathbf{v}\right) = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{v}\times m\mathbf{v} + \mathbf{r}\times m\mathbf{a} = 0 \quad \Rightarrow$$
$$\mathbf{r}\times m\mathbf{a} = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{a} \parallel \mathbf{r}\,. \tag{1.90}$$

Zrychlení, kterým na sebe tělesa působí leží na jejich spojnici. Pokud pohyb probíhá v nějaké rovině, zrychlení nikdy nemůže působit mimo tuto rovinu, a proto se pohyb bude konat pouze v této rovině.

Keplerova úloha

Řešme nyní pohyb planety o hmotnosti m kolem Slunce s hmotností M ($m \ll M$). Pokud by hmotnosti obou těles byly souměřitelné, můžeme úlohu snadno převést na relativní pohyb tělesa o redukované hmotnosti kolem druhého z těles. Naše úloha je rovinná. Při řešení proto použijeme polární souřadnice, v nichž má Lagrangeova funkce tvar (1.25)

$$L(r,\dot{r},\dot{\varphi}) = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2) + G\frac{mM}{r}\,. \tag{1.91}$$

V soustavě se budou zachovávat moment hybnosti a energie:

$$b \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = mr^2\dot{\varphi}\,, \tag{1.92}$$

$$E \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{r}}\dot{r} + \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}}\dot{\varphi} - L = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2) - G\frac{mM}{r} = \frac{1}{2}m\dot{r}^2 + \frac{b^2}{2mr^2} - G\frac{mM}{r}\,. \tag{1.93}$$

V zákonu zachování energie jsme časovou změnu úhlu φ vyjádřili ze zákona zachování momentu hybnosti. Namísto řešení pohybových rovnic, které jsou druhého řádu, můžeme integrovat zákony zachování, které jsou prvního řádu. Z obou zákonů zachování vypočteme časové derivace zobecněných souřadnic:

$$\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t} = \frac{b}{mr^2}, \tag{1.94}$$

$$\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t} = \sqrt{\frac{2}{m}\left(E - \frac{b^2}{2mr^2} + G\frac{mM}{r}\right)}. \tag{1.95}$$

Jde o soustavu diferenciálních rovnic pro proměnné $r(t)$ a $\varphi(t)$. V Keplerově úloze nás nezajímá časový vývoj souřadnic, ale jen tvar dráhy planety, tj. závislost $r(\varphi)$. Proto vydělíme druhou rovnici první:

$$\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}\varphi} = \frac{\sqrt{\frac{2}{m}\left(E - \frac{b^2}{2mr^2} + G\frac{mM}{r}\right)}}{b/mr^2}. \tag{1.96}$$

Tuto rovnici pro $r(\varphi)$ je možné řešit přímo separací a následnou integrací. Zvolme ale poněkud jiný postup. Rovnici umocníme na druhou a upravíme do tvaru

$$\frac{b^2}{2mr^4}\left(r'\right)^2 = E - \frac{b^2}{2mr^2} + \frac{GmM}{r}$$

Čárka označuje derivaci podle proměnné φ. Zvolíme substituci

$$r = \frac{1}{\xi}; \qquad r' = -\frac{1}{\xi^2}\xi', \tag{1.97}$$

po které dostaneme

$$\frac{b^2}{2Gm^2M}\left(\xi'\right)^2 + \frac{b^2}{2Gm^2M}\xi^2 - \xi = \frac{E}{GmM}. \tag{1.98}$$

Pokud rovnici ještě jednou derivujeme, získáme

$$\frac{b^2}{Gm^2M}\xi''\xi' + \frac{b^2}{Gm^2M}\xi\xi' - \xi' = 0 \qquad \Rightarrow$$

$$\frac{b^2}{Gm^2M}\left(\xi'' + \xi\right) = 1 \qquad \Rightarrow$$

$$\xi'' + \xi = 1/p; \qquad p \equiv \frac{b^2}{Gm^2M}. \tag{1.99}$$

Jde o lineární diferenciální rovnici druhého řádu s pravou stranou. Partikulární řešení je $1/p$, homogenní řešení můžeme zapsat ve tvaru $\cos(\varphi–\varphi_0)$. Celkové řešení tedy bude

$$\xi = C\cos(\varphi - \varphi_0) + \frac{1}{p}. \tag{1.100}$$

Řešení má dvě integrační konstanty φ_0 a C. Konstanta φ_0 určuje počátek odečtu polárního úhlu. Vhodným pootočením souřadnicové soustavy můžeme zvolit $\varphi_0 = 0$. Kon-

stantu C určíme tak, aby nalezené řešení splňovalo původní rovnici (1.98), tj. rovnici před derivováním (což není ekvivalentní úprava):

$$C = \sqrt{\frac{2E}{GmMp} + \frac{1}{p^2}} \quad . \tag{1.101}$$

Konstantu C dosadíme do řešení (1.100) a vrátíme se k původní proměnné r:

$$r = \frac{p}{1 + \left(\sqrt{\frac{2Ep}{GmM} + 1} \right) \cos\varphi} \, .$$

Výsledné řešení má tedy tvar

► $$r = \frac{p}{1 + \varepsilon \cos\varphi} \, ; \qquad \varepsilon \equiv \sqrt{\frac{2Ep}{GmM} + 1} \, ; \qquad p \equiv \frac{b^2}{Gm^2 M} \, . \tag{1.102}$$

Jde o rovnici kuželosečky (viz dodatek D) s numerickou excentricitou ε. V gravitačním poli centrálního tělesa se tedy budou jiná tělesa pohybovat po kuželosečkách. Pro $E < 0$ je $\varepsilon < 1$ a pohyb se koná po elipse. Záporná energie znamená vazbu obou těles. Tento případ platí pro planety sluneční soustavy. Pro $E = 0$ je $\varepsilon = 1$ a pohyb je parabolický. Pro $E > 0$ je $\varepsilon > 1$ a těleso se pohybuje po hyperbole. Minimální a maximální vzdálenost oběhu bychom ve všech případech dostali hledáním extrémů závislosti (1.102).

Efektivní potenciál

Energie pohybujícího se tělesa je z Lagrangeovy funkce dána formulí (1.93)

$$E \equiv \frac{1}{2} m\dot{r}^2 + \frac{1}{2} mr^2 \dot{\varphi}^2 - G\frac{mM}{r} \, . \tag{1.103}$$

Energie se skládá z radiální kinetické energie, úhlové složky kinetické energie a potenciální energie. Výrazy se zobecněnými rychlostmi tvoří kinetickou energii a výraz obsahující jen polohu potenciální energii. Pokud ale vyjádříme druhý člen za pomoci zákona zachování momentu hybnosti (1.92), dostaneme

$$E = \frac{1}{2} m\dot{r}^2 + \frac{b^2}{2mr^2} - G\frac{mM}{r} \, . \tag{1.104}$$

Druhý člen je nyní závislý pouze na poloze a můžeme ho proto přiřadit k potenciálu. Interpretace členu jako kinetického nebo potenciálního je tedy relativní a závisí na úhlu našeho pohledu. Zaveďme tzv. efektivní potenciál:

► $$E = \frac{1}{2} m\dot{r}^2 + V_{\text{eff}}(r) \, ; \qquad V_{\text{eff}}(r) \equiv \frac{b^2}{2mr^2} - G\frac{mM}{r} \, . \tag{1.105}$$

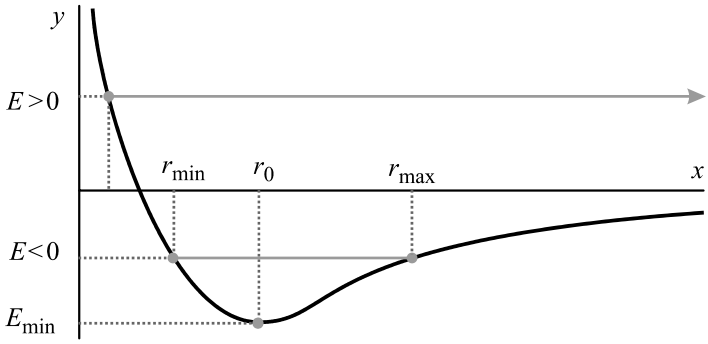
Z první rovnice snadno určíme radiální rychlost tělesa

$$\dot{r} = \sqrt{\frac{2}{m}\left(E - V_{\text{eff}}(r)\right)}\,. \tag{1.106}$$

Je zjevné, že pohyb se může konat jedině v takových oblastech efektivního potenciálu, kde platí

$$E \geq V_{\text{eff}}(r)\ . \tag{1.107}$$

Průběh efektivního potenciálu je znázorněn na obrázku 20, kde je patrné, že pro $E > 0$ je pohyb neomezený, $r \in < r_{\min}, \infty)$, pohyb se koná po hyperbole. Naopak pro $E < 0$ je pohyb omezený, $r \in < r_{\min}, r_{\max} >$ a pohyb se koná po elipse. Limitními případy jsou $E = 0$ (pohyb po parabole) a $E = E_{\min}$ (pohyb po kružnici $r = r_0$).



Obr. 20: Efektivní potenciál.

◖ Příklad 18: Země jako oscilátor

Pohyb Země kolem Slunce lze chápat jako pohyb v efektivním potenciálu v okolí minima. Takový pohyb je přibližně harmonický (radiální vzdálenost Země od Slunce kolísá periodicky). Potenciál lze nahradit v okolí minima parabolickou závislostí. Předpokládejte, že moment hybnosti Země je $b = 2{,}7\times10^{40}$ kg m^{2}s^{-1}. Určete minimum efektivního potenciálu a periodu oběhu Země kolem Slunce.

Řešení: Standardním postupem (viz kapitola 1.3.2) určíme minimum efektivního potenciálu (1.105) a tuhost oscilací. Z tuhosti pak již snadno nalezneme periodu pohybu:

$$r_0 = \frac{b^2}{Gm^2M} \approx 150\times10^6 \text{ km};$$

$$k = V''_{\text{eff}}(r_0) = \frac{G^4m^7M^4}{b^6};$$

$$T = \frac{2\pi}{\omega} = \frac{2\pi}{\sqrt{k/m}} = \frac{2\pi}{\sqrt{G^4m^6M^4/b^6}} = \frac{2\pi b^3}{G^2m^3M^2} \approx 365 \text{ dní}.$$

◗

Keplerovy zákony

1) Planety se pohybují kolem Slunce po elipsách, Slunce je v jednom z ohnisek.
2) Plošná rychlost průvodiče planety (spojnice planety se Sluncem) je konstantní.
3) Poměr druhé mocniny oběžné doby planety a třetí mocniny její velké poloosy je konstantní.

Třetí Keplerův zákon lze vyjádřit jednoduchým vztahem:

► $$\frac{T^2}{a^3} = \frac{4\pi^2}{G(m+M)} . \tag{1.108}$$

Malým m značíme hmotnost planety, velkým M hmotnost Slunce.

Ad 1). Pohyb po elipse plyne okamžitě ze vztahu (1.102).

Ad 2). Jde o jednoduchý důsledek zákona zachování momentu hybnosti. Změnu plochy při pohybu planety můžeme zapsat za pomoci vektorového součinu

$$\mathrm{d}\mathbf{S} = \frac{1}{2}\mathbf{r}\times\mathrm{d}\mathbf{r} .$$

Pro plošnou rychlost potom máme

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{S}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{2}\mathbf{r}\times\mathbf{v} = \frac{1}{2m}\mathbf{r}\times m\mathbf{v} = \frac{\mathbf{b}}{2m} . \tag{1.109}$$

Zákon zachování plošné rychlosti je tedy jen jinou formulací zákona zachování momentu hybnosti planety.

Ad 3). V relativních souřadnicích podle vztahu (1.88) pro problém dvou těles platí

$$\mu\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F} \quad \Rightarrow \quad \frac{mM}{m+M}\ddot{\mathbf{r}} = G\frac{mM}{r^2}\frac{\mathbf{r}}{r} \quad \Rightarrow \quad m\ddot{\mathbf{r}} = G\frac{m(m+M)}{r^2}\frac{\mathbf{r}}{r} .$$

V relativních souřadnicích u problému dvou těles vystupuje namísto hmotnosti Slunce součet hmotností obou těles, jinak je pohybová rovnice identická s rovnicí pro centrální gravitační pole. Integrujme nyní velikost vztahu (1.109) pro plošnou rychlost

$$\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t} = \frac{b}{2m} \quad \Rightarrow \quad S = \frac{b}{2m}T \quad \Rightarrow \quad \pi a_0 b_0 = \frac{b}{2m}T \quad \Rightarrow$$

$$2\pi a_0 b_0 m = bT . \tag{1.110}$$

V odvození jsme použili vztah (D.5) pro plochu elipsy $S = \pi a_0 b_0$, který je uveden v dodatku D (přidali jsme indexy 0, aby nedošlo k záměně s momentem hybnosti). Veškeré veličiny se pokusíme převést na charakteristiky eliptické dráhy. Za moment hybnosti dosadíme ze vztahu (1.102), na rozdíl od centrálního pole zde bude ale hmotnost Slunce vystupovat v součtu s hmotností planety, tj.

$$p = \frac{b^2}{Gm^2(m+M)}. \tag{1.111}$$

Po dosazení za b ze vztahu (1.111) do vztahu (1.110) dostaneme

$$2\pi a_0 b_0 m = \sqrt{pGm^2(m+M)}\,T \qquad \Rightarrow \qquad 4\pi^2 a_0^2 b_0^2 = Gp(m+M)T^2 .$$

Veškeré parametry elipsy nyní převedeme na velkou poloosu a excentricitu. Využijeme vztahy (D.4) z dodatku D, tj. $b_0^2 = a_0^2(1-\varepsilon^2)$; $p = a_0(1-\varepsilon^2)$. Výsledkem je hledaný vztah

$$\frac{T^2}{a_0^3} = \frac{4\pi^2}{G(m+M)}.$$

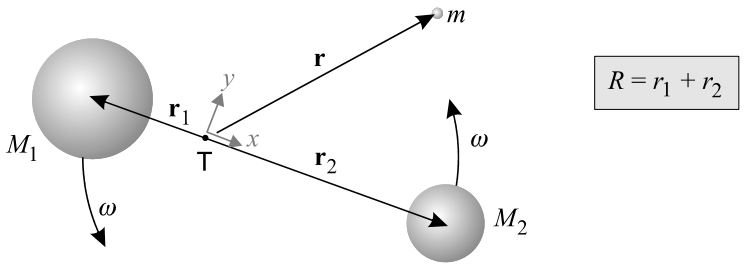
1.4.4 Lagrangeovy body

Problém tří těles, které na sebe vzájemně gravitačně působí, není v plné šíři analyticky řešitelný. V případě tzv. *restriktivního kruhového problému tří těles* (viz předpoklady dále) lze v okolí dvou vzájemně obíhajících těles nalézt pět rovnovážných bodů. Pokud do nich vložíme malé testovací tělísko, budou v rovnováze gravitační síly od obou těles s odstředivou silou pohybu v daném místě. Tyto body poprvé nalezl francouzsko-italský matematik Joseph Louis Lagrange, proto nesou jeho jméno [8]–[9].

Předpoklady

1) jde o tzv. *restriktivní problém*, tj. dvě tělesa jsou velká a jedno je malé, testovací. Toto testovací tělísko neovlivní gravitační potenciál v daném místě.
2) jde o cirkulární problém, tj. dvě velká tělesa kolem sebe vzájemně obíhají tak, že se nemění jejich vzdálenost. Relativní pohyb jednoho vůči druhému probíhá po kružnici. Přibližně takovou soustavou jsou například dvojice Země-Měsíc, Země-Slunce nebo Jupiter-Slunce.

Formulace úlohy



Obr. 21: Ke Keplerově úloze, těžiště je označeno T, vzájemná vzdálenost velkých těles *R*.

Předpokládáme, že dvě hmotná tělesa o hmotnostech M_1, M_2 obíhají kolem společného těžiště T takovým způsobem, že jejich vzájemná vzdálenost R zůstává konstantní, tj. jedno těleso obíhá kolem druhého po kružnici (na grafu efektivního potenciálu jde o minimum). Hledáme takové polohy testovacího tělíska o malé hmotnosti m ($m \ll M_1$, M_2), ve kterých jsou veškeré síly (gravitační, odstředivá) nulové a tělísko se nepohybuje (tím je nulová i Coriolisova síla). Problém budeme formulovat v souřadnicové soustavě, která má počátek v těžišti a rotuje spolu s oběma tělesy úhlovou rychlostí danou třetím Keplerovým zákonem (1.108)

$$\omega^2 = \frac{G(M_1 + M_2)}{R^3}; \qquad R = r_1 + r_2 . \tag{1.112}$$

Úhlová rychlost jako vektor míří kolmo na rovinu oběhu obou těles (například v ose z). Spojnice obou těles tvoří jednu ze souřadnicových os naší soustavy (například osu x). Jde o neinerciální souřadnicovou soustavu, ve které je pohyb testovacího tělíska dán Lagrangeovou funkcí (1.75):

$$L = \frac{1}{2} m(\mathbf{v} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r})^2 + G\frac{mM_1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|} + G\frac{mM_2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|} \tag{1.113}$$

Lagrangeovu funkci lze zapsat za pomoci efektivní potenciální energie ve tvaru

$$L = T - V_{\text{eff}} ; \tag{1.114}$$

$$T \equiv \frac{1}{2} m\mathbf{v}^2 , \tag{1.115}$$

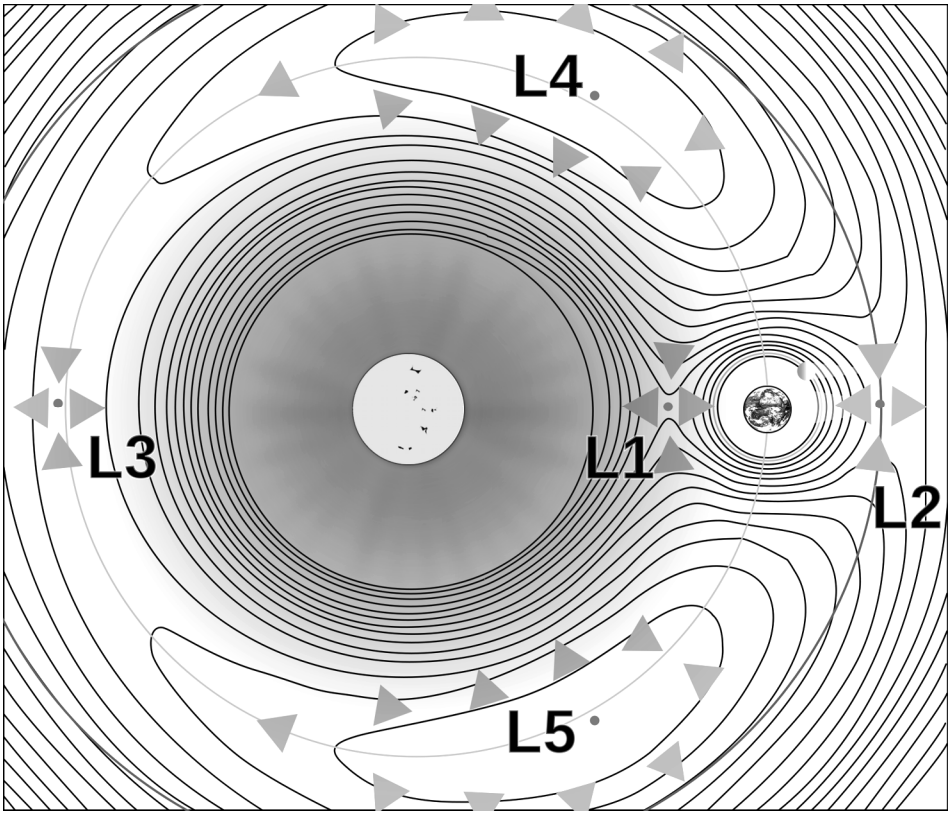
$$V_{\text{eff}} \equiv -m\mathbf{v} \cdot (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}) - \frac{1}{2} m(\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r})^2 - G\frac{mM_1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|} - G\frac{mM_2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|} . \tag{1.116}$$

Silové působení na naše testovací tělísko (resp. pohybová rovnice) má tvar (1.80), který jsme odvodili pro neinerciální souřadnicovou soustavu:

► $$\frac{\mathrm{d}m\mathbf{v}}{\mathrm{d}t} = 2m(\mathbf{v} \times \boldsymbol{\omega}) + m\,\boldsymbol{\omega} \times (\mathbf{r} \times \boldsymbol{\omega}) - G\frac{mM_1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|^3}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) - G\frac{mM_2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|^3}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2) . \tag{1.117}$$

Napravo jsou jednotlivé silové členy (Coriolisova síla, odstředivá síla a gravitační síly působící od obou těles). Souřadnicovou soustavu volíme tak, že osa x leží na spojnici obou těles, osa y je kolmá na osu x (v rovině oběhu) a osa z je kolmá na rovinu oběhu. Při hledání rovnovážných bodů můžeme postupovat dvojím způsobem. První možností je hledání extrémů efektivního potenciálu (1.116). První člen bude nulový, protože hledáme jen rovnovážné body, ve kterých se testovací tělísko nepohybuje ($\mathbf{v} = 0$). Tento postup je vhodný pro grafické řešení – ekvipotenciály funkce V_{eff} můžeme vykreslovat vhodným softwarem (například v programu Mathematica).

Druhou možností je řešit podmínku na nulovou sílu (1.117). V rovnovážných bodech se testovací těleso nehýbe, jeho rychlost je vůči naší souřadnicové soustavě nulová, a proto je nulový i první člen (Coriolisova síla). Jde tedy pouze o rovnováhu gravitační a odstředivé síly. Coriolisova síla má ale podstatný vliv na stabilitu nalezených Lagrangeových bodů.



Obr. 22. Ekvipotenciály efektivního potenciálu soustavy Slunce-Země.
Šipkami je znázorněn směr „z kopce do údolí“. NASA/WMAP.

Lagrangeovy body

Lagrangeovy body hledáme z rovnice

$$m\boldsymbol{\omega}\times(\mathbf{r}\times\boldsymbol{\omega})-G\frac{mM_1}{\left|\mathbf{r}-\mathbf{r}_1\right|^3}\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}_1\right)-G\frac{mM_2}{\left|\mathbf{r}-\mathbf{r}_2\right|^3}\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}_2\right)=0\,, \tag{1.118}$$

která vyjadřuje rovnováhu odstředivé síly a gravitačních sil. Polohové vektory $\mathbf{r}_1$ a $\mathbf{r}_2$ jsou v námi zvolené souřadnicové soustavě známé, do (1.118) dosadíme:

$$\mathbf{r}_1=\left(-\mu_2 R,0,0\right);\qquad \mathbf{r}_2=\left(+\mu_1 R,0,0\right);$$

$$\boldsymbol{\omega}=(0,0,\omega);\qquad \omega^2=\frac{GM}{R^3}; \tag{1.119}$$

$$\mathbf{r}=(x,y,0)\,,\qquad \overline{\mathbf{r}}=(\overline{x},\overline{y},0)\equiv(x/R,y/R,0)\,,$$

kde jsme označili proměnné

$$\mu_1 \equiv \frac{M_1}{M}; \qquad \mu_2 \equiv \frac{M_2}{M}; \qquad M \equiv M_1 + M_2;$$
$$\bar{x} \equiv \frac{x}{R}; \qquad \bar{y} \equiv \frac{y}{R} \tag{1.120}$$

Konstanty μ_1, μ_2 jsou relativní hmotnosti (vyjadřují, jakou část z celkové hmotnosti má první resp. druhé těleso. Proměnné $\bar{x}$, $\bar{y}$ jsou bezrozměrné souřadnice Lagrangeova bodu v jednotkách vzdálenosti mezi oběma tělesy. Výsledkem je soustava dvou rovnic pro dvě neznámé souřadnice Lagrangeova bodu:

$$\bar{x} - \frac{\mu_1(\bar{x}+\mu_2)}{\left[(\bar{x}+\mu_2)^2+\bar{y}^2\right]^{3/2}} - \frac{\mu_2(\bar{x}-\mu_1)}{\left[(\bar{x}-\mu_1)^2+\bar{y}^2\right]^{3/2}} = 0;$$
$$\bar{y} - \frac{\mu_1\bar{y}}{\left[(\bar{x}+\mu_2)^2+\bar{y}^2\right]^{3/2}} - \frac{\mu_2\bar{y}}{\left[(\bar{x}-\mu_1)^2+\bar{y}^2\right]^{3/2}} = 0. \tag{1.121}$$

Z druhé rovnice plyne okamžitě jedno z řešení, a to $\bar{y} = 0$. Jde o Lagrangeovy body nacházející se na ose *x*, tedy na přímce procházející oběma tělesy. Po dosazení $\bar{y} = 0$ do první rovnice máme

$$\bar{x} - \frac{\mu_1 \operatorname{sgn}(\bar{x}+\mu_2)}{(\bar{x}+\mu_2)^2} - \frac{\mu_2 \operatorname{sgn}(\bar{x}-\mu_1)}{(\bar{x}-\mu_1)^2} = 0. \tag{1.122}$$

Jde o rovnici pátého stupně, která má tři reálná řešení (Lagrangeovy body L_1, L_2, L_3). V rovnici ponecháme menší z obou parametrů, například hmotnost μ_2:

$$\bar{x}(\bar{x}+\mu_2)^2(\bar{x}-1+\mu_2)^2 \pm (1-\mu_2)(\bar{x}-1+\mu_2)^2 \pm \mu_2(\bar{x}+\mu_2)^2 = 0. \tag{1.123}$$

Možné kombinace znamének u druhého a třetího členu jsou

$$+ - (L_1); + + (L_2); - - (L_3).$$

Řešení je možné najít buď numericky nebo provést rozvoj do nejnižšího řádu podle μ_2. Například pro soustavu Slunce-Země je $\mu_2 \approx 3\times10^{-6}$ a provedení rozvoje podle tohoto parametru je korektní. Výsledné polohy jsou

► $$L_1 = R\left[1-\left(\frac{\mu_2}{3}\right)^{1/3}, 0\right]; \quad L_2 = R\left[1+\left(\frac{\mu_2}{3}\right)^{1/3}, 0\right]; \quad L_3 = -R\left[1+\frac{5\mu_2}{12}, 0\right]. \tag{1.124}$$

Pro soustavu Slunce-Země je vzdálenost *R* je rovna jedné astronomické jednotce, tj. přibližně 150×10^6 km. Lagrangeovy body L_1 a L_2 jsou vzdáleny od Země zhruba $1{,}5\times10^6$ km.

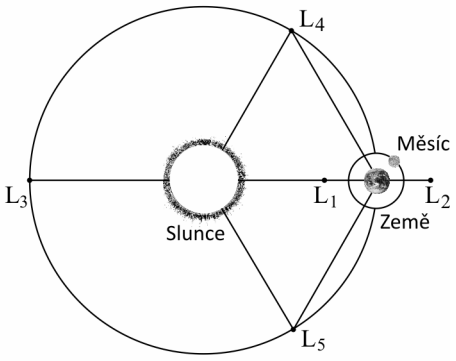
K nalezení řešení pro $\bar{y} \neq 0$ se vrátíme k rovnicím (1.121). Můžeme využít symetrie problému podél osy *x*. Řešení lze nalézt v tomto případě analyticky:

$$L_4 = R\left[\frac{\mu_1-\mu_2}{2}, +\frac{\sqrt{3}}{2}\right]; \qquad L_5 = R\left[\frac{\mu_1-\mu_2}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}\right]. \tag{1.125}$$

Lagrangeovy body L_1, L_2. Oba tyto body leží na přímce procházející oběma tělesy. V případě soustavy Slunce-Země leží bod L_1 ve vzdálenosti $1{,}5\times10^6$ km od Země směrem ke Slunci a bod L_2 ve stejné vzdálenosti směrem od Slunce. Bod L_1 je velmi výhodný pro pozorování Slunce. Poprvé zde byla umístěna sonda ISEE-3 v roce 1978. Později se bod L_1 stal domovem jedné z nejslavnějších slunečních sond SOHO. V bodě L_1 je rychlost oběhu Slunce větší než v místě, kde je Země. Gravitační tah Země ale sondu v L_1 brzdí na stejnou úhlovou rychlost. Naopak v bodě L_2, který je dále od Slunce, jsou umístěny sondy pro výzkum vzdáleného vesmíru – americká WMAP a evropská Planck. Sondy by zde obíhaly Slunce pomaleji, ale gravitační tah Země jim uděluje správnou rychlost. Z hlediska stability jsou L_1 i L_2 sedlové body, při vychýlení v jednom směru působí na sondu vratná síla, při vychýlení v druhém směru se sondy začnou exponenciálně vzdalovat s charakteristickou konstantou $\tau \approx 23$ dní, což znamená, že porucha roste podle funkce $\exp(t/\tau)$. Sondy v těchto bodech musejí vždy po několika měsících provádět korekce dráhy.

Lagrangeův bod L_3. Bod leží pro soustavu Slunce-Země na opačné straně Slunce, nepatrně dále, než je oběžná dráha Země. Jakékoli těleso v tomto bodě je pro nás trvale nepozorovatelné, protože je za slunečním kotoučem. To vedlo k domněnkám, že by se v bodě L_3 mohla nacházet pro nás trvale neviditelná planeta, která dostala název planeta X. Lagrangeův bod L_3 je opět sedlovým bodem, je nestabilní s charakteristickou konstantou $\tau \approx 150$ let. Jakákoli dlouhodobější existence planety v tomto místě je proto zcela vyloučena.

Lagrangeovy body L_4, L_5. Tyto body neleží na spojnici obou těles, ale tvoří s nimi rovnostranné trojúhelníky. Vzdálenost bodů L_4 a L_5 k oběma tělesům jsou stejné a rovny R, tj. vzdálenosti těles samotných. Oba body leží v maximech efektivního potenciálu, a proto by se mohlo na první pohled zdát, že jsou nestabilní. Při jakémkoli vychýlení ale začne působit na testovací těleso Coriolisova síla, která ho bude vracet zpět. Výsledkem je oběh kolem bodů L_4 a L_5. Pro soustavu Slunce–Země je perioda oběhu 89 dní. Tělesa nacházející se v Lagrangeových bodech L_4 a L_5 se nazývají Trojané. Nejznámější jsou Trojané soustavy Slunce-Jupiter.



Obr. 23: Lagrangeovy body soustavy Slunce-Země.

1.4.5 Disipace energie

Lagrangeovy rovnice v podobě, ve které jsme je odvodili, platí pro nedisipativní systémy, tedy pro systémy, ve kterých se nepřeměňuje část energie nevratně na teplo. To je výhodné pro všechny základní interakce v přírodě. Nicméně pro techničtější využití je někdy třeba tepelné ztráty do výpočtu zahrnout. Stačí, aby v elektrickém obvodu byl přítomný elektrický odpor nebo aby se pohybující těleso třelo o okolní vzduch. V těchto případech se v pohybových rovnicích vždy vyskytují členy úměrné zobecněné rychlosti. Jako příklad může posloužit pohybová rovnice pro letící kámen:

$$\frac{\mathrm{d}\, m\mathbf{v}}{\mathrm{d}t} = m\mathbf{g} - \alpha\mathbf{v}\,. \tag{1.126}$$

První člen napravo je tíhová síla a druhý je síla odporu vzduchu. Ta je úměrná rychlosti (v některých situacích kvadrátu rychlosti) a má opačný směr než pohyb. Jiným příkladem může být jednoduchý obvod, kde jsou v sérii zapojeny všechny tři základní prvky, tj. kondenzátor, cívka a odpor. Součet napětí na všech prvcích musí dát nulu, tedy

$$\mathscr{L}\frac{\mathrm{d}I}{\mathrm{d}t} + \frac{Q}{\mathscr{C}} + \mathscr{R}I = 0\,. \tag{1.127}$$

Zobecněnou proměnnou (viz kapitola 1.1.6, LC obvod) je náboj. „Pohybová“ rovnice má tvar

$$\mathscr{L}\ddot{Q} + \mathscr{R}\dot{Q} + \frac{Q}{\mathscr{C}} = 0\,. \tag{1.128}$$

Druhý člen je opět úměrný zobecněné rychlosti a představuje v systému disipaci energie. Pokud chceme zobecnit Lagrangeovy rovnice i pro případ disipace energie, budou mít tvar

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial L}{\partial q_k} + \alpha_{kl}\dot{q}_l = 0\,. \tag{1.129}$$

V posledním členu jsme použili Einsteinovu sumační konvenci. To nás vede k reformulaci Lagrangeových rovnic do tvaru

► $$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial L}{\partial q_k} = -\frac{\partial R}{\partial \dot{q}_k}\,; \qquad R = \frac{1}{2}\alpha_{kl}\dot{q}_k\dot{q}_l\,. \tag{1.130}$$

Derivacemi kvadratické funkce na pravé straně vzniknou disipativní členy, které jsou lineární v zobecněných rychlostech. Tato funkce se nazývá *Rayleighova disipační funkce*. V případě disipace tak pro správnou formulaci úlohy musíme „uhodnout“ dvě funkce: Lagrangeovu funkci a Rayleighovu disipační funkci. Pokud mají obě funkce správný tvar, získáme rovnice, které jsou ve shodě s přírodními ději.

◖ Příklad 19: RLC obvod

Rovnici (1.128) získáme z Lagrangeových rovnic (1.130), pokud zvolíme

$$L(Q,\dot{Q}) = \frac{1}{2}\mathscr{L}\dot{Q}^2 - \frac{Q^2}{2\mathscr{C}}; \qquad R(\dot{Q}) = \frac{1}{2}\mathscr{R}\dot{Q}^2 . \tag{1.131}$$

Lagrangeova funkce má obdobný tvar jako v mechanice (členy připomínají rozdíl kinetické a potenciální energie). Rayleighova disipační funkce je úměrná ztrátě energie ze systému za jednotku času, protože $\mathrm{d}E/\mathrm{d}t = UI = \mathscr{R}I^2 = \mathscr{R}(\mathrm{d}Q/\mathrm{d}t)^2$.

◗

Hybnost a energii definujeme v případě disipativních procesů stejným způsobem jako obvykle, tj.

$$p_k \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}; \tag{1.132}$$

$$E \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\dot{q}_k - L . \tag{1.133}$$

Energie se ale v případě disipace nebude zachovávat, ani když Lagrangeova funkce nezávisí explicitně na čase. Najděme v tomto případě změnu energie s časem:

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\dot{q}_k - L\right) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\right)\dot{q}_k + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\ddot{q}_k - \frac{\partial L}{\partial q_k}\dot{q}_k - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\ddot{q}_k =$$

$$= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\right)\dot{q}_k - \frac{\partial L}{\partial q_k}\dot{q}_k = \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_k}\right]\dot{q}_k = -\frac{\partial R}{\partial \dot{q}_k}\dot{q}_k = -2R$$

V posledním kroku jsme použili Eulerovu větu o derivaci homogenních funkcí, která pro kvadratickou funkci $f(x)$ má tvar $x\mathrm{d}f/\mathrm{d}x = 2f$ (důkaz je triviální, jde jen o derivaci kvadrátu). Získaný výsledek

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t} = -2R \tag{1.134}$$

jasně dává do souvislosti Rayleighovu disipační funkci se ztrátou energie ze systému za jednotku času. Vztah (1.134) lze zapsat jako zákon zachování energie takto:

$$E + \int_0^t 2R\,\mathrm{d}t = \mathrm{const} . \tag{1.135}$$

Provedeme-li transformaci od proměnných $(q, \mathrm{d}q/\mathrm{d}t)$ k proměnným (q, p) v zobecněné energii, získáme Hamiltonovu funkci $H(q, p)$. Ukažme nyní, jak budou vypadat Hamiltonovy rovnice v případě disipace energie. Zřejmě platí

$$\mathrm{d}L = \frac{\partial L}{\partial q_k}\mathrm{d}q_k + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\mathrm{d}\dot{q}_k \qquad \Rightarrow$$

$$\mathrm{d}L = \left(\dot{p}_k + \frac{\partial R}{\partial \dot{q}_k} \right) \mathrm{d}q_k + p_k \mathrm{d}\dot{q}_k \qquad \Rightarrow$$

$$\mathrm{d}L = \left(\dot{p}_k + \frac{\partial R}{\partial \dot{q}_k} \right) \mathrm{d}q_k + \mathrm{d}(p_k \dot{q}_k) - \dot{q}_k \mathrm{d}p_k \qquad \Rightarrow$$

$$\mathrm{d}\left(p_k \dot{q}_k - L \right) = -\left(\dot{p}_k + \frac{\partial R}{\partial \dot{q}_k} \right) \mathrm{d}q_k + \dot{q}_k \mathrm{d}p_k \qquad \Rightarrow$$

$$\mathrm{d}H = -\left(\dot{p}_k + \frac{\partial R}{\partial \dot{q}_k} \right) \mathrm{d}q_k + \dot{q}_k \mathrm{d}p_k \ .$$

Při úpravě prvního vztahu jsme využili Lagrangeovy rovnice ve tvaru (1.130) a definici hybnosti (1.132). Vzhledem k tomu, že hamiltonián H je pouze funkcí zobecněných souřadnic a hybností, musí být koeficienty u příslušných diferenciálů rovny odpovídajícím parciálním derivacím, tj.

$$-\left(\dot{p}_k + \frac{\partial R}{\partial \dot{q}_k} \right) = \frac{\partial H}{\partial q_k}; \qquad \dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k}.$$

Odsud již snadno získáme Hamiltonovy pohybové rovnice pro případ disipace energie:

► $$\begin{aligned} \dot{q}_k &= \frac{\partial H}{\partial p_k}; \\ \dot{p}_k &= -\frac{\partial H}{\partial q_k} - \frac{\partial R}{\partial \dot{q}_k}. \end{aligned} \tag{1.136}$$

Člen $\partial R/\partial \dot{q}_k$ musíme vyjádřit pomocí zobecněných poloh a hybností, tj. jako funkci (q, p).

1.4.6 Inverzní úloha

Velice zajímavou úlohou je hledání Lagrangeovy funkce pro daný problém. Pokud nevíme vůbec nic, snažíme se Lagrangeovu funkci odhadnout jako nějakou kombinaci skalárů v teorii. Pokud dostaneme jako výsledek pohybové rovnice, které souhlasí s experimentem, bylo naše úsilí korunováno úspěchem. K dané úloze existuje nekonečné množství Lagrangových funkcí, které se mohou lišit o úplnou časovou derivaci libovolné funkce. Jinými slovy, pokud k nalezené Lagrangeově funkci přičteme (nebo od ní odečteme) df/dt, kde $f = f(t, q, \mathrm{d}q/\mathrm{d}t)$, dostaneme stejné Lagrangeovy rovnice. Toho se využívá k následné úpravě nalezené Lagrangeovy funkce do co možná nejjednoduššího tvaru.

Mnohdy ale nehledáme Lagrangeovu funkci na „zelené louce“. Pokud známe pohybové rovnice, pokoušíme se k nim najít vhodnou Lagrangeovu funkci. Označme levé strany pohybových rovnic ε_k:

$$\varepsilon_k \equiv \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial L}{\partial q_k} = 0 \tag{1.137}$$

Inverzní úlohou rozumíme nalezení Lagrangeovy funkce ze známých diferenciálních rovnic ve tvaru $\varepsilon_k = 0$. Tato úloha nemusí mít vždy řešení, tedy k některým soustavám rovnic Lagrangeova funkce neexistuje a variační formulace není možná. Italský teoretický fyzik Enzo Tonti v roce 1969 odvodil postačující podmínky pro existenci Lagrangeovy funkce [7]. Pokud levé strany diferenciálních rovnic splňují podmínky

$$\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial \ddot{q}_l} - \frac{\partial \varepsilon_l}{\partial \ddot{q}_k} = 0\,;$$

$$\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial \dot{q}_l} + \frac{\partial \varepsilon_l}{\partial \dot{q}_k} = 2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial \varepsilon_l}{\partial \ddot{q}_k}\,; \tag{1.138}$$

$$\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial q_l} - \frac{\partial \varepsilon_l}{\partial q_k} = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\frac{\partial \varepsilon_l}{\partial \dot{q}_k}\right] + \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\left[\frac{\partial \varepsilon_l}{\partial \ddot{q}_k}\right]$$

pro každé k, l, potom jsou rovnice $\varepsilon_k = 0$ variační, tj. existuje Lagrangeova funkce L a platí

$$L = -q_k \int_0^1 \varepsilon_k(t, \tau q, \tau \dot{q}, \tau \ddot{q})\,\mathrm{d}\tau\,. \tag{1.139}$$

Ve vztahu (1.139) platí sumační konvence. Znaménko minus je zde jen proto, aby pohybové rovnice vyšly ve tvaru (1.137). Při opačném znaménku bychom získali rovnice $-\varepsilon_k = 0$. Nejsou-li splněny Tontiho podmínky variačnosti (1.138), je možné hledat funkce f_k tak, aby byly existovala Lagrangeova funkce k rovnicím

$$\tilde{\varepsilon}_k \equiv f_k \varepsilon_k = 0\,. \tag{1.140}$$

V tomto vztahu se přes k nesčítá, tj. každou z rovnic odděleně vynásobíme nějakou funkcí f_k. V případě, že nevariačnost rovnic způsobují členy lineární v zobecněných rychlostech dq_k/dt, rozdělíme rovnice na dvě části tak, aby

$$\varepsilon_k = \varepsilon_0\, q_k + \alpha_{kl}\dot{q}_l\,; \qquad \alpha_{kl} = \alpha_{lk}\,. \tag{1.141}$$

V systému probíhající disipační procesy lze popsat Rayleighovou funkcí

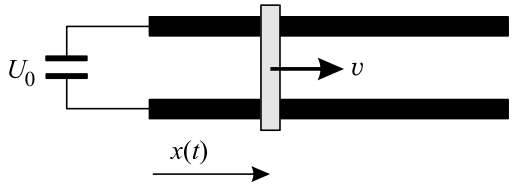
$$R = \frac{1}{2}\alpha_{kl}\dot{q}_k\dot{q}_l\,. \tag{1.142}$$

Inverzní variační problém lze řešit tak, že najdeme Lagrangeovu funkci k rovnicím $\varepsilon_{0k} = 0$ a systém pak splňuje Lagrangeovy rovnice ve tvaru (1.130) s Rayleighovou disipační funkcí

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial L}{\partial q_k} = -\frac{\partial R}{\partial \dot{q}_k}\,. \tag{1.143}$$

◖ Příklad 20: pohyb příčky

Na dvě vodorovné elektrody je napříč položena kovová příčka o hmotnosti m. Na počátek elektrod přivedeme napětí U_0 z kondenzátorové baterie. Příčkou začne téct elektrický proud a tím vznikne magnetické pole, které začne příčku posouvat. Za zobecněné proměnné zvolíme polohu příčky $x(t)$ a náboj proteklý od počátku obvodem $Q(t)$.



Obr. 24: Pohyb příčky.

Předpokládejme, že (například z experimentu) známe rovnice popisující problém:

$$m\ddot{x} = \frac{1}{2}\mathscr{L}_1\dot{Q}^2 - \beta\dot{x}\,; \tag{1.144}$$

$$(\mathscr{L}_0 + \mathscr{L}_1 x)\ddot{Q} + \mathscr{R}\dot{Q} + \frac{Q}{\mathscr{C}} + \mathscr{L}_1\dot{x}\dot{Q} = U_0\,. \tag{1.145}$$

Z elektrického hlediska jde o obvod s kapacitou kondenzátorové baterie $\mathscr{C}$, odporem $\mathscr{R}$ a proměnnou indukčností $\mathscr{L} = \mathscr{L}_0 + \mathscr{L}_1 x$. Poslední člen na levé straně rovnice (1.145) popisuje vzájemnou vazbu mezi mechanickou a elektrickou částí. Z mechanického hlediska je příčka urychlována silou $\mathscr{L}_1(\mathrm{d}Q/\mathrm{d}t)^2/2$ a brzděna třecí silou $-\beta\,\mathrm{d}x/\mathrm{d}t$. Označme

$$\varepsilon_x \equiv m\ddot{x} - \frac{1}{2}\mathscr{L}_1\dot{Q}^2 + \beta\dot{x}\,; \tag{1.146}$$

$$\varepsilon_Q \equiv (\mathscr{L}_0 + \mathscr{L}_1 x)\ddot{Q} + \mathscr{R}\dot{Q} + \frac{Q}{\mathscr{C}} + \mathscr{L}_1\dot{x}\dot{Q} - U_0\,. \tag{1.147}$$

Tontiho variační podmínky jsou splněny jen, pokud je $\beta = 0$ a $\mathscr{R} = 0$. To je celkem přirozené, neboť jde o koeficienty disipativních členů (odpor obvodu a tření příčky). Zavedeme proto Rayleighovu disipační funkci

$$R \equiv \frac{1}{2}\mathscr{R}\dot{Q}^2 \;+\; \frac{1}{2}\beta\dot{x}^2 \tag{1.148}$$

a Lagrangeovu funkci budeme hledat jen pro levé strany rovnic bez disipativních členů

$$\varepsilon_{0x} \equiv m\ddot{x} - \frac{1}{2}\mathscr{L}_1\dot{Q}^2\,; \tag{1.149}$$

$$\varepsilon_{0Q} \equiv (\mathscr{L}_0 + \mathscr{L}_1 x)\ddot{Q} + \frac{Q}{\mathscr{C}} + \mathscr{L}_1\dot{x}\dot{Q} - U_0\,. \tag{1.150}$$

Tyto rovnice již splňují Tontiho podmínky a Lagrangeovu funkci vypočteme ze vztahu

$$L = -x\int_0^1 \varepsilon_{0x}(\tau x, \tau Q, \tau\dot{x}, \tau\dot{Q}, \tau\ddot{x}, \tau\ddot{Q})\,\mathrm{d}\tau - Q\int_0^1 \varepsilon_{0Q}(\tau x, \tau Q, \tau\dot{x}, \tau\dot{Q}, \tau\ddot{x}, \tau\ddot{Q})\,\mathrm{d}\tau\,. \quad (1.151)$$

Po dosazení a jednoduché integraci máme Lagrangeovu funkci

$$L = -x\left(\frac{m_0\ddot{x}}{2} - \frac{\mathscr{L}_1\dot{Q}^2}{6}\right) - Q\left(\frac{\mathscr{L}_0\ddot{Q}}{2} + \frac{\mathscr{L}_1 x\ddot{Q}}{3} + \frac{\mathscr{L}_1\dot{x}\dot{Q}}{3} + \frac{Q}{2\mathscr{C}} - U_0\right). \quad (1.152)$$

Lagrangeova funkce (1.152) spolu s Rayleighovou funkcí (1.148) dá sice správné výchozí rovnice, ale Lagrangeova funkce je značně nepřehledná. Využijeme toho, že se rovnice nezmění, pokud k Lagrangeově funkci přičteme (nebo od ní odečteme) úplnou derivaci jakékoli funkce podle času. Členy s druhými derivacemi upravíme takto:

$$x\ddot{x} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(x\dot{x}) - \dot{x}^2\,;$$

$$Q\ddot{Q} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(Q\dot{Q}) - \dot{Q}^2\,;$$

$$Qx\ddot{Q} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(Qx\dot{Q}) - \dot{Q}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(Qx)\,.$$

Tato vyjádření dosadíme do Lagrangeovy funkce a vynecháme úplné derivace, které pohybové rovnice neovlivní. Výsledek je nyní mnohem přehlednější:

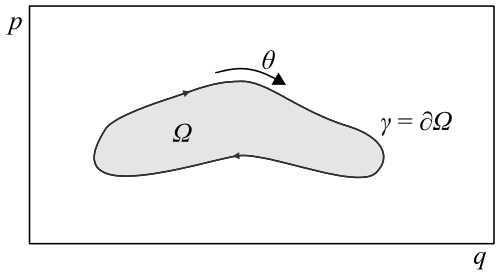
$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + \frac{1}{2}(\mathscr{L}_0 + \mathscr{L}_1 x)\dot{Q}^2 - \frac{Q^2}{2\mathscr{C}} + QU_0\,. \quad (1.153)$$

Interpretace této Lagrangeovy funkce je zřejmá. První člen je kinetická energie částice, druhý je energie na indukčnosti, třetí je energie související s kapacitou soustavy (má význam potenciální energie, proto má znaménko minus) a poslední člen souvisí s definicí proměnné Q (celkový náboj proteklý od počátku obvodem). Pokud bychom za zobecněnou proměnnou volili náboj na kondenzátorové baterii, byl by tento člen nulový. Lagrangeova funkce (1.153) spolu s Rayleighovou funkcí (1.148) jsou přirozeným řešením naší úlohy. Podrobnější řešení pro případ, kdy příčku tvoří plasma v kolejnicovém urychlovači, nalezne čtenář v [12].

1.4.7 Adiabatické invarianty

Přesný periodický pohyb

Představme si systém, který se periodicky pohybuje. Příkladem může být kyvadlo, Země obíhající kolem Slunce nebo elektron odrážející se mezi magnetickými zrcadly. Ve fázovém prostoru (na osách jsou zobecněné souřadnice a hybnosti) tvoří takový pohyb uzavřenou křivku, po které se systém pohybuje znova a znova. Předpokládejme, že je pohyb periodický v určité zobecněné proměnné q, které přísluší kanonicky sdružená zobecněná hybnost p.



Obr. 25: Periodický pohyb ve fázovém prostoru

Fázová trajektorie uzavírá v rovině (q, p) oblast Ω, jejíž je hranicí. Hranici oblasti zapisujeme v matematice symbolicky takto: $\gamma = \partial\Omega$ (čteme „křivka γ je hranicí množiny Ω“). Plochu uzavřenou fázovou trajektorií označíme J, její číselnou hodnotu lze snadno určit jako integrál

► $$J = \oint_{\gamma} p \,\mathrm{d}q \,. \tag{1.154}$$

Pokud by měla fázová trajektorie opačný směr než na obrázku, dostali bychom plochu uzavřenou fázovou trajektorií se záporným znaménkem. Při periodickém pohybu se velikost této plochy nemění. Stejně tak se zachovává energie

$$H = p\,\dot{q} - L \,. \tag{1.155}$$

Lagrangeovu funkci můžeme vyjádřit jako

$$L = p\,\dot{q} \,. \tag{1.156}$$

Ve výrazu jsme vynechali konstantu pohybu H, která nezmění pohybové rovnice. Integrál akce počítaný přes periodu je

$$\begin{aligned} S &= \int_{t}^{t+T} L \,\mathrm{d}t \;=\; \int_{t}^{t+T} p\dot{q} \,\mathrm{d}t = \\ &= \int_{t}^{t+T} p \frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}t} \mathrm{d}t \;=\; \oint_{\gamma} p \,\mathrm{d}q = J \end{aligned} \,. \tag{1.157}$$

Plochu J uzavřenou fázovou trajektorií tak můžeme chápat jako akci systému počítanou přes jednu periodu. Veličiny J a H se při periodickém pohybu nemění. Pokud budeme sledovat systém s vyšší energií (více rozkývané kyvadlo), zvětší se J i H. Obě veličiny jsou závislé,

$$J = J(H); \qquad H = H(J). \tag{1.158}$$

Již jsme nalezli dva významy veličiny J: plocha uzavřená fázovou trajektorií a integrál akce přes periodu. Veličinu J má ale další důležitý význam. Můžeme ji chápat jako nějakou zobecněnou hybnost soustavy. Jí odpovídající kanonicky sdruženou souřadnici označíme θ. Nová souřadnice θ musí splňovat Hamiltonovu rovnici

$$\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H}{\partial J}. \tag{1.159}$$

Vzhledem k tomu, že $\partial H/\partial J$ je pro systém s danou energií konstanta (lze ukázat, že je rovna převrácené hodnotě periody pohybu), roste nová zobecněná proměnná θ lineárně s časem. Může tak symbolizovat například narůstající úhel při oběhu systému po fázové trajektorii. Touto proměnnou můžeme snadno parametrizovat fázovou trajektorii (hranici množiny Ω). Pro časové derivace libovolné veličiny na hranici $\gamma = \partial\Omega$ proto můžeme psát (θ je jediným parametrem, který jednoznačné určuje polohu na hranici)

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial f}{\partial \theta}\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial f}{\partial \theta}\frac{\partial H}{\partial J}. \tag{1.160}$$

Vidíme, že nové kanonicky sdružené proměnné J a θ jsou nesmírně užitečné. Hybnost J je integrálem pohybu, který vypovídá o velikosti plochy uzavřené fázovou trajektorií, a souřadnice θ umožňuje jednoznačně parametrizovat hranici této plochy (fázovou trajektorii) a převést úplné časové derivace na hranici na parciální.

Adiabatické přiblížení

Předpokládejme nyní, že se při periodickém pohybu pomalu mění nějaký parametr λ. Může jít o délku závěsu u kyvadla nebo o magnetické pole u elektronu, který obíhá po kružnici kolem magnetických indukčních čar. Za jednu periodu je změna zanedbatelná, tj. platí vztah

► $$\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}t} \ll \frac{\lambda}{T}; \tag{1.161}$$

za mnoho period ale může být změna podmínek podstatná. Takovým změnám říkáme *adiabatické změny*. Energie se v tomto případě nezachovává. Změna energie je úměrná změně parametru λ. Obě měnící se veličiny lze zkombinovat do nové proměnné, která zůstává i při adiabatických změnách konstantní, tj. existuje veličina $A(H, \lambda)$, že platí

$$A(H, \lambda) = \text{const}. \tag{1.162}$$

Takovou veličinu nazýváme *adiabatický invariant*. Dokažme nyní, že adiabatickým invariantem je plocha fázové trajektorie, tj. zobecněná hybnost J daná vztahem (1.154). Tato veličina se při adiabatických změnách na rozdíl od energie zachovává. Nalezněme proto časovou změnu J, při které využijeme parametrizaci křivky kanonicky sdruženou proměnnou θ k zobecněné hybnosti J:

$$\frac{\mathrm{d}J}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\oint_{\gamma} p\mathrm{d}q = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_0^{2\pi} p\frac{\partial q}{\partial\theta}\mathrm{d}\theta =$$

$$= \int_0^{2\pi}\left(\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t}\frac{\partial q}{\partial\theta} + p\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial q}{\partial\theta}\right)\mathrm{d}\theta\,.$$

Časové derivace na hranici oblasti nahradíme podle vztahu (1.160), tj.

$$\frac{\mathrm{d}J}{\mathrm{d}t} = \int_0^{2\pi}\frac{\partial H}{\partial J}\left(\frac{\partial p}{\partial\theta}\frac{\partial q}{\partial\theta} + p\frac{\partial}{\partial\theta}\frac{\partial q}{\partial\theta}\right)\mathrm{d}\theta\,.$$

V druhém členu provedeme integraci per partes

$$\frac{\mathrm{d}J}{\mathrm{d}t} = \int_0^{2\pi}\frac{\partial H}{\partial J}\left(\frac{\partial p}{\partial\theta}\frac{\partial q}{\partial\theta} - \frac{\partial p}{\partial\theta}\frac{\partial q}{\partial\theta}\right)\mathrm{d}\theta \;+\left[p\frac{\partial q}{\partial\theta}\right]_0^{2\pi} \;=\; 0\,.$$

První člen za rovnítkem je zjevně nulový, druhý člen můžeme považovat za nulový, pokud platí adiabatické přiblížení. Nalezli jsme tedy adiabatický invariant, pro který při adiabatickém přiblížení platí

► $$J = \oint p\mathrm{d}q = \mathrm{const}\,. \tag{1.163}$$

◖ Příklad 21: harmonický oscilátor

Předpokládejme, že se z nějakého důvodu adiabaticky pomalu mění frekvence harmonického oscilátoru (například měníme délku závěsu matematického kyvadla nebo tuhost pružiny, na které se kýve těleso). Fázová trajektorie oscilátoru je elipsa s rovnicí

$$\frac{1}{2}m\omega^2x^2 + \frac{p^2}{2m} = E\,. \tag{1.164}$$

Poloosy naší elipsy odečteme z úsekového tvaru

$$\left(\frac{x}{a}\right)^2 + \left(\frac{p}{b}\right)^2 = 1\,; \qquad a = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}\,; \qquad b = \sqrt{2mE}\,. \tag{1.165}$$

Nyní již snadno určíme náš adiabatický invariant jako plochu elipsy o poloosách a a b:

$$J = \oint p\mathrm{d}x = \pi ab = \frac{2\pi E}{\omega} = \mathrm{const}\,. \tag{1.166}$$

Energie i frekvence se sice pomalu mění s časem, ale jejich podíl je i po mnoha periodách konstantní. Koncept adiabatického kyvadla navrhnul A. Einstein již v roce 1911. ◗

◖ Příklad 22: proměnné magnetické pole

Předpokládejme, že elektron koná Larmorovu rotaci (viz příklad 16) v pomalu proměnném magnetickém poli. Za souřadnici zvolíme úhel φ, který určuje pozici na Larmorově kružnici. Příslušnou zobecněnou hybností je moment hybnosti obíhajícího elektronu:

$$J = \int_0^{2\pi} p_\varphi \mathrm{d}\varphi = \int_0^{2\pi} m_\mathrm{e} v R_L \mathrm{d}\varphi = 2\pi m_\mathrm{e} v R_\mathrm{L} .$$

Po dosazení za Larmorův poloměr ze vztahu (1.63) máme

$$J = 2\pi \frac{m_\mathrm{e}^2 v^2}{QB} \approx \frac{v^2}{B} .$$

Při pohybu se pomalu mění magnetické pole. S tím se mění rychlost obíhající částice tak, že podíl v^2/B je konstantní. Jde o tzv. první adiabatický invariant v magnetickém poli. Zpravidla se za něho volí kombinace s poněkud odlišnými konstantami (na těch ale nezáleží)

$$J_1 = \frac{m_\mathrm{e} v^2}{2B} = \mathrm{const} . \tag{1.167}$$

Podrobněji se o adiabatických invariantech pro nabitou částici pohybující se v magnetickém poli dozvíte v [1]. Obecnější pohled poskytuje literatura [10].

◗

1.4.8 Kanonické transformace

Ne vždy se nám podaří zvolit napoprvé optimální zobecněné souřadnice, ve kterých bude řešení co možná nejjednodušší. Od nějaké množiny zobecněných souřadnic a hybností (q, p) můžeme vždy přejít k jiné soustavě nových souřadnic a hybností (Q, P). Pokud požadujeme, aby i nové proměnné byly navzájem kanonicky sdružené, tj. platilo

$$\begin{aligned} \{p_k, q_l\} &= \delta_{kl} \ ; \\ \{P_k, Q_l\} &= \delta_{kl} \ , \end{aligned} \tag{1.168}$$

hovoříme o tzv. *kanonické transformaci*. Chceme-li automaticky zajistit, aby nová sada proměnných (Q, P) byla kanonická, můžeme použít k jejímu generování jednoduchý mechanizmus *vytvořující funkce*, který si nyní popíšeme. Předpokládejme, že chceme přejít od

$$\begin{aligned} q_1, q_2, \ldots, q_f, p_1, p_2, \ldots, p_f \quad &\rightarrow \quad Q_1, Q_2, \ldots, Q_f, P_1, P_2, \ldots, P_f , \\ H(t, q, p) \quad &\rightarrow \quad \bar{H}(t, Q, P) , \end{aligned} \tag{1.169}$$

kde jsme označili $\bar{H}$ Hamiltonovu funkci v nových proměnných. Samozřejmě chceme, aby pro nové i staré souřadnice platily Hamiltonovy rovnice, tj. platil Hamiltonův princip, ze kterého byly odvozeny:

$$\delta \int_{t_A}^{t_B} L \mathrm{d}t = \delta \int_{t_A}^{t_B} (p_k \dot{q}_k - H) \, \mathrm{d}t = 0 ; \qquad \wedge \qquad \delta \int_{t_A}^{t_B} L \mathrm{d}t = \delta \int_{t_A}^{t_B} (P_k \dot{Q}_k - \bar{H}) \, \mathrm{d}t = 0 .$$

Mají-li obě rovnice platit současně, mohou se integrandy lišit o úplnou derivaci libovolné funkce starých a nových proměnných $\mathcal{V}(t, q, Q)$:

$$p_k \dot{q}_k - H = P_k \dot{Q}_k - \bar{H} + \frac{\mathrm{d}\mathscr{V}}{\mathrm{d}t}\,; \qquad \mathscr{V} = \mathscr{V}(t, q, Q)\,. \tag{1.170}$$

Je to proto, že variace starých i nových souřadnic jsou na koncích trajektorie nulové:

$$\delta \int_{t_A}^{t_B} \frac{\mathrm{d}\mathscr{V}}{\mathrm{d}t}\,\mathrm{d}t = \left[\delta \mathscr{V}\right]_{t_A}^{t_B} = \left[\frac{\partial \mathscr{V}}{\partial q_k}\delta q_k + \frac{\partial \mathscr{V}}{\partial Q_k}\delta Q_k\right]_{t_A}^{t_B} = 0\,.$$

Proveďme nyní derivaci funkce $\mathscr{V}(t\,, q, Q)$ ve vztahu (1.170)

$$p_k \dot{q}_k - H = P_k \dot{Q}_k - \bar{H} + \frac{\partial \mathscr{V}}{\partial t} + \frac{\partial \mathscr{V}}{\partial q_k}\dot{q}_k + \frac{\partial \mathscr{V}}{\partial Q_k}\dot{Q}_k \qquad \Rightarrow$$

$$\left(p_k - \frac{\partial \mathscr{V}}{\partial q_k}\right)\dot{q}_k + \left(\bar{H} - H - \frac{\partial \mathscr{V}}{\partial t}\right) - \left(P_k + \frac{\partial \mathscr{V}}{\partial Q_k}\right)\dot{Q}_k = 0\,.$$

Tuto rovnost splníme jednoduchými požadavky:

► $$p_k = \frac{\partial \mathscr{V}}{\partial q_k}\,; \qquad P_k = -\frac{\partial \mathscr{V}}{\partial Q_k}\,; \qquad \bar{H} = H + \frac{\partial \mathscr{V}}{\partial t}\,. \tag{1.171}$$

Funkci $\mathscr{V}$ nazýváme *vytvořující funkce*. Jde o libovolnou funkci času, starých proměnných q a nových proměnných Q, tj. $\mathscr{V}(t\,, q, Q)$. Pokud budou platit relace (1.171), tj. spočítáme podle tohoto předpisu nové hybnosti, budou v nových proměnných platit Hamiltonovy rovnice a navíc budou takto vytvořené nové proměnné kanonicky sdružené, tj. $\{Q_k, P_l\} = \delta_{kl}$.

Hamiltonova-Jacobiho rovnice

Pomocí vytvořující funkce si můžeme vymýšlet nejrůznější transformace k novým proměnným. Vytvořující funkce je totiž libovolnou funkcí starých a nových souřadnic. V principu by mohla být i funkcí starých souřadnic a nových hybností, starých hybností a nových souřadnic nebo starých hybností a nových hybností. Rozdíly mezi souřadnicemi a hybnostmi se v Hamiltonově teorii stírají. Transformační vztahy (1.171) by byly jen nepatrně odlišné.

Samozřejmě se nabízí otázka, jak volit vytvořující funkci tak, aby řešení v nových proměnných bylo co nejjednodušší. Můžeme dokonce požadovat, aby řešení v nových souřadnicích i hybnostech bylo konstantní, tj. Hamiltonovy rovnice měly nulovou pravou stranu:

$$Q_k = \mathrm{const} \qquad \Rightarrow \qquad \dot{Q}_k = +\frac{\partial \bar{H}}{\partial P_k} = 0\,;$$
$$P_k = \mathrm{const} \qquad \Rightarrow \qquad \dot{P}_k = -\frac{\partial \bar{H}}{\partial Q_k} = 0\,. \tag{1.172}$$

V tomto případě budou nové zobecněné souřadnice a hybnosti cyklické, tj. nebudou se vyskytovat v Hamiltonově funkci. Můžeme požadovat, aby Hamiltonova funkce v nových proměnných byla přímo nulová. Vytvořující funkci, která vede na konstantní

zobecněné souřadnice a hybnosti, označujeme S a nazýváme ji *hlavní (principiální) Hamiltonova funkce*. Transformační rovnice (1.171) nyní budou:

$$p_k = \frac{\partial S}{\partial q_k};$$

$$P_k = -\frac{\partial S}{\partial Q_k}; \tag{1.173}$$

$$0 = H(t, q_k, p_k) + \frac{\partial S}{\partial t}.$$

První rovnici dosadíme do Hamiltonovy funkce ve třetí rovnici. V druhé rovnici využijeme, že nové souřadnice $Q_k = \alpha_k$ a hybnosti $P_k = \beta_k$ jsou konstanty:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H(t, q_k, \frac{\partial S}{\partial q_k}) = 0 \qquad \Rightarrow \qquad S(t, q_k, \alpha_k) \tag{1.174}$$

$$\beta_k = -\frac{\partial S(t, q_k, \alpha_k)}{\partial \alpha_k} \qquad \Rightarrow \qquad q_k = q_k(t, \alpha_k, \beta_k); \tag{1.175}$$

Rovnice (1.174) se nazývá Hamiltonova-Jacobiho rovnice [11]. Vytvořující funkce S, která vede na konstantní zobecněné souřadnice a hybnosti má význam integrálu akce:

$$S = S(t, q_k, \alpha_k) \quad \Rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial S}{\partial q_k}\dot{q}_k = -H + p_k\dot{q}_k = L \quad \Rightarrow \quad S = \int L\,\mathrm{d}t\,.$$

Postup řešení je následující:

1) V nějakých zobecněných souřadnicích a hybnostech zkonstruujeme Hamiltonovu funkci (tj. energii vyjádřenou za pomoci zobecněných souřadnic a hybností).
2) V této Hamiltonově funkci nahradíme všechny výskyty hybností p_k výrazem $\partial S/\partial q_k$ a sestavíme Hamiltonovu-Jacobiho rovnici (1.174) pro vytvořující funkci S.
3) Řešíme Hamiltonovu-Jacobiho rovnici. Řešením je vytvořující funkce $S(t, q_k, \alpha_k)$, ve které jsou α_k integrační konstanty. Tyto konstanty mají význam nových zobecněných souřadnic.
4) Víme, že transformace (1.175) daná vytvořující funkcí S vede na nové hybnosti, které jsou také konstantní, proto je označíme β_k. Tyto transformační vztahy obsahují nové zobecněné souřadnice α_k (konstanty), nové zobecněné hybnosti β_k (konstanty) a čas. Proto z nich můžeme vyjádřit původní souřadnice q_k jako funkce času a nalezených konstant. Tím jsme se vrátili k řešení problému v původních souřadnicích.

Hamiltonova-Jacobiho rovnice má úzký vztah ke Schrödingerově rovnici v kvantové teorii. V kvantové teorii nahrazujeme hybnost operátorem podle předpisu $p_k \to -\mathrm{i}\hbar\partial/\partial q_k$, zde provádíme analogickou záměnu $p_k \to \partial S/\partial q_k$.

Příklad 23: volný pád

Řešit volný pád z výšky h za pomoci Hamiltonovy-Jacobiho rovnice je podobně šílené, jako lovit vrabce za pomoci dělostřeleckého kanónu. Nicméně jako cvičení, při kterém se seznámíte s s Hamiltonovou-Jacobiho rovnicí, je tento postup užitečný. Předpokládejme, že osa y míří vzhůru. Lagrangeova funkce a Hamiltonova funkce budou mít tvar (krok 1)

$$L = \frac{1}{2}mv^2 - mgy\,; \qquad H = \frac{p^2}{2m} + mgy\,. \tag{1.176}$$

Nyní sestavíme Hamiltonovu-Jacobiho rovnici (krok 2):

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2 + mgy = 0\,. \tag{1.177}$$

Jde o parciální diferenciální rovnici, kterou budeme řešit separací: $S(t, y) = S_1(t) + S_2(y)$. Vzhledem k tomu, že čas je jen v prvním členu, musí být $S_1(t)$ lineární v čase, tj. například $S_1 = -\alpha t$. Po dosazení do Hamiltonovy-Jacobiho rovnice dostaneme

$$-\alpha + \frac{1}{2m}\left(\frac{\mathrm{d}S_2}{\mathrm{d}y}\right)^2 + mgy = 0 \qquad \Rightarrow \qquad S_2(y) = \int \sqrt{2m(\alpha - mgy)}\,\mathrm{d}y \qquad \Rightarrow$$

$$S(t, y, \alpha) = -\alpha t + \frac{(2m\alpha - 2m^2 gy)^{3/2}}{3m^2 g}\,. \tag{1.178}$$

Nalezli jsme tedy S, které je funkcí času, staré zobecněné proměnné y a nové zobecněné proměnné $Q = \alpha$, která je konstantní. To je výsledkem třetího kroku. Nyní provedeme poslední krok – transformaci k nové hybnosti $P = \beta$, která je také konstantní:

$$\beta = -\frac{\partial S(t, y, \alpha)}{\partial \alpha} \qquad \Rightarrow \qquad \beta = t + \sqrt{\frac{2\alpha}{mg^2} - \frac{2y}{g}} \qquad \Rightarrow \qquad y = \frac{\alpha}{mg} - \frac{1}{2}g(t - \beta)^2\,.$$

Z počátečních podmínek $y(t_0) = h$ a $y'(t_0) = 0$ odvodíme $\alpha/mg = h$, $\beta = t_0$, tedy

$$y = h - \frac{1}{2}g(t - t_0)^2\,. \tag{1.179}$$

1.5 Nelineární dynamické systémy

Hamiltonovy rovnice popisující mechanické systémy vedou na soustavu diferenciálních rovnic prvního řádu pro proměnné $\mathbf{q}, \mathbf{p}$. Označme $\boldsymbol{\xi} = (\mathbf{q}, \mathbf{p})$ množinu hledaných fázových proměnných systému. Diferenciální rovnice vzniklé z Hamiltonových rovnic potom mají tvar:

$$\begin{aligned} \dot{\xi}_1 &= f_1(t, \xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N)\,; \\ \dot{\xi}_2 &= f_2(t, \xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N)\,; \\ &\vdots \\ \dot{\xi}_N &= f_N(t, \xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N)\,, \end{aligned} \tag{1.180}$$

neboli

$$\dot{\xi}_k = f_k(t, \boldsymbol{\xi})\,, \qquad k = 1, \ldots, N\,. \tag{1.181}$$

Počet rovnic N nemusí být nutně sudý (souřadnice a jim odpovídající hybnosti), rovnice pro zachovávající se proměnné ze soustavy vyškrtneme a neřešíme je. Na pravých stranách většinou není explicitně obsažen čas – takové soustavy rovnic se nazývají *autonomní*. V dalším textu se budeme zabývat jen autonomními soustavami rovnic

$$\dot{\xi}_k = f_k(\boldsymbol{\xi})\,, \qquad k = 1, \ldots, N\,. \tag{1.182}$$

Nejjednodušší je případ lineárních rovnic tvaru

$$\begin{aligned} \dot{\xi}_1 &= a_{11}\xi_1 + \cdots, a_{1N}\xi_N\,, \\ &\vdots \\ \dot{\xi}_N &= a_{N1}\xi_1 + \cdots, a_{NN}\xi_N\,. \end{aligned} \tag{1.183}$$

neboli

$$\dot{\boldsymbol{\xi}} = \mathbf{A}\boldsymbol{\xi}\,. \tag{1.184}$$

Řešení lineárních rovnic je jednoduché. Nalezneme vlastní čísla a vektory matice $\mathbf{A}$:

$$\mathbf{A}\boldsymbol{\eta}^{(l)} = \lambda_l \boldsymbol{\eta}^{(l)}\,. \tag{1.185}$$

Úpravou rovnice (1.185) dostaneme $(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{1})\boldsymbol{\eta} = 0$. Tato rovnice bude mít netriviální řešení jen, je-li

$$\det(\mathbf{A} - \lambda\,\mathbf{1}) = 0\,, \tag{1.186}$$

což je rovnice pro vlastní čísla λ. Z tvaru (1.185) potom dopočteme vlastní vektory. Řešením soustavy lineárních diferenciálních rovnic je každý výraz

$$\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\eta}\exp(\lambda t)\,,$$

protože

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\xi}}{\mathrm{d}t} = \lambda\boldsymbol{\eta}\exp(\lambda t) = \mathbf{A}\boldsymbol{\eta}\exp(\lambda t) = \mathbf{A}\boldsymbol{\xi}\,.$$

Obecné řešení je lineární kombinací řešení pro jednotlivá vlastní čísla:

$$\boldsymbol{\xi}(t) = c_1\boldsymbol{\eta}^{(1)}\,\mathrm{e}^{\lambda_1 t} + c_2\boldsymbol{\eta}^{(2)}\,\mathrm{e}^{\lambda_2 t} + \cdots. \tag{1.187}$$

Jde-li o problém kmitů, λ jsou komplexní ($\lambda_k = \delta + \mathrm{i}\,\omega_k$). Jednotlivé členy v součtu (1.187) jsou tzv. vlastní mody kmitů. Počet vlastních frekvencí je menší nebo roven řádu matice $\mathbf{A}$.

Poznámka: Výsledek (1.187) platí jen, jsou-li vlastní čísla matice **A**, určená z rovnice (1.186), navzájem různá. Je-li některé vlastní číslo k-násobným kořenem rovnice (1.186), potom odpovídající koeficient lineární kombinace (1.187) bude polynom stupně $k - 1$.

◖ Příklad 24: harmonický oscilátor

Hamiltonovy rovnice pro harmonický oscilátor mají tvar

$$\dot{x} = \frac{p}{m};$$
$$\dot{p} = -m\omega^2 x\,.$$

Odhlédneme-li od nepodstatných konstant, je třeba řešit soustavu rovnic typu

$$\dot{\xi}_1 = \xi_2 \qquad \Rightarrow \qquad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{pmatrix},$$
$$\dot{\xi}_2 = -\xi_1$$

ve které $\xi_1 = x$, $\xi_2 = p$. Z rovnice pro vlastní čísla (1.186) snadno určíme vlastní čísla $\lambda_{1,2} = \pm\,\mathrm{i}$ a z rovnice pro vlastní vektory (1.185) odpovídající vlastní vektory

$$\boldsymbol{\eta}^{(1)} = c\cdot\begin{pmatrix}1\\ +\mathrm{i}\end{pmatrix};$$
$$\boldsymbol{\eta}^{(2)} = c\cdot\begin{pmatrix}1\\ -\mathrm{i}\end{pmatrix}.$$

Obecné řešení soustavy tedy je

$$\begin{pmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{pmatrix} = c_1\cdot\begin{pmatrix}1\\ \mathrm{i}\end{pmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}t} + c_2\cdot\begin{pmatrix}1\\ -\mathrm{i}\end{pmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t}\,,$$

což pro počáteční podmínky $x(0) = \xi_1(0) = A$; $p(0) = \xi_2(0) = 0$ dá známé řešení

$$x = \xi_1 = A\cos t\,;$$
$$p = \xi_2 = -A\sin t\,.$$

◗

1.5.1 Matice stability a fázový portrét systému

Je-li soustava diferenciálních rovnic nelineární, může být řešení mnohem komplikovanější než výsledek (1.187).

Stacionární body řešení

Jde o takové body fázového prostoru, ze kterých se systém samovolně nevyvíjí. Jsou definovány vztahem $\mathrm{d}\xi_k/\mathrm{d}t = 0$. Nalezneme je tak, že pravé strany soustavy diferenciálních rovnic (1.180) položíme rovny nule:

► $$f_k(\boldsymbol{\xi}) = 0\,; \qquad \text{rovnice pro stacionární body.} \tag{1.188}$$

Poznámka: „Vložíme-li“ systém přesně do stacionárního bodu, (tj. připravíme ho s takovými počátečními podmínkami), zůstane v tomto bodě fázového prostoru jednou provždy.

Stabilita řešení

Budeme zkoumat, zda stacionární body jsou stabilní vzhledem k malým poruchám (perturbacím). Můžeme si představit, že systém vložený do stacionárního bodu nepatrně vychýlíme a zkoumáme, zda se samovolně do stacionárního bodu vrátí (stabilní bod) nebo zda se od něho bude vzdalovat (nestabilní bod). Hledejme tedy řešení soustavy rovnic (1.180) ve tvaru

$$\xi_k = \xi_k^{(\mathrm{S})} + \delta\xi_k\,, \qquad k = 1,\ldots,N\,,$$

kde $\boldsymbol{\xi}^{(\mathrm{S})}$ je stacionární bod splňující $f_k(\boldsymbol{\xi}^{(\mathrm{S})}) = 0$; $\delta\boldsymbol{\xi}$ je malá porucha 1. řádu. Tento tvar dosadíme do výchozí soustavy rovnic:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\xi_k^{(\mathrm{S})} + \delta\xi_k\right) = f_k(\boldsymbol{\xi}^{(\mathrm{S})} + \delta\boldsymbol{\xi})$$

a provedeme Taylorův rozvoj pravé strany do prvního řádu

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\xi_k^{(\mathrm{S})}\right) + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\delta\xi_k\right) = f_k(\boldsymbol{\xi}^{(\mathrm{S})}) + \left.\frac{\partial f_k}{\partial\xi_l}\right|_{\boldsymbol{\xi}^{(S)}} \cdot \delta\xi_l\,.$$

Vzhledem ke stacionaritě $\boldsymbol{\xi}^{(\mathrm{S})}$ se první členy na obou stranách vyruší a můžeme psát

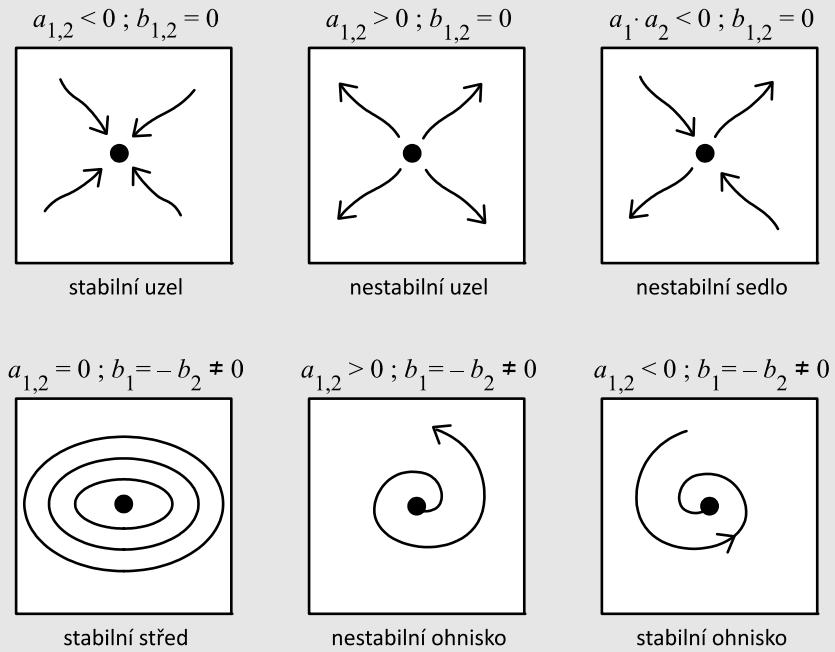
► $$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix}\delta\xi_1\\ \vdots\\ \delta\xi_N\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}a_{11} & \cdots & a_{1N}\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ a_{N1} & \cdots & a_{NN}\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}\delta\xi_1\\ \vdots\\ \delta\xi_N\end{pmatrix}, \tag{1.189}$$

kde jsme označili

►
$$a_{kl} \equiv \left.\frac{\partial f_k}{\partial \xi_l}\right|_{\boldsymbol{\xi}^{(S)}} \tag{1.190}$$

je tzv. *matice stability.* Jde o parciální derivace pravých stran rovnic (1.180) podle jednotlivých proměnných ve zkoumaném stacionárním bodě. Soustava rovnic (1.189) pro malé poruchy $\delta\boldsymbol{\xi}$ je linearizovaná a její řešení umíme najít pomocí vlastních čísel a vlastních směrů matice $\mathbf{A}$. Je-li $\mathrm{Re}(\lambda) < 0$, bude daný mod $\exp(\lambda t)$ utlumen a řešení je stabilní v příslušném vlastním směru. Je-li $\mathrm{Re}(\lambda) > 0$, je mod v daném směru nestabilní. Je-li $\lambda = \pm \mathrm{i}\, b$, malá porucha systém v okolí stacionárního bodu rozkmitá.

Poznámka 1: Pro soustavu dvou diferenciálních rovnic bude matice stability rozměru 2×2 mít dvě vlastní čísla $\lambda_1 = a_1 + \mathrm{i}\, b_1$ a $\lambda_2 = a_2 + \mathrm{i}\, b_2$ a jsou možné následující situace:



Poznámka 2: Ze znalosti stacionárních bodů a vlastních čísel a směrů matice stability jsme zpravidla již schopni odhadnout fázový portrét soustavy. Ukázky jsou v následujících příkladech.

◖ Příklad 25: nelineární oscilátor

Uvažujme soustavu rovnic

$$\dot{\xi}_1 = \xi_2$$
$$\dot{\xi}_2 = -\xi_1 + \varepsilon \xi_1^2 \,.$$

Oproti standardnímu harmonickému oscilátoru je zde navíc nelineární člen s koeficientem ε. Nejprve určíme z nulovosti pravých stran stacionární body A, B:

$$\begin{aligned} \xi_2 &= 0 \\ -\xi_1 + \varepsilon \xi_1^2 &= 0 \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned} A &= [0,0] \\ B &= [1/\varepsilon, 0] \end{aligned}$$

a zakreslíme je do fázového prostoru. Potom nalezneme matici stability (1.190) v obecném tvaru:

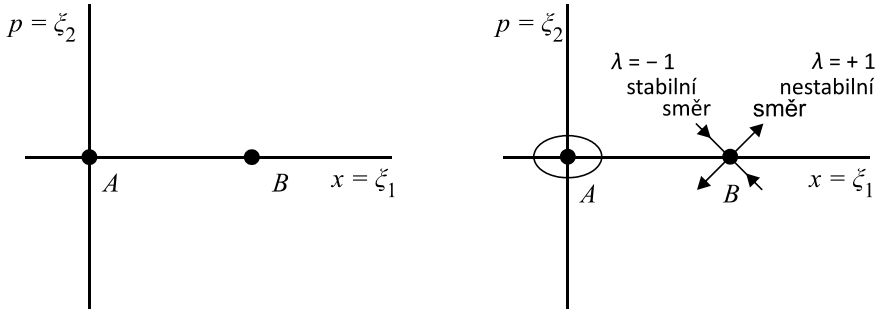
$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial f_1}{\partial \xi_1} & \dfrac{\partial f_1}{\partial \xi_2} \\ \dfrac{\partial f_2}{\partial \xi_1} & \dfrac{\partial f_2}{\partial \xi_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1+2\varepsilon\xi_1 & 0 \end{pmatrix} \,.$$

Tuto matici určíme v stacionárních bodech A a B. Vypočteme vlastní čísla a vlastní vektory z rovnic (1.186) a: (1.185)

$$A: \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & +1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \lambda_{1,2} = \pm \mathrm{i} \quad \Rightarrow \quad \text{porucha } \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i} t}$$

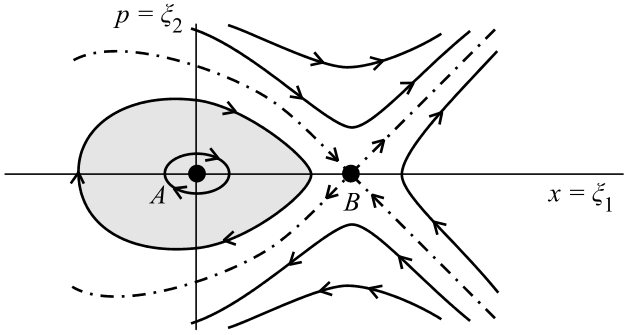
$$B: \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & +1 \\ +1 & 0 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} \lambda_1 = +1\,, \quad \boldsymbol{\eta}_1 = c \begin{pmatrix} +1 \\ +1 \end{pmatrix}, \quad \text{porucha } \mathrm{e}^{+t} \\ \lambda_2 = -1\,, \quad \boldsymbol{\eta}_2 = c \begin{pmatrix} +1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \text{porucha } \mathrm{e}^{-t} \,. \end{cases}$$

Do fázového prostoru zakreslíme nalezené typy stability i odpovídající vlastní směry:



Obr. 27: Postupná tvorba fázového portrétu nelineárního oscilátoru.

Ze stacionárních bodů, typů stability v nich a vlastních směrů lze zpravidla odhadnout celý fázový portrét soustavy:



Obr. 28: Fázový portrét nelineárního oscilátoru.

Příklad 26: částice v periodickém potenciálu

Typickým příkladem pohybu v periodickém potenciálu může být například pohyb nabité částice v krystalové mříži. Předpokládejme, že se částice nachází v poli potenciální energie dané vztahem

$$V(x) = -V_0 \cos\frac{2\pi x}{a}.$$

Minus ve vztahu zajistí, že potenciál má v počátku minimum, toto minus není pro řešení příkladu podstatné. Perioda potenciálu je a a výška V_0. Je zřejmé, že částice s celkovou energií $E < V_0$ může být zachycena v minimech potenciální energie (oscilovat) a částice s energií $E > V_0$ se může volně pohybovat. Příslušné Hamiltonovy rovnice budou:

$$H = \frac{p^2}{2m} - V_0 \cos\frac{2\pi x}{a} \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned} \dot{x} &= \{x, H\} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}; \\ \dot{p} &= \{p, H\} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -\frac{2\pi V_0}{a}\sin\frac{2\pi x}{a}. \end{aligned}$$

Stejně jako v prvním příkladu odhlédneme od nepodstatných konstant (jsou dány volbou jednotek a souřadnic) a budeme řešit soustavu rovnic typu

$$\dot{\xi}_1 = \xi_2,$$
$$\dot{\xi}_2 = -\sin\xi_1.$$

V okolí počátku by po nahrazení funkce „sinus“ argumentem tato rovnice vedla na harmonický oscilátor (v počátku je minimum potenciální energie). Obecně je tato rovnice díky funkci „sinus“ nelineární. Budeme postupovat tak jako v minulém příkladu. Stanovíme stacionární body, najdeme v nich matici stability, určíme vlastní čísla a vlastní vektory a zrekonstruujeme fázový portrét soustavy:

stacionární body:

$$\begin{aligned}\xi_2 &= 0\\ \sin\xi_1 &= 0\end{aligned} \qquad \Rightarrow \qquad A_k = [k\pi, 0]\,; \qquad k = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$$

matice stability:

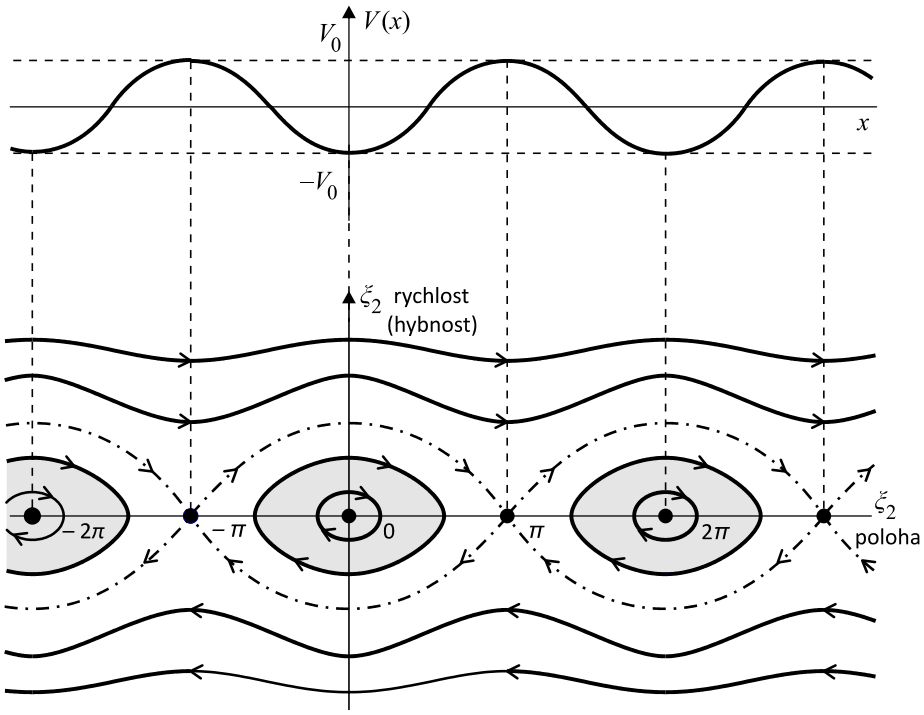
$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial f_1}{\partial \xi_1} & \dfrac{\partial f_1}{\partial \xi_2} \\ \dfrac{\partial f_2}{\partial \xi_1} & \dfrac{\partial f_2}{\partial \xi_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\cos\xi_1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Pro *k* sudé:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \lambda_{1,2} = \pm \mathrm{i} \quad \Rightarrow \quad \text{porucha } \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}t}.$$

Pro *k* liché:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} \lambda_1 = +1\,, \quad \boldsymbol{\eta}_1 = c \begin{pmatrix} +1 \\ +1 \end{pmatrix}, \quad \text{porucha } \mathrm{e}^{+t}\,, \\ \lambda_2 = -1\,, \quad \boldsymbol{\eta}_2 = c \begin{pmatrix} +1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \text{porucha } \mathrm{e}^{-t}\,. \end{cases}$$



Obr. 29: Fázový portrét částice v periodickém potenciálu.

Částice s malou energií oscilují v minimech potenciální energie (jsou zachyceny). Částice s vyššími energiemi se pohybují buď v kladném směru osy x (horní dvě trajektorie) nebo v záporném směru osy x (dolní dvě trajektorie). Čím vyšší je rychlost částice, tím méně je její pohyb ovlivněn periodickým potenciálem. Křivka oddělující trajektorie různého typu (v předchozích příkladech je značena čerchovaně) se nazývá *separatrisa.*

◗

1.5.2 Metoda potenciálu

Problém stability lze řešit i jinak než výpočtem z matice stability. V některých případech můžeme nalézt tzv. potenciál soustavy. Jde o funkci $\phi\,(\xi_1, \ldots\, \xi_N)$ v jejíchž maximech je soustava nestabilní (analogie kuličky na vrcholu kopce) a v minimech je soustava stabilní (analogie kuličky v důlku). Známe-li potenciál $\phi\,(\xi_1, \ldots\, \xi_N)$, můžeme si tuto funkci představit jako výšku terénu ϕ nad prostorem $(\xi_1, \ldots\, \xi_N)$. Kopce, údolí, sedla a ostatní tvary tohoto terénu odpovídají stejným typům stability, jaké by měla kulička vložená na dané místo terénu v gravitačním poli.

V jednodimenzionálním případě máme jedinou diferenciální rovnici

$$\dot{\xi} = f(\xi)\,. \tag{1.191}$$

Postupem z minulé kapitoly bychom nejprve určili stacionární body z rovnice $f(\xi) = 0$, poté jednoprvkovou matici stability $a = \mathrm{d}f/\mathrm{d}\xi$ a její hodnotu v nalezených stacionárních bodech. Pro $a > 0$ je systém nestabilní a pro $a < 0$ je systém stabilní (porucha je dána exponenciální funkcí e^{at}).

Definice potenciálu

Potenciálem rovnice (1.191) nazýváme veličinu

► $$\phi(\xi) \equiv -\int f(\xi)\,\mathrm{d}\xi\,. \tag{1.192}$$

Přímo z definice snadno ukážeme, že platí

ϕ má extrém	$\Rightarrow$	$\mathrm{d}\phi/\mathrm{d}\xi = 0$	$\Rightarrow$	$f(\xi) = 0$	$\Rightarrow$	stacionární bod,
ϕ má maximum	$\Rightarrow$	$\mathrm{d}^2\phi/\mathrm{d}\xi^2 < 0$	$\Rightarrow$	$a = \mathrm{d}f/\mathrm{d}\xi > 0$	$\Rightarrow$	nestabilita,
ϕ má minimum	$\Rightarrow$	$\mathrm{d}^2\phi/\mathrm{d}\xi^2 > 0$	$\Rightarrow$	$a = \mathrm{d}f/\mathrm{d}\xi < 0$	$\Rightarrow$	stabilita.

Ve vícedimenzionálním případě se pro soustavu (1.180) postupuje obdobně. Definujeme diferenciální formu

$$\mathrm{d}\phi \equiv -f_1(\boldsymbol{\xi})\,\mathrm{d}\xi_1 - f_2(\boldsymbol{\xi})\,\mathrm{d}\xi_2 \;-\; \cdots \;- f_N(\boldsymbol{\xi})\,\mathrm{d}\xi_N \tag{1.193}$$

a hledáme potenciál ϕ tak, aby $f_k = -\partial\phi/\partial\xi_k$. Výraz (1.193) je potom úplným diferenciálem funkce ϕ. Není-li diferenciální forma (1.193) integrabilní, lze hledat integrační faktor $\mu(\boldsymbol{\xi})$ tak, aby byla integrabilní forma

$$\mathrm{d}\phi \equiv -f_1\,\mu\,\mathrm{d}\xi_1 - f_2\,\mu\,\mathrm{d}\xi_2 - \;\cdots\; - f_N\mu\,\mathrm{d}\xi_N\,.$$

Pro $N \le 3$ existuje integrační faktor vždy. Z tvaru nalezené funkce ϕ již snadno rozhodneme o stabilitě systému. Následující příklad je pro srovnání vyřešen pomocí matice stability i metodou potenciálu.

◖ Příklad 27: potenciál „dna koňakové lahve“

Zabývejme se nyní vlastnostmi následující diferenciální rovnice s proměnným parametrem ε. Cílem je najít stacionární body a celkové vlastnosti řešení:

$$\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}t} = \varepsilon\xi - \delta\xi^3 ; \qquad \delta > 0 ; \qquad \xi \in R . \tag{1.194}$$

Rozbor za pomoci matice stability provedeme zvlášť pro záporné a zvlášť pro kladné ε:

$\varepsilon < 0$: stacionární bod A: $\xi_S = 0$;

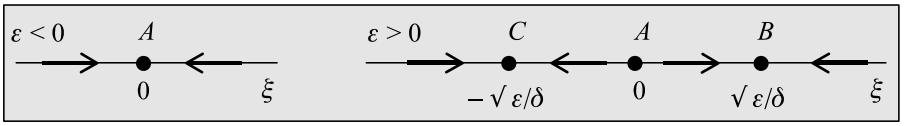
matice stability: $a = \varepsilon - 3\delta\xi_S^2 = \varepsilon < 0 \quad \Rightarrow$

bod A je stabilní.

$\varepsilon > 0$: stacionární body A, B, C: $\xi_S = 0$; $\xi_S = \pm\sqrt{\varepsilon/\delta}$

matice stability:

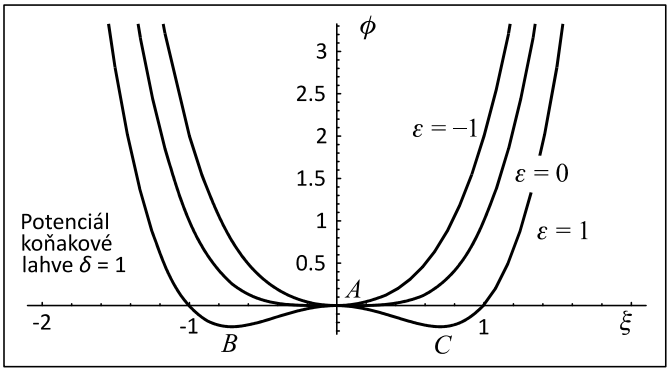
$$a = \varepsilon - 3\delta\xi_S^2 = \begin{cases} \varepsilon & \text{pro bod } A \quad \Rightarrow \quad A \text{ je nestabilní} \\ -2\varepsilon & \text{pro body } B, C \quad \Rightarrow \quad B, C \text{ jsou stabilní} \end{cases}$$



Obr. 30: Stabilita stacionárních bodů.

Řešme nyní stejnou úlohu metodou potenciálu:

$$\phi(\xi) \equiv -\int f(\xi)\,\mathrm{d}\xi = -\varepsilon\frac{\xi^2}{2} + \delta\frac{\xi^4}{4} .$$

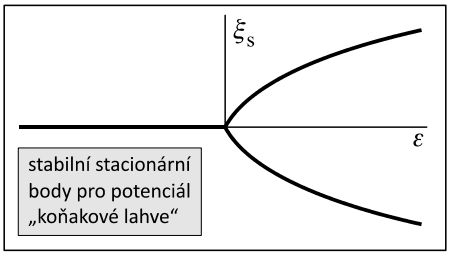


Obr. 31: Potenciál dna koňakové lahve.

Na obrázku je znázorněn průběh potenciálu pro $\delta = 1$ a různé hodnoty parametru ε. Vidíme, že pro $\varepsilon < 0$ má ϕ jediné minimum v počátku, ve kterém je stabilní bod A. Pro $\varepsilon > 0$ se tento bod stává maximem a je nestabilní. Objevují se však dvě minima v bodech $\xi = \pm (\varepsilon/\delta)^{1/2}$, ve kterých je systém stabilní. Vzhledem k charakteristickému tvaru funkce ϕ pro $\varepsilon > 0$ se tato funkce nazývá „potenciál dna koňakové lahve“.

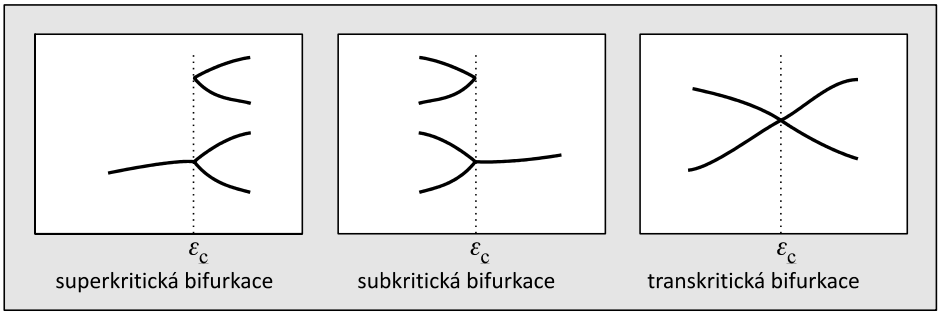
1.5.3 Bifurkace

Bifurkací nazýváme náhlou změnu fázového portrétu soustavy při spojité změně některého řídicího parametru výchozích rovnic. V příkladu 27 z minulé kapitoly vypadá fázový portrét jinak pro $\varepsilon < 0$ a jinak pro $\varepsilon > 0$. Při pomalé změně ε se pomalu mění fázový portrét soustavy. Výjimkou je bod $\varepsilon = 0$. Fázové portréty pro $\varepsilon < 0$ a $\varepsilon > 0$ nejsou topologicky ekvivalentní (nelze je na sebe převést spojitým zobrazením).



Obr. 32: Bifurkace – větvení řešení.

Typickým jevem při bifurkaci je větvení řešení. V příkladu 27 je pro $\varepsilon < 0$ jediný stabilní bod $\xi_S = 0$, pro $\varepsilon > 0$ existují dva stabilní body $\xi_S = \pm (\varepsilon/\delta)^{1/2}$, bod $\xi_S = 0$ se stává nestabilní. Podle typu větvení řešení můžeme bifurkace dělit na superkritické, subkritické a transkritické:



Obr. 33. Různé typy bifurkací.

Fázové přechody druhého druhu – typická bifurkace

Potenciál koňakové lahve se využívá v teorii fázových přechodů druhého druhu. Fázové přechody prvního druhu jsou změny látky, při kterých se skokem mění vnitřní energie, objem, entropie atd. (tání, tuhnutí, var). Fázové přechody druhého druhu jsou změny látky, při kterých se skokem mění až první derivace výše uvedených veličin: měrné

teplo, teplotní roztažnost, modul pružnosti, susceptibilita atd. První ucelenou teorii fázových přechodů druhého druhu navrhnul Lev Davidovič Landau.

Typickým fázovým přechodem druhého druhu je změna chování feromagnetika při Curieově teplotě T_C. Uvažujme pro názornost jen jednu nekonečnou řadu spinů σ_1, σ_2, σ_3,…, které mohou být orientovány jen nahoru nebo dolů (tomu budou odpovídat hodnoty $\sigma_a = \pm 1$) s jednoduchou interakční energií danou vztahem

$$H = -J \sum_{\langle \sigma_a \sigma_b \rangle} \delta_{\sigma_a \sigma_b} \ .$$

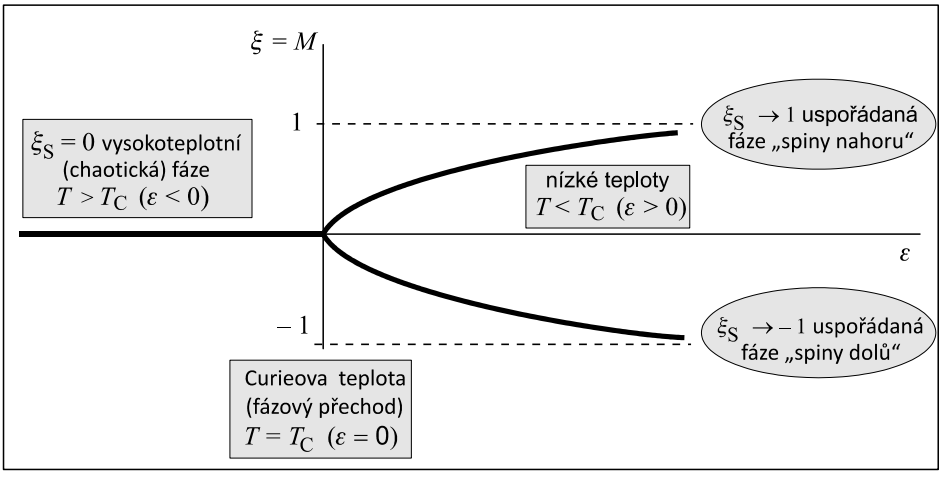
Sumace probíhá přes nejbližší sousedy. Jsou-li tedy dva sousední spiny orientovány souhlasně, přispějí k celkové energii hodnotou $-J$, jsou-li orientovány nesouhlasně, nepřispějí vůbec. Při nízkých teplotách ($T < T_C$) mají spiny snahu zaujmout stav s co možná nejnižší energií, tj. orientují se *převážně* stejným směrem. Jsou tedy možné dvě typické konfigurace:

$$\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow \text{ nebo } \downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow.$$

Zvyšujeme-li teplotu, dojde při $T = T_C$ k fázovému přechodu. Při teplotách $T > T_C$ jsou spiny náhodné $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow$ a feromagnetické vlastnosti se ztrácí. Zavedeme-li *parametr uspořádání* (magnetizaci) jako průměrnou hodnotu spinu

$$M \equiv \frac{1}{N} \sum_a \sigma_a \ ,$$

potom v nízkoteplotní fázi s klesající teplotou $M \to \pm 1$ a ve vysokoteplotní fázi s rostoucí teplotou $M \to 0$. Potenciál „koňakové lahve“ a s ním souvisící rovnice (1.194) velmi dobře popisuje právě takový fázový přechod. Veličina ξ odpovídá parametru uspořádání tj. $\xi = M$ a řídicímu parametru odpovídá veličina $\varepsilon = T_C - T$:



Obr. 34: Fázový přechod ve feromagnetiku.

Poznámka: Podobné typy potenciálů jako potenciál „koňakové lahve“ se uplatňují nejen při popisu fázových přechodů, ale například v inflačním modelu raných vývojových fází vesmíru a při popisu spontánního narušení symetrie v přírodě.

◖ Příklad 28: Hopfova bifurkace

Uvažujme nyní soustavu diferenciálních rovnic, která popisuje pohyb systému v polárních souřadnicích

$$\begin{aligned} &\dot{r} = r(\varepsilon + \delta r^2); \\ &\dot{\varphi} = \omega; \qquad\qquad \delta > 0, \quad r \geq 0, \quad \varphi \in R. \end{aligned} \tag{1.195}$$

Jde o soustavu rovnic pro pohyb systému v polárních souřadnicích. Řešení pro úhel je okamžité: $\varphi(t) = \varphi_0 + \omega t$. V úhlu φ jde tedy o rotační pohyb proti směru chodu hodinových ručiček s úhlovou frekvencí ω. Zbývá jediná rovnice pro nezápornou radiální vzdálenost $r(t)$. Snadno nalezneme řešení stacionárních bodů a stability:

$\varepsilon < 0$: stacionární body A, B: $r_S = 0$; $r_S = \sqrt{|\varepsilon|/\delta}$

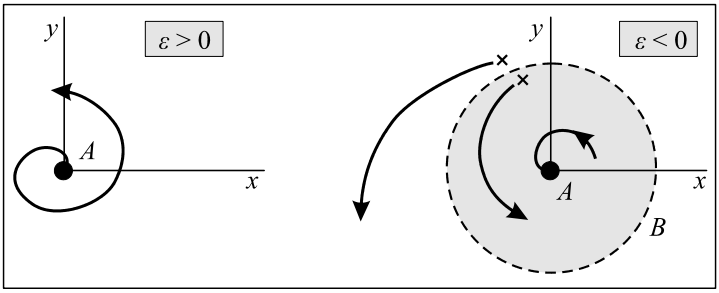
matice stability:

$$a = \varepsilon + 3\delta r_S^2 = \begin{cases} \varepsilon & \text{pro bod } A \quad \Rightarrow \quad A \text{ je stabilní} \\ -2\varepsilon & \text{pro bod } B \quad \Rightarrow \quad B \text{ je nestabilní} \end{cases}$$

$\varepsilon > 0$: stacionární bod A: $r_S = 0$

matice stability:

$$a = \varepsilon + 3\delta r_S^2 = \varepsilon > 0 \qquad \Rightarrow \qquad A \text{ je nestabilní.}$$



Obr. 35: Hopfova bifurkace.

Pro $\varepsilon > 0$ je počátek souřadnic nestabilní ohnisko. Pro $\varepsilon < 0$ je počátek souřadnic stabilní ohnisko a „bod“ B zadaný vztahem $r_S = \sqrt{|\varepsilon|/\delta}$ je nestabilní. Ve skutečnosti tvoří B v kartézské souřadnicové soustavě celou množinu bodů – kružnici. Systémy s počáteční podmínkou $r > r_S$ se budou spirálovitě vzdalovat od středu a systémy s $r < r_S$ se budou spirálovitě přibližovat ke středu. Všechny trajektorie se od množiny B vzdalují. Na obrázku jsou ukázány dvě trajektorie s blízkými počátečními podmínkami, jejichž vzdálenost s rostoucím časem exponenciálně narůstá. Jde o tzv. *Ljapunovu* nestabilitu, kterou se budeme zabývat v příští kapitole.

◗

1.5.4 Ljapunova stabilita, limitní cyklus, atraktor

Zkoumejme, jak se budou vyvíjet dvě trajektorie s blízkými počátečními podmínkami $\boldsymbol{\xi}_0$ a $\boldsymbol{\xi}_0+\boldsymbol{\varepsilon}$ v čase:



Obr. 36: Ljapunova nestabilita (nalevo).

Řekneme, že trajektorie je *ljapunovsky nestabilní*, jestliže existuje trajektorie s blízkou počáteční podmínkou, která se od zkoumané trajektorie bude s časem exponenciálně vzdalovat. Řekneme, že trajektorie je *ljapunovsky stabilní,* jestliže se všechny trajektorie k ní v čase t_0 blízké budou exponenciálně přibližovat. Mění-li se v čase vzdálenost obou trajektorií exponenciálně, platí

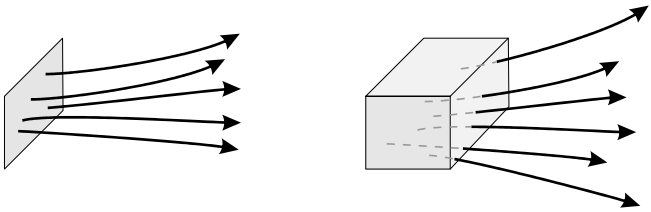
$$||\boldsymbol{\xi}(t,\boldsymbol{\xi}_0+\boldsymbol{\varepsilon})-\boldsymbol{\xi}(t,\boldsymbol{\xi}_0)|| \sim \mathrm{e}^{\lambda t}$$

a snadno určíme

$$\lambda = \lim_{\substack{t\to\infty \\ \boldsymbol{\varepsilon}\to 0}} \frac{1}{t} \ln ||\boldsymbol{\xi}_{\boldsymbol{\varepsilon}} - \boldsymbol{\xi}||.$$

Koeficient λ se nazývá Ljapunovův exponent. Je-li $\lambda > 0$, hovoříme o ljapunovsky nestabilní trajektorii. Je-li $\lambda < 0$, jedná se o ljapunovsky stabilní trajektorii. Je-li $\lambda = 0$, je závislost jiná než exponenciální, například mocninná, a nelze hovořit o Ljapunově stabilitě či nestabilitě.

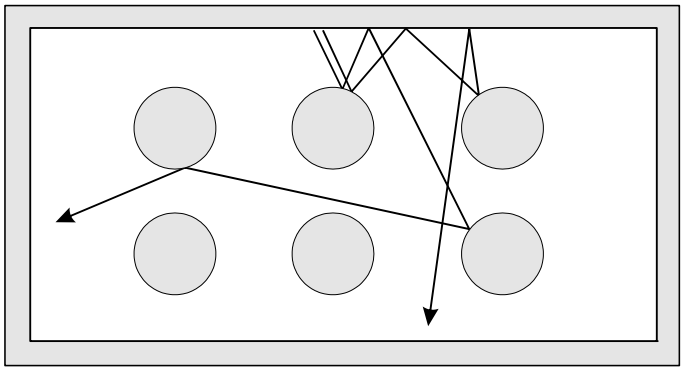
Ve vícedimenzionálních úlohách s $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N)$ závisí Ljapunovův exponent na způsobu provedení limity $\boldsymbol{\varepsilon}\to 0$. Získáme tak N Ljapunových koeficientů 1. řádu (ve směru souřadnicových os). Můžeme ale sledovat i celý svazek blízkých trajektorií ze dvou nebo třídimenzionální oblasti (viz obrázek 37).



Obr. 37: 2D a 3D Ljapunovy exponenty.

Potom hovoříme o vícerozměrných Ljapunových exponentech (2. řádu, 3. řádu, ...). Trajektorie je ljapunovsky stabilní, jsou-li všechny Ljapunovy koeficienty $\lambda \le 0$. Příkladem ljapunovsky nestabilní trajektorie je množina $r_S = \sqrt{(|\varepsilon|/\delta)}$ pro $\varepsilon < 0$ v posledním příkladu na Hopfovu bifurkaci. Trajektorie s $r \ge r_S$ jsou ljapunovsky nestabilní. Trajektorie, pro něž je $r < r_S$, jsou ljapunovsky stabilní. Jiným příkladem Ljapunovy nesta-

bility je kulečník s překážkami podle obrázku 38. Povšimněte si, že dvě blízké trajektorie spolu v pozdějších časech přestávají rychle souviset.



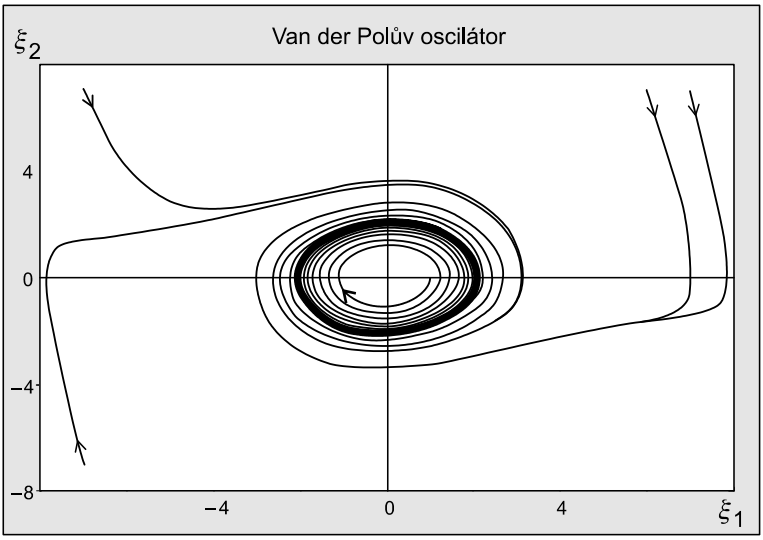
Obr. 38: Kulečník jako ukázka Ljapunovy nestability.

◖ Příklad 29: Van der Polův oscilátor

Systém je popsán diferenciálními rovnicemi, které navrhnul holandský fyzik Balthasar van der Pol (1889–1959) pro popis elektrického obvodu vakuové trubice:

$$\begin{aligned} \dot{\xi}_1 &= \xi_2 \,, \\ \dot{\xi}_2 &= -\xi_1 + \varepsilon(1-\delta\xi_1^2)\xi_2 \,; \qquad \delta > 0 \,. \end{aligned} \tag{1.196}$$

V tomto systému se trajektorie s libovolnou počáteční podmínkou blíží k jediné periodické trajektorii, kterou nazýváme *limitní cyklus*. Za dosti dlouhou dobu se každá trajektorie přiblíží libovolně blízko k trajektorii limitního cyklu. Všechny trajektorie z blízkého okolí limitního cyklu jsou ljapunovsky stabilní. Na obrázku 39 jsou fázové trajektorie pro různé počáteční podmínky van der Polova oscilátoru s $\delta = 1$ a $\varepsilon = 0.1$:



Obr. 39: Van der Polův oscilátor. Limitním cyklem je tlustá uzavřená křivka. ◗

Některé pojmy z teorie množin

Vzdálenost dvou bodů $\rho(\mathbf{A}, \mathbf{B})$:

Definujme vzdálenost dvou bodů co nejjednodušeji, například jako kartézskou vzdálenost danou Pythagorovou větou

► $$\rho(\mathbf{A},\mathbf{B}) \equiv \sqrt{\sum_{k=1}^{N} (A_k - B_k)^2} \ .$$

Pro definici vzdálenosti lze použít i jiný předpis splňující základní požadavky na pojem vzdálenosti. Vzdálenost dvou bodů často píšeme také ve tvaru $||\mathbf{A} - \mathbf{B}||$, kde $||\cdot||$ je

► $$||\mathbf{X}|| \equiv \sqrt{\sum_{k=1}^{N} X_k{}^2} \ .$$

Jde o normu (velikost) rozdílového vektoru **A**–**B**.

Vzdálenost bodu a množiny $\rho(\mathbf{A},\mathcal{M})$:

Vzdálenost bodu od množiny definujeme jako minimum vzdáleností od všech bodů množiny, včetně její hranice $(\bar{\mathcal{M}})$:

► $$\rho(\mathbf{A},\mathcal{M}) \equiv \min_{\mathbf{X}\in\bar{\mathcal{M}}} \rho(\mathbf{A},\mathbf{X}) \, .$$

Okolí bodu $U_\varepsilon(\mathbf{A})$

Za okolí bodu budeme považovat kouli bez hranice se středem v **A** a poloměrem ε:

► $$U_\varepsilon(\mathbf{A}) \equiv \{\mathbf{X};\, \rho(\mathbf{A},\mathbf{X}) < \varepsilon\} \, .$$

Otevřená množina $\mathcal{M}_\mathrm{O}$

Otevřená množina je taková množina, že kolem každého jejího bodu lze zkonstruovat okolí, které je celé v množině $\mathcal{M}_\mathrm{O}$:

► $$\text{ke } \forall\, \mathbf{X} \in \mathcal{M}_\mathrm{O} \ \exists\, U_\varepsilon(\mathbf{X}) \subset \mathcal{M}_\mathrm{O} \ .$$

Zjednodušeně lze říci, že otevřené množiny neobsahují svou hranici.

Uzavřená množina $\mathcal{M}_\mathrm{U}$

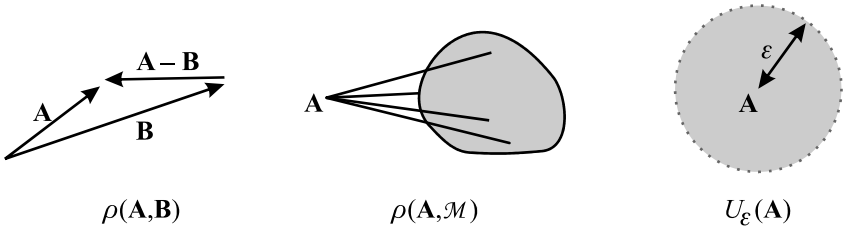
Uzavřená množina je taková množina, ve které konvergentní posloupnost bodů konverguje vždy k nějakému prvku této množiny. Tedy nikdy se nestane, že bychom nalezli posloupnost, která konverguje, ale její limita leží mimo naši množinu. Platí tedy:

► $$\mathbf{X}^{(k)} \in \mathcal{M}_\mathrm{U} \ ; \qquad \mathbf{X}^{(k)} \to \mathbf{X} \qquad \Rightarrow \qquad \mathbf{X} \in \mathcal{M}_\mathrm{U} \ ;$$

Zjednodušeně lze říci, že uzavřené množiny obsahují svou hranici.

Poznámka 1: V našem případě fázového prostoru jsou body **A**, **B**, **X** vždy nějaké N-tice $(\xi_1, \ldots, \xi_N)$.

Poznámka 2: Uzavřený interval a kruh s hranicí jsou uzavřené množiny; otevřený interval a kruh bez hranice jsou otevřené množiny; polouzavřený interval není ani otevřená ani uzavřená množina; prázdná množina a celý prostor R^N jsou ve smyslu předchozích definic otevřené i uzavřené množiny.



Obr. 40: K definici vzdálenosti a okolí.

Pojmy vztahující se k řešení soustavy diferenciálních rovnic

Invariantní množina $\mathcal{J}$

O množině řekneme, že je invariantní, pokud se z libovolného bodu množiny $\mathcal{J}$, chápaného jako počáteční podmínka soustavy diferenciálních rovnic (1.180), vyvine fázová trajektorie, která bude celá ležet v množině $\mathcal{J}$. Jakmile se tedy systém dostane do množiny $\mathcal{J}$, potom v ní bude setrvávat i ve všech pozdějších časech:

► $$\mathcal{J} = \{\mathbf{X};\quad \mathbf{X}_0 = \boldsymbol{\xi}(t_0) \in \mathcal{J} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{X} = \boldsymbol{\xi}(t) \in \mathcal{J} \quad \text{pro } \forall\, t > t_0\}\,.$$

Hustě pokrytá množina $\mathcal{D}$

O množině řekneme, že je hustě pokrytá, pokud libovolně malým okolím každého bodu množiny $\mathcal{D}$ prochází nějaká fázová trajektorie.

Chaotická množina $\mathcal{X}$

1) každá trajektorie v $\mathcal{X}$ je ljapunovsky nestabilní,
2) existuje trajektorie, která $\mathcal{X}$ hustě pokryje,
3) $\mathcal{X}$ je invariantní množina.

Atraktor $\mathcal{A}$

1) trajektorie z okolí $\mathcal{A}$ jsou k $\mathcal{A}$ „přitahovány“, tj. s rostoucím časem se k $\mathcal{A}$ blíží:
$$\exists\, U_{\mathcal{A}} \supset \mathcal{A},\ \text{že pro}\ \forall\, \boldsymbol{\xi}(t_0) \in U_{\mathcal{A}}\ \text{platí}\ \lim_{t\to\infty} \rho(\boldsymbol{\xi}(t), \mathcal{A}) = 0\,,$$
2) existuje trajektorie, která $\mathcal{A}$ hustě pokryje,

3) $\mathcal{A}$ je invariantní množina,

4) $\mathcal{A}$ je uzavřená množina.

Podivný atraktor $\mathcal{S}$

Podivný atraktor je chaotický atraktor, tj. všechny trajektorie podivného atraktoru jsou ljapunovsky nestabilní.

Limitní cyklus C

Limitní cyklus je uzavřená fázová trajektorie, která je atraktorem.

Poznámka 1: Každý stacionární bod je invariantní množinou. Také každá uzavřená trajektorie, například harmonického oscilátoru, je invariantní množinou.

Poznámka 2: Každá uzavřená trajektorie tvoří automaticky invariantní uzavřenou hustě pokrytou množinu. Limitní cyklus navíc „přitahuje“ trajektorie z okolí, tj. má první vlastnost atraktoru.

Poznámka 3: Příkladem chaotické množiny je plocha kulečníku na obrázku 38.

Poznámka 4: Podivný atraktor může vzniknout jen v problému s dimenzí $N \geq 3$.

Poznámka 5: Pokud pro soustavu dvou rovnic nemění výraz $\partial f_1/\xi_1 + \partial f_2/\xi_2$ v jednoduše souvislé oblasti znaménko, potom v této oblasti neexistuje uzavřená trajektorie. Uvedené kritérium se nazývá Benoixonovo kriterium.

◖ Příklad 30: bruselátor (2D)

Budeme zkoumat chemickou reakci typu

$$\begin{aligned} A &\xrightarrow{k_1} X \\ B + X &\xrightarrow{k_2} Y + D \\ 2X + Y &\xrightarrow{k_3} 3X \\ X &\xrightarrow{k_4} E \end{aligned}$$

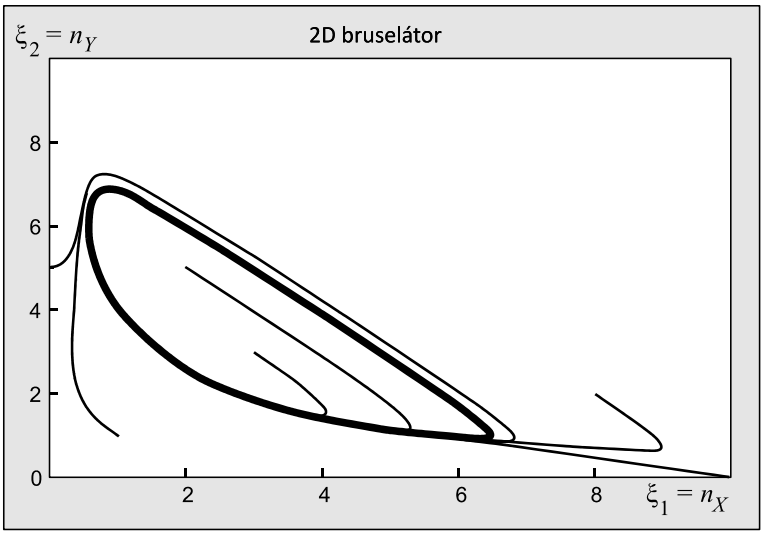
Rychlosti jednotlivých reakcí jsou označeny $k_1, \ldots, k_4$. Koncentrace výchozích látek a produktů označíme n_A, n_B, n_D, n_E . Proměnnými budou koncentrace látek X a Y: $\xi_1 = n_X$, $\xi_2 = n_Y$. Z tvaru reakcí sestavíme výchozí soustavu diferenciálních rovnic

$$\frac{\mathrm{d}\xi_1}{\mathrm{d}t} = k_1 n_A - k_2 n_B \xi_1 + k_3 \xi_1^2 \xi_2 - k_4 \xi_1 ,$$
$$\frac{\mathrm{d}\xi_2}{\mathrm{d}t} = k_2 n_B \xi_1 - k_3 \xi_1^2 \xi_2 .$$

Na pravých stranách jsou jen zapsány způsoby vzniku a zániku látek X a Y. Opustíme-li nepodstatné konstanty, jde o rovnice typu

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\xi_1}{\mathrm{d}t} &= \alpha - (\beta+1)\xi_1 + \xi_1^{\,2}\,\xi_2\,,\\ \frac{\mathrm{d}\xi_2}{\mathrm{d}t} &= \beta\,\xi_1 - \xi_1^{\,2}\xi_2\,.\end{aligned} \tag{1.197}$$

Tyto rovnice poskytují řešení ve tvaru limitního cyklu. Pro hodnoty $\alpha = 2$ a $\beta = 5{,}9$ a různé počáteční podmínky jsou fázové trajektorie na následujícím obrázku. Po dosti dlouhém čase se koncentrace ξ_1 a ξ_2 periodicky mění (oscilují) kolem jistých středních hodnot. Tento teoretický model chemické reakce navrhnul rusko-belgický chemik Ilja Prigogine (1917–2003) na Svobodné univerzitě v Bruselu.



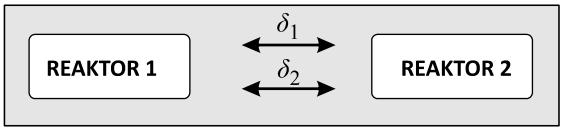
Obr. 41: Fázový portrét 2D bruselátoru, limitní cyklus je znázorněn silnou čarou.

◗

◖ Příklad 31: bruselátor (4D)

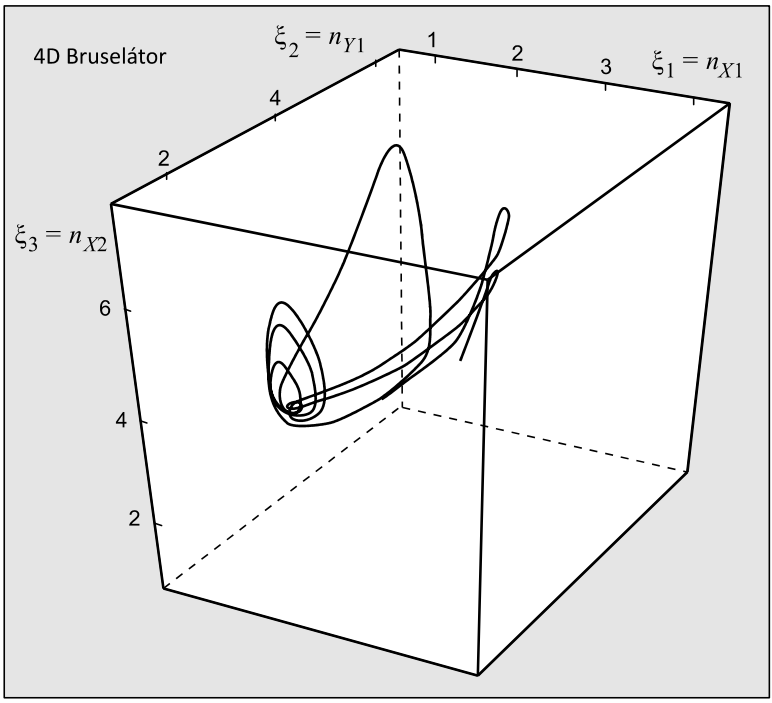
Budeme předpokládat, že předchozí reakce probíhá současně ve dvou reaktorech s možností výměny látky *X* rychlostí δ_1 a látky *Y* rychlostí δ_2. Koncentrace látek *X* a *Y* v reaktorech 1 a 2 označíme takto: $\xi_1 = n_{X1}$, $\xi_2 = n_{Y1}$, $\xi_3 = n_{X2}$, $\xi_4 = n_{Y2}$. Výchozí rovnice budou

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\xi_1}{\mathrm{d}t} &= \alpha - (\beta+1)\xi_1 + \xi_1^2\xi_2 + \delta_1(\xi_3 - \xi_1)\,,\\ \frac{\mathrm{d}\xi_2}{\mathrm{d}t} &= \beta\xi_1 - \xi_1^2\xi_2 + \delta_2(\xi_4 - \xi_2)\,,\\ \frac{\mathrm{d}\xi_3}{\mathrm{d}t} &= \alpha - (\beta+1)\xi_3 + \xi_3^2\xi_4 + \delta_1(\xi_1 - \xi_3)\,,\\ \frac{\mathrm{d}\xi_4}{\mathrm{d}t} &= \beta\xi_3 - \xi_3^2\xi_4 + \delta_2(\xi_2 - \xi_4)\,.\end{aligned} \tag{1.198}$$



Obr. 42: Spřažené bruselátory.

Rovnice (1.198) jsou soustavou čtyř nelineárních diferenciálních rovnic, jejichž řešení vede pro některé parametry na podivný atraktor (dimenze systému je větší než 3). Na následujícím obrázku je část fázové trajektorie, která by hustě pokryla oblast podivného atraktoru pro $\alpha = 2$; $\beta = 5{,}9$; $\delta_1 = 1{,}21$ a $\delta_2 = 12{,}1$.



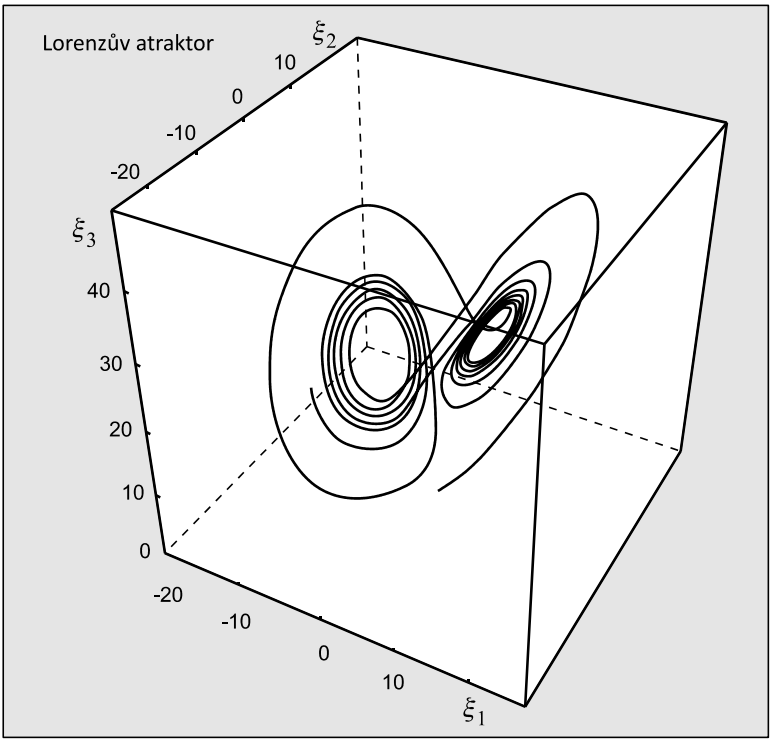
Obr. 43: Fázový portrét 4D bruselátoru.

Příklad 32: Lorenzův atraktor

Jde o nejznámější příklad podivného atraktoru. Výchozí sada rovnic

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\xi_1}{\mathrm{d}t} &= \alpha(\xi_2 - \xi_1)\,, \\ \frac{\mathrm{d}\xi_2}{\mathrm{d}t} &= -\xi_1\xi_3 + \beta\xi_1 - \xi_2\,, \\ \frac{\mathrm{d}\xi_3}{\mathrm{d}t} &= \xi_1\xi_2 - \gamma\xi_3 \end{aligned} \qquad (1.199)$$

popisuje proudění kapaliny mezi dvěma planparalelními deskami s různými teplotami (viz [13], [14]). Veličiny ξ_1, ξ_2, ξ_3 mají postupně význam: první Fourierova komponenta rychlosti, první a druhá Fourierova komponenta teploty. Na následujícím obrázku je opět zakreslena část fázové trajektorie, která by hustě pokryla oblast atraktoru. Rovnice byly numericky řešeny pro hodnoty $\alpha = 3$; $\beta = 26{,}5$; $\gamma = 1$.



Obr. 44: Lorenzův atraktor.

1.5.5 Evoluční rovnice

Příklad 33: elektrono-děrové plazma v silném elektrickém poli

V silném elektrickém poli způsobují urychlené elektrony a díry ionizaci nárazem. Při setkání elektronu s dírou dojde k rekombinaci, tj. zániku nosičů. Označíme-li $\xi_1 = n_\mathrm{e}$ koncentraci elektronů a $\xi_2 = n_\mathrm{d}$ koncentraci děr, budou mít základní rovnice pro časový vývoj počtu nosičů tvar:

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\xi_1}{\mathrm{d}t} &= \alpha_1 \xi_1 - \beta \xi_1 \xi_2 \,, \\ \frac{\mathrm{d}\xi_2}{\mathrm{d}t} &= \alpha_2 \xi_2 - \beta \xi_1 \xi_2 \,. \end{aligned} \tag{1.200}$$

První členy na pravé straně popisují ionizační procesy (přírůstek nosičů), druhé členy rekombinační procesy (úbytek nosičů). Stejný tvar rovnic mají i následující úlohy.

Příklad 34: systém dravec a kořist

Předpokládáme, že dravec se živí kořistí (například vlk a zajíci), kořist má potravy dostatek (jí například trávu). Označíme-li $\xi_1 = n_\mathrm{d}$ počet dravců v určité oblasti a $\xi_2 = n_\mathrm{k}$ množství potenciální kořisti, budou mít základní rovnice pro časový vývoj počtu zvířat tvar podobný jako v předchozím příkladu:

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\xi_1}{\mathrm{d}t} &= -\alpha_1 \xi_1 + \beta_1 \xi_1 \xi_2 \,, \\ \frac{\mathrm{d}\xi_2}{\mathrm{d}t} &= +\alpha_2 \xi_2 - \beta_2 \xi_1 \xi_2 \,. \end{aligned} \tag{1.201}$$

První člen v první rovnici popisuje úhyn dravců v nepřítomnosti kořisti ($\xi_2 = 0$). První člen v druhé rovnici popisuje množení se kořisti v nepřítomnosti dravců ($\xi_1 = 0$). Druhé členy představují požírání kořisti dravci, tzv. „párovou interakci“, díky které počet dravců roste a množství kořisti se snižuje.

Příklad 35: dvě sociální skupiny

Popišme nyní dvě skupiny lidí s odlišným názorem na určitý problém (přívrženci dvou různých postupů, teorií, názorů, politických stran). Označíme-li $\xi_1 = n_A$ počet přívrženců názoru A a $\xi_2 = n_B$ počet přívrženců názoru B, budou mít základní rovnice pro časový vývoj počtu přívrženců tvar:

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\xi_1}{\mathrm{d}t} &= \alpha_1 \xi_1 + \beta_1 \xi_1 \xi_2 \,, \\ \frac{\mathrm{d}\xi_2}{\mathrm{d}t} &= \alpha_2 \xi_2 - \beta_2 \xi_1 \xi_2 \,. \end{aligned} \tag{1.202}$$

Koeficienty β mohou být kladné i záporné, párovou interakci zde tvoří setkání příslušníků různých skupin, diskuze atd.

Příklad 36: chemické reakce

Uvažme chemickou reakci typu

$$\begin{aligned} A + B &\xrightarrow{k_1} C \,, \\ A + C &\xrightarrow{k_2} B + D \,. \end{aligned}$$

Rovnice pro časový vývoj jednotlivých koncentrací mají tvar:

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}n_\mathrm{A}}{\mathrm{d}t} &= -k_1 n_\mathrm{A} n_\mathrm{B} - k_2 n_\mathrm{A} n_\mathrm{C} \,, & \frac{\mathrm{d}n_\mathrm{C}}{\mathrm{d}t} &= +k_1 n_\mathrm{A} n_\mathrm{B} - k_2 n_\mathrm{A} n_\mathrm{C} \,, \\ \frac{\mathrm{d}n_\mathrm{B}}{\mathrm{d}t} &= -k_1 n_\mathrm{A} n_\mathrm{B} + k_2 n_\mathrm{A} n_\mathrm{C} \,, & \frac{\mathrm{d}n_\mathrm{D}}{\mathrm{d}t} &= +k_2 n_\mathrm{A} n_\mathrm{C} \,. \end{aligned} \tag{1.203}$$

Látka B je katalyzátorem reakce. Je-li A zastoupena v dostatečném množství jako surovina, lze brát n_A = const. a řešit jen tři rovnice.

Všechny rovnice z předchozích příkladů mají společný tvar

$$\frac{\mathrm{d}\xi_k}{\mathrm{d}t} = \alpha_{kj}\,\xi_j + \beta_k^{jl}\,\xi_j\,\xi_l \tag{1.204}$$

a nazývají se *evoluční rovnice*. Poznamenejme, že přes dvojné indexy se sčítá. Charakteristická je lineární kombinace různých párových interakcí. Typickými řešeními jsou oscilace, limitní cykly, ve více než třech dimenzích vznikají chaotické množiny a podivné atraktory. Rozeberme nyní řešení soustavy dvou rovnic tvaru

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\xi_1}{\mathrm{d}t} &= \alpha_1\,\xi_1 + \beta_1\,\xi_1\,\xi_2\,, \\ \frac{\mathrm{d}\xi_2}{\mathrm{d}t} &= \alpha_2\,\xi_2 + \beta_2\,\xi_1\,\xi_2\,. \end{aligned} \tag{1.205}$$

Standardním postupem zjistíme stacionární body:

$$\xi^{(1)} = (0,0)\,;$$

$$\xi^{(2)} = \left(-\frac{\alpha_2}{\beta_2}, -\frac{\alpha_1}{\beta_1}\right).$$

Nezapomínejme na význam jednotlivých proměnných ξ. Vesměs jde o počty jedinců nějakého typu. Smysl tedy mají jen nezáporné hodnoty. Z matice stability určíme, že první stacionární bod

$\xi^{(1)} = (0,0)$ je pro

$\alpha_1\,,\,\alpha_2 > 0$	nestabilní,
$\alpha_1\,,\,\alpha_2 < 0$	stabilní,
$\alpha_1 \cdot \alpha_2 < 0$	sedlový bod.

Druhý stacionární bod

$\xi^{(2)} = (-\alpha_2/\beta_2\,, -\alpha_1/\beta_1)$ je pro

$\alpha_1\,,\,\alpha_2 > 0$	nestabilní v jednom směru,
$\alpha_1\,,\,\alpha_2 < 0$	nestabilní v jednom směru,
$\alpha_1 \cdot \alpha_2 < 0$	střed oscilací (různá znaménka $\alpha_1\,,\,\alpha_2$).

V posledním případě jde o oscilace kolem stacionárního bodu s frekvencí

$$\omega = \sqrt{|\,\alpha_1 \cdot \alpha_2\,|}. \tag{1.206}$$

Tyto oscilace znamenají *oscilující rovnováhu* mezi jedinci obou typů, jejich počet je udržován v mezích daných oscilacemi. Právě takový systém je systém dravec a kořist (příklad 34). V systému elektronů a děr v silném elektrickém poli (příklad 33) není možné dosáhnout oscilující rovnováhy. Počty jedinců dvou sociálních skupin (příklad 35) mohou a nemusí oscilovat, stejně tak jako koncentrace látek v chemických reakcích (příklad 36).

Volterrovy-Lotkovy rovnice

Doplníme-li na pravých stranách evolučních rovnic regulační členy f_k, dostaneme tzv. *Volterrovy-Lotkovy rovnice*:

► $$\frac{\mathrm{d}\xi_k}{\mathrm{d}t} = \alpha_{kj}\,\xi_j \;+\; \beta_k^{jl}\xi_j\xi_l \;+\; f_k\,. \tag{1.207}$$

Regulační členy mohou popisovat v systému dravec ↔ kořist například dodávání potravy zvnějšku nebo vnější regulaci počtu zvířat. Hodnoty f_k mohou být konstantní i různé funkce času (periodický lov). Škála typů řešení Volterrových-Lotkových systémů je velmi bohatá už pro dvojdimenzionální případ. V různých oblastech fázového prostoru nacházíme různé typy řešení – oscilace, stabilní a nestabilní ohniska, stabilní oblasti, nestabilní oblasti, sedla. Při periodických regulačních členech pozorujeme rezonance, buzení systému. Například rovnice typu dravec ↔ kořist s regulačním členem

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\xi_1}{\mathrm{d}t} &= -\,\xi_1 + \xi_1\xi_2 + 1/4\,,\\ \frac{\mathrm{d}\xi_2}{\mathrm{d}t} &= +\,\xi_2 - \xi_1\xi_2\,.\end{aligned} \tag{1.208}$$

má v bodě $\xi^{(S)} = (1,3/4)$ řešení ve tvaru stabilního ohniska.

Logistická rovnice

Nejjednodušším případem evolučních rovnic je diferenciální rovnice, ve které je časová změna úměrná samotnému počtu jedinců:

$$\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}t} = \alpha n\,. \tag{1.209}$$

Podle znaménka α je řešením rostoucí nebo klesající exponenciála

$$n(t) = n(0)\,\mathrm{e}^{\alpha t}\,. \tag{1.210}$$

Toto řešení je vždy jen určitým přiblížením reality. Nikdy nemůže nic růst exponenciálně po dosti dlouhou dobu. Exponenciální řešení popisuje počáteční nárůst nestabilit nebo různá přechodná řešení. Po určité době převládnou párové procesy, které vedou k saturaci řešení. Tuto situaci popisuje tzv. logistická rovnice

► $$\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}t} = \alpha n - \beta n^2\,. \tag{1.211}$$

Ustálené (saturované) řešení snadno nalezneme tak, že dosadíme za dn/dt nulu:

$$n_\mathrm{S} \equiv \lim_{t\to\infty} n(t) = \frac{\alpha}{\beta}\,. \tag{1.212}$$

K vyřešení rovnice (1.211) použijeme substituci

$$n(t) = \frac{\alpha}{\beta}\xi^r(t)\,. \tag{1.213}$$

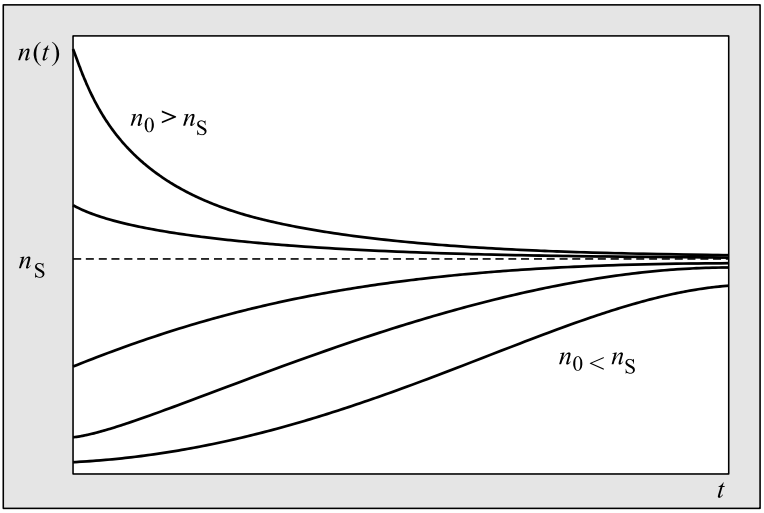
Konstanta před řešením reprezentuje saturovanou hodnotu. Mocninu r budeme hledat tak, aby se diferenciální rovnice co nejvíce zjednodušila. Po provedení substituce dostaneme rovnici

$$r\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}t} = \alpha\xi - \alpha\xi^{r+1}\,. \tag{1.214}$$

Je zjevné, že volba $r = -1$ převede tuto rovnici na lineární rovnici s konstantní pravou stranou, jejíž řešení již snadno najdeme. Analytické řešení původní logistické rovnice je

► $$n(t) \;=\; n_\mathrm{S}\frac{\mathrm{e}^{\alpha t}}{\mathrm{e}^{\alpha t} + n_\mathrm{S}/n_0 - 1} \;=\; \frac{n_\mathrm{S}}{1 + \left(n_\mathrm{S}/n_0 - 1\right)\mathrm{e}^{-\alpha t}}\,. \tag{1.215}$$

Snadno ověříme, že limita řešení pro $t \to \infty$ dá saturovanou hodnotu (1.212) a limita bez párové interakce, tj. pro $\beta \to 0$ ($n_\mathrm{S} \to \infty$) dá exponenciální funkci (1.210). Logistickou rovnici popisující omezený exponenciální růst poprvé navrhnul belgický matematik Pierre Francois Verhulst (1804–1849) v roce 1838.



Obr. 45: Řešení logistické rovnice.

1.6 Lagrangeovy rovnice pro polní problémy

1.6.1 Lagrangeovy rovnice, skalární pole

Pro studium této kapitoly je nutné umět zacházet s kovariantními a kontravariantními indexy. Pokud tuto techniku neovládáte, přečtěte si nejprve dodatek C. V klasické mechanice jsme hledali závislost zobecněných souřadnic $q_k(t)$ na čase. U polních problémů budeme hledat časoprostorovou závislost polí $\varphi_k(t, \mathbf{x})$. Namísto Lagrangeovy funkce budeme používat hustotu Lagrangeovy funkce, která závisí na čase, prostoru, polích a jejich derivacích:

$$\mathscr{L} = \mathscr{L}(t, x, y, z, \varphi_1, \ldots \varphi_N, \partial\varphi_1/\partial t, \partial\varphi_1/\partial x, \ldots \partial\varphi_N/\partial z),$$

což budeme zkráceně zapisovat ve tvaru

$$\mathscr{L} = \mathscr{L}(x^\mu, \varphi_k, \varphi_{k,\alpha}).$$

Pro integrál akce bude platit

$$S = \int_\Omega \mathscr{L}(x^\mu, \varphi_k, \varphi_{k,\alpha})\,\mathrm{d}^3\mathbf{x}\,\mathrm{d}t = \int_\Omega \mathscr{L}(x^\mu, \varphi_k, \varphi_{k,\alpha})\,\mathrm{d}^4x.$$

Stejně jako v mechanice těles budeme hledat nutné podmínky extremálnosti integrálu akce a variace polí budou definovány ve stejném čase (ale tentokrát i prostorové souřadnici), což nám zajistí záměnnost variací a parciálních derivací. Na hranici oblasti $\partial\Omega$ požadujeme, aby variace byly nulové, tedy musí zde platit vztahy obdobné vztahům (1.4), (1.5) a (1.6):

$$\begin{gathered}\delta\varphi_k = \varphi_{k,\mathrm{virt}}(x^\mu) - \varphi_{k,\mathrm{real}}(x^\mu);\\ \delta\varphi_k(\partial\Omega) = 0;\\ \delta\partial_\mu\varphi_k = \partial_\mu\delta\varphi_k.\end{gathered} \tag{1.216}$$

Požadujme tedy, aby variace integrálu akce byla nulová:

$$\delta\int_\Omega \mathscr{L}(x^\mu, \varphi_k, \varphi_{k,\alpha})\,\mathrm{d}^4x = 0.$$

Díky záměnnosti variací a derivací můžeme přejít s variací do integrálu a zapůsobit s ní na všechny proměnné (s výjimkou x^μ, jde o variace ve stejné události):

$$\int_\Omega \left[\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi_k}\delta\varphi_k + \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi_{k,\alpha}}\delta\varphi_{k,\alpha}\right]\mathrm{d}^4x = 0.$$

V posledním členu zaměníme variaci a derivaci: $\delta\varphi_{k,\alpha} = \delta\partial_\alpha\varphi_k = \partial_\alpha\delta\varphi_k$ a provedeme integraci per partes (použijeme Gaussovu větu). Integrál na hranici je vzhledem k (1.216) nulový, a proto máme:

$$\int_\Omega \left[\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi_k} - \partial_\alpha\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi_{k,\alpha}}\right]\delta\varphi_k\,\mathrm{d}^4x = 0\,.$$

Vzhledem k tomu, že integrace musí dát nulu pro jakoukoli časoprostorovou oblast Ω, musí být i integrand nulový (přesněji řečeno *skoro všude*, tedy až na množiny dimenze menší než 4):

$$\left[\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi_k} - \partial_\alpha\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi_{k,\alpha}}\right]\delta\varphi_k = 0\,. \tag{1.217}$$

Pokud jsou pole φ_k nezávislá, budou koeficienty lineární kombinace (1.217) nulové (celý výraz má tvar $\Sigma c_k\,\delta\varphi_k = 0$), tedy

$$\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi_k} - \partial_\alpha\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi_{k,\alpha}} = 0\,.$$

Výraz upravíme do standardního tvaru Lagrangeových rovnic

► $$\partial_\alpha\left[\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi_{k,\alpha}}\right] - \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi_k} = 0\,; \qquad k = 1,\ldots,N\,. \tag{1.218}$$

Na rozdíl od Lagrangeových rovnic pro hmotné body a pevná tělesa není v prvním členu jen časová derivace, ale jsou zde derivace podle všech čtyř proměnných. Lagrangeovy rovnice rozepsané pro jedno jediné pole mají tvar:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial\varphi/\partial t)}\right] + \frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial\varphi/\partial x)}\right] + \frac{\partial}{\partial y}\left[\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial\varphi/\partial y)}\right] + \frac{\partial}{\partial z}\left[\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial\varphi/\partial z)}\right] - \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi} = 0\,. \tag{1.219}$$

Poznámka: Lagrangeova funkce není jednoznačně určena. Funkce $\tilde{\mathscr{L}} \equiv \mathscr{L} + \partial_\mu K^\mu$ vede na stejné polní rovnice pro libovolný čtyřvektor K^μ. Této libovůle lze využít ke konstrukci co možná „nejelegantnějšího“ lagranžiánu.

◖ Příklad 37: vlnová rovnice

Nalezněme Lagrangeovy rovnice pro Lagrangeovu funkci skalárního pole φ, která obsahuje jen derivace tohoto pole podle předpisu:

$$\mathscr{L} = \left(\partial_\mu\varphi\right)\left(\partial^\mu\varphi\right)\,. \tag{1.220}$$

Řešení: Lagrangeova funkce je skalárem (to zajišťuje jeden horní a jeden dolní index, při změně báze/souřadnicové soustavy se výraz nezmění). Pokud Lagrangeovu funkci rozepíšeme, máme:

$$\mathscr{L} = -\frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial t}\right)^2 + \left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial\varphi}{\partial z}\right)^2\,. \tag{1.221}$$

Po provedení všech derivací dá Lagrangeova rovnice (1.219)

$$-\frac{2}{c^2}\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2}+2\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}+2\frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2}+2\frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2}=0 \qquad \Rightarrow$$

$$-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2}+\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2}=0\,.$$

Nejjednodušší varianta Lagrangeovy funkce skalárního pole tedy vede na vlnovou rovnici. V Lagrangeově funkci (1.220) se většinou píše koeficient ½:

► $$\mathscr{L}=\frac{1}{2}\left(\partial_\mu\varphi\right)\left(\partial^\mu\varphi\right) \qquad \Rightarrow \qquad \Box\varphi=0\,. \tag{1.222}$$

Důvody jsou dva: Lagrangeovy rovnice dají vlnovou rovnici (bez nutnosti krácení koeficientem 2) a celý výraz (1.222) je analogií kinetické energie (polovina z kvadrátu derivací).

Jiné řešení: Řešme stejný příklad pro Lagrangeovu funkci (1.220) bez rozpisu do komponent. Levá strana Lagrangeových rovnic je:

$$\partial_\alpha\left[\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi_{,\alpha}}\right]-\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi}=\partial_\alpha\left[\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi_{,\alpha}}\right]=\partial_\alpha\left[\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\left(\partial_\alpha\varphi\right)}\right]=$$

$$=\partial_\alpha\frac{\partial}{\partial\left(\partial_\alpha\varphi\right)}\left[\frac{1}{2}\left(\partial_\mu\varphi\right)\left(\partial^\mu\varphi\right)\right]=$$

$$=\frac{1}{2}\partial_\alpha\frac{\partial}{\partial\left(\partial_\alpha\varphi\right)}\left[g^{\mu\nu}\left(\partial_\mu\varphi\right)\left(\partial_\nu\varphi\right)\right]=$$

$$=\frac{1}{2}g^{\mu\nu}\partial_\alpha\left[\delta^\alpha{}_\mu\left(\partial_\nu\varphi\right)+\left(\partial_\mu\varphi\right)\delta^\alpha{}_\nu\right]=$$

$$=\frac{1}{2}\partial_\alpha\left[\delta^\alpha{}_\mu\left(\partial^\mu\varphi\right)+\left(\partial^\nu\varphi\right)\delta^\alpha{}_\nu\right]=$$

$$=\frac{1}{2}\partial_\alpha\left[\left(\partial^\alpha\varphi\right)+\left(\partial^\alpha\varphi\right)\right]=$$

$$=\partial_\alpha\partial^\alpha\varphi=\Box\varphi\,.$$

Výsledek je opět vlnovou rovnicí

$$\Box\varphi=0\,.$$

Nejkratší řešení:

$$\partial_\alpha\left[\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi_{,\alpha}}\right]-\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi}=\frac{1}{2}\partial_\alpha\frac{\partial}{\partial\varphi_{,\alpha}}\left(\varphi_{,\beta}\varphi^{,\beta}\right)=\frac{1}{2}\partial_\alpha 2\varphi^{,\alpha}=\partial_\alpha\partial^\alpha\varphi=\Box\varphi\,.$$

◗

Kleinovo–Gordonovo pole

► $$\mathscr{L} = \frac{1}{2}\left(\partial_\mu \varphi\right)\left(\partial^\mu \varphi\right) + \frac{1}{2}\kappa^2\varphi^2 \qquad \Rightarrow \qquad (\Box - \kappa^2)\varphi = 0\,. \tag{1.223}$$

Lagrangeova funkce tohoto pole je kvadratická v derivacích i v samotném poli. Druhý člen by odpovídal hustotě potenciální energie v klasické mechanice ($L = T - V$). Výsledná Lagrangeova rovnice je lineární a je vhodnou rovnicí například pro plazmové vlny nebo pro kvantový popis částic se spinem nula.

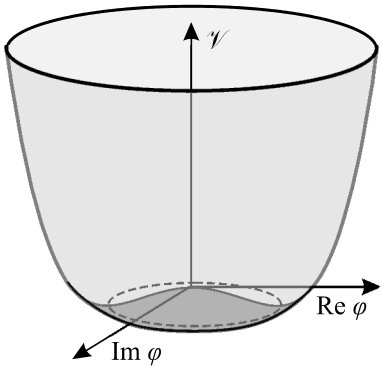
Dno koňakové láhve

► $$\mathscr{L} = \frac{1}{2}\left(\partial_\mu \varphi\right)\left(\partial^\mu \varphi\right) + \frac{1}{2}\kappa^2\varphi^2 - \frac{\beta}{4}\varphi^4 \quad \Rightarrow \quad \Box\varphi - \kappa^2\varphi + \beta\varphi^3 = 0\,. \tag{1.224}$$

Pokud budeme druhý člen interpretovat jako hustotu potenciální energie, dostaneme hodnotu

► $$\mathscr{V} = -\frac{1}{2}\kappa^2\varphi^2 + \frac{\beta}{4}\varphi^4\,.$$

S obdobnou funkcí reálné proměnné jsme se již setkali v kapitole 1.5.2.



Obr. 46: Potenciál dna koňakové lahve.

Potenciál má válcovou symetrii a nekonečně mnoho minim lokalizovaných na kružnici o poloměru R. Při výběru některého z minim se naruší válcová symetrie. Odpovídající Lagrangeova rovnice je nelineární. Nelineární člen může eliminovat rozplývání vlnového balíku (disperzi) způsobenou lineárním členem. Rovnice má proto některá řešení ve tvaru *solitonu* – vlnového balíku s neproměnným tvarem.

sin-Gordonova rovnice

► $$\mathscr{L} = \frac{1}{2}\left(\partial_\mu \varphi\right)\left(\partial^\mu \varphi\right) - \kappa^2\cos\varphi \qquad \Rightarrow \qquad \Box\varphi - \kappa^2\sin\varphi = 0\,. \tag{1.225}$$

Tato známá nelineární rovnice poskytuje opět solitonová řešení. Pokud provedeme rozvoj trigonometrické funkce do lineárního členu, dostaneme Kleinovu-Gordonovu rovnici, pokud provedeme rozvoj do prvních dvou členů, dostaneme rovnici odpovídající potenciálu „koňakové lahve“.

1.6.2 Kanonicky sdružené pole

Obdobně jako jsme dříve zavedli k dané zobecněné souřadnici kanonicky sdruženou hybnost a poté energii, můžeme i ve spojitém případě definovat kanonicky sdružené pole a hustotu energie vztahy

► $$\pi_k(t,\mathbf{x}) \equiv \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \varphi_{k,t}}; \tag{1.226}$$

► $$\mathscr{H}(t,\mathbf{x}) \equiv \sum_k \left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \varphi_{k,t}} \varphi_{k,t} \right) - \mathscr{L}. \tag{1.227}$$

Analogický výsledek jako dříve dají i Poissonovy závorky mezi poli a sdruženými poli

$$\{\varphi_k(t,\mathbf{x}), \varphi_l(t,\mathbf{x}')\} = 0,$$

► $$\{\pi_k(t,\mathbf{x}), \pi_l(t,\mathbf{x}')\} = 0, \tag{1.228}$$

$$\{\varphi_k(t,\mathbf{x}), \pi_l(t,\mathbf{x}')\} = \delta_{kl}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}').$$

Obdobný je i zápis rovnice pro časový vývoj polí φ_k:

► $$\dot{\varphi}_k = \{\varphi_k, \mathscr{H}\}. \tag{1.229}$$

Ve všech těchto výrazech se jakoby ztratila kovariance (stejný tvar v různých souřadnicových soustavách) rovnic vzhledem k Lorentzově transformaci, výrazy (1.226) až (1.229) nevypadají relativisticky. To je ale jen zdánlivé. Pokud zavedeme tenzor energie a hybnosti vztahem (jde o relativistické zobecnění vztahů 1.226 a 1.227)

$$T^{\alpha}{}_{\beta} \equiv \frac{1}{c}\sum_k \left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial(\partial_\alpha \varphi_k)} \partial_\beta \varphi_k \right) - \frac{1}{c} g^{\alpha}{}_{\beta} \mathscr{L}, \tag{1.230}$$

bude hustota energie pole dána složkou

$$\mathscr{H} = cT^0{}_0 \tag{1.231}$$

a hustota hybnosti pole bude úměrná kanonicky sdruženým polím

$$\mathscr{P}_n = T^0{}_n = \sum_k \pi_k \partial_n \varphi_k \qquad \Rightarrow \qquad \vec{\mathscr{P}} = \sum_k \pi_k \vec{\nabla} \varphi_k. \tag{1.232}$$

Veličiny $T^l{}_0$ reprezentují tok energie a $T^l{}_n$ tok hybnosti. Z vyjádření tenzoru (1.230) a polních rovnic (1.218) lze snadno ukázat, že tenzor energie a hybnosti splňuje rovnici kontinuity

$$\partial_\alpha T^{\alpha}{}_{\beta} = 0. \tag{1.233}$$

Ostatní relace lze také snadno přepsat do relativistického tvaru.

1.6.3 Maxwellovy rovnice, elektromagnetické pole

Elektromagnetické pole většinou popisujeme Maxwellovými rovnicemi

► $$\operatorname{div}\mathbf{B} = 0\,, \tag{1.234}$$

► $$\operatorname{rot}\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}\,, \tag{1.235}$$

► $$\operatorname{div}\mathbf{D} = \rho_Q\,, \tag{1.236}$$

► $$\operatorname{rot}\mathbf{H} = \mathbf{j}_Q + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}\,, \tag{1.237}$$

které doplníme o materiálové vztahy

► $$\begin{aligned} \mathbf{D} &= \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}\,, \\ \mathbf{B} &= \mu_0 (\mathbf{H} + \mathbf{M})\,, \end{aligned} \tag{1.238}$$

kde vektor **P** je polarizace prostředí (hustota elektrického dipólového momentu) a **M** je magnetizace (hustota magnetického dipólového momentu).

Potenciály pole

Z rovnice (1.234) plyne existence funkce **A**(*t*, **x**), takové, že

► $$\mathbf{B} = \operatorname{rot}\mathbf{A}\,. \tag{1.239}$$

Rovnice je pak splněna automaticky, protože divergence z rotace každé funkce je nulová. Veličina **A** se nazývá vektorový potenciál. Dosadíme-li vyjádření (1.239) do rovnice (1.235), získáme vztah

$$\operatorname{rot}\left(\mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}\right) = 0\,,$$

ze kterého plyne existence funkce ϕ takové, že $\mathbf{E} + \partial\mathbf{A}/\partial t = -\nabla\phi$. Rovnice (1.235) je opět splněna automaticky a pro elektrické pole máme vyjádření

► $$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}\,. \tag{1.240}$$

Funkci ϕ nazýváme skalární potenciál, v případě stacionárních polí přejde (1.240) ve známý vztah

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi\,, \tag{1.241}$$

kde znaménko minus jen odráží fyzikální skutečnost, že působící síla míří do minima potenciální energie. Elektromagnetické pole tak můžeme popsat pouhou čtveřicí veličin: skalárním a vektorovým potenciálem. Tyto čtyři veličiny tvoří relativistický čtyřvektor (viz dodatek C).

$$A^{\mu} = \begin{pmatrix} \phi/c \\ \mathbf{A} \end{pmatrix}. \tag{1.242}$$

Známe-li čtveřici A^{μ}, určíme elektrické a magnetické pole snadno ze vztahů (1.240) a (1.239). Vektory **E** a **B** jsou tak v jistém smyslu preferovány oproti vektorům **D** a **H**, neboť je můžeme přímo určit z potenciálů. Elektromagnetické pole je derivacemi potenciálů, oba vztahy (1.239) a (1.240) lze jednoduše zapsat za pomoci tenzoru elektromagnetického pole

$$F^{\mu\nu} \equiv \partial^{\mu} A^{\nu} - \partial^{\nu} A^{\mu} = \begin{pmatrix} 0 & E^x/c & E^y/c & E^z/c \\ -E^x/c & 0 & B^z & -B^y \\ -E^y/c & -B^z & 0 & B^x \\ -E^z/c & B^y & -B^x & 0 \end{pmatrix}. \tag{1.243}$$

Jde o antisymetrický tenzor druhého řádu, který má jen šest nezávislých složek (těmi je elektrické a magnetické pole). Složky pole lze snadno odečíst z příslušných pozic tenzoru.

Nejednoznačnost potenciálů, kalibrační invariance

Již dříve jsme viděli, že potenciály nejsou určeny jednoznačně, dvěma různým potenciálům může odpovídat stejné elektromagnetické pole. Pokud zavedeme nové, přetransformované potenciály za pomoci tzv. *gradientní transformace*

$$\tilde{A}^{\mu} \equiv A^{\mu} + \partial^{\mu} f\,, \tag{1.244}$$

kde f je zcela libovolná dvakrát spojitě diferencovatelná funkce, pole se nezmění:

$$\tilde{F}^{\mu\nu} = \partial^{\mu}\left(A^{\nu} + \partial^{\nu} f\right) - \partial^{\nu}\left(A^{\mu} + \partial^{\mu} f\right) = \partial^{\mu} A^{\nu} - \partial^{\nu} A^{\mu} = F^{\mu\nu}\,. \tag{1.245}$$

Této libovůle v potenciálech lze s výhodou využít při konstrukci co nejjednodušší varianty Maxwellových rovnic v potenciálech.

Maxwellovy rovnice zapsané za pomoci tenzoru pole

Maxwellovy rovnice (1.234) a (1.235) jsme využili k zavedení potenciálů elektromagnetického pole. Zbývající dvě rovnice se zdrojovými členy můžeme za pomoci tenzoru elektromagnetického pole snadno přepsat do tvaru

$$F^{\mu\nu}{}_{,\nu} = \mu_0 j^{\mu}\,, \tag{1.246}$$

kde čtyřvektor j^{μ} prezentuje zdroje magnetických polí

$$j^{\mu} \equiv \begin{pmatrix} \rho_Q c \\ \mathbf{j}_Q \end{pmatrix}. \tag{1.247}$$

Tento tvar Maxwellových rovnic je zjevně relativistický.

Maxwellovy rovnice v potenciálech

Přepišme Maxwellovy rovnice ve tvaru (1.246) za pomoci potenciálů:

$$F^{\mu\nu}{}_{,\nu} = \mu_0 j^\mu ;$$

$$\partial_\nu \left(\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu \right) = \mu_0 j^\mu ;$$

$$\partial^\mu \partial_\nu A^\nu - \partial_\nu \partial^\nu A^\mu = \mu_0 j^\mu . \tag{1.248}$$

Druhý člen na levé straně je D'Alambertův vlnový operátor aplikovaný na čtyřpotenciál pole, pravá strana zjevně prezentuje zdroje polí. Jedinou „vadu na kráse" rovnic zapsaných v potenciálech je první člen. Zde využijeme velké libovůle v potenciálech dané kalibrační transformací. Předpokládejme, že veličina $\partial_\nu A^\nu$ je rovna nějaké funkci času a prostoru $F(t, \mathbf{x})$, tj.

$$\partial_\nu A^\nu = F(t, \mathbf{x}) ,$$

a zvolme za pomoci gradientní transformace (1.244) jiný čtyřpotenciál, pro který budeme požadovat, aby

$$\partial_\nu \tilde{A}^\nu = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \partial_\nu A^\nu + \partial_\nu \partial^\nu f = 0 \qquad \Rightarrow \qquad F(t, \mathbf{x}) + \Box f = 0 .$$

Taková gradientní transformace bude vždy existovat. Funkci f, která generuje transformaci, stačí volit tak, aby splňovala rovnici

$$\Box f = -F(t, \mathbf{x}) . \tag{1.249}$$

V nových potenciálech je první člen v rovnici (1.248) nulový a Maxwellovy rovnice získají jednoduchý tvar

$$\Box \tilde{A}^\mu = -\mu_0 j^\mu ; \tag{1.250}$$

$$\partial_\mu \tilde{A}^\mu = 0 . \tag{1.251}$$

Jde o obyčejné vlnové rovnice pro čtyřpotenciál A^μ, u kterých jsou zdrojovými členy složky čtyřvektoru j^μ. Rovnice jsou ještě doplněny Lorenzovou kalibrační podmínkou (1.251). Ukázali jsme, že libovůle potenciálů lze využít k tomu, aby Lorenzova kalibrační podmínka byla splněna. Avšak dokonce ani požadavek na její splnění neurčuje potenciály jednoznačně! Z rovnice (1.249) je zřejmé, že funkce f není určena jednoznačně a lze k ní přičíst jakékoli řešení vlnové rovnice

$$\Box f_0 = 0 . \tag{1.252}$$

Proto je možná ještě další gradientní transformace

$$\tilde{\tilde{A}}^\mu = \tilde{A}^\mu + \partial^\mu f_0 ,$$

kterou lze využít například k vynulování skalárního potenciálu. Uzavřeme tuto partii konstatováním, že můžeme vždy zvolit takové potenciály, aby Maxwellovy rovnice měly jednoduchý tvar

► $$\Box A^\mu = -\mu_0 j^\mu ;$$
$$\partial_\mu A^\mu = 0 . \tag{1.253}$$

Lagrangeova formulace Maxwellových rovnic

Hustota Lagrangeovy funkce pro interakci nabitých částic s polem má tvar

► $$\mathscr{L} = \mathscr{L}_{\text{part}} + \mathscr{L}_{\text{int}} + \mathscr{L}_{\text{field}} \,. \tag{1.254}$$

První část popisuje pohyby částic a věnovali jsme se jí v kapitole 1.4.1. Interakční část musí být nějakou kombinací čtyřtoku j^μ (popisuje částice) a čtyřpotenciálu A^μ (popisuje pole). Hned nejjednodušší skalární varianta vede na správné polní rovnice:

$$\mathscr{L}_{\text{int}} = j_\mu A^\mu \,. \tag{1.255}$$

Pro bodovou částici je čtyřtok dán vztahem

$$\begin{pmatrix} Qc\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') \\ Q\mathbf{v}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') \end{pmatrix}, \tag{1.256}$$

vektor $\mathbf{x}$ je polohový vektor částice a vektor $\mathbf{x}'$ popisuje polohu pozorovatele. Lagrangeova funkce interakce bude dána integrací

$$L_{\text{int}} = \int \mathscr{L}_{\text{int}} \,\mathrm{d}^3\mathbf{x}' = \int j_\mu A^\mu \,\mathrm{d}^3\mathbf{x}' = \int \left(-Q\phi + Q\mathbf{A}\cdot\mathbf{v}\right)\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\,\mathrm{d}^3\mathbf{x}' \quad \Rightarrow$$

$$L_{\text{int}} = -Q\phi(t,\mathbf{x}) + Q\mathbf{A}(t,\mathbf{x})\cdot\mathbf{v} \,. \tag{1.257}$$

Polní část Lagrangeovy funkce musí být tvořena tenzorem elektromagnetického pole, nejjednodušším skalárem je kombinace $F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}$ a polní část Lagrangeovy funkce by měla být tomuto výrazu úměrná. Konstantu úměrnosti určíme tak, abychom dostali správné polní rovnice (v tomto případě Maxwellovy rovnice):

► $$\mathscr{L}_{\text{field}} = -\frac{1}{4\mu_0} F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} \tag{1.258}$$

Obě části hustoty Lagrangeovy funkce pro elektromagnetické pole jsou

► $$\mathscr{L}_{\text{elmg}} = \mathscr{L}_{\text{field}} + \mathscr{L}_{\text{int}} \;=\; -\frac{1}{4\mu_0} F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + j_\mu A^\mu \tag{1.259}$$

Ověřme na závěr, že polní Lagrangeovy rovnice dají Maxwellovy rovnice:

$$\partial_\alpha \left[\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial A^\beta{}_{,\alpha}}\right] - \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial A^\beta} = 0 \,;$$

$$-\frac{1}{4\mu_0}\partial^\alpha \left[\frac{\partial\left(F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}\right)}{\partial A^{\beta,\alpha}}\right] - j_\beta = 0 \,;$$

$$-\frac{1}{4}\partial^\alpha \left[2F_{\mu\nu}\frac{\partial F^{\mu\nu}}{\partial A^{\beta,\alpha}}\right] = \mu_0 j_\beta \,;$$

$$-\frac{1}{2}\partial^{\alpha}\left[\left(\partial_{\mu}A_{\nu}-\partial_{\nu}A_{\mu}\right)\frac{\partial}{\partial(\partial^{\alpha}A^{\beta})}\left(\partial^{\mu}A^{\nu}-\partial^{\nu}A^{\mu}\right)\right]=\mu_0 j_{\beta}\ ;$$

$$-\frac{1}{2}\left[\partial^{\alpha}\left(\partial_{\mu}A_{\nu}-\partial_{\nu}A_{\mu}\right)\left(\delta^{\mu}{}_{\alpha}\delta^{\nu}{}_{\beta}-\delta^{\nu}{}_{\alpha}\delta^{\mu}{}_{\beta}\right)\right]=\mu_0 j_{\beta}\ ;$$

$$-\frac{1}{2}\partial^{\alpha}\left[\partial_{\alpha}A_{\beta}-\partial_{\beta}A_{\alpha}+\partial_{\alpha}A_{\beta}-\partial_{\beta}A_{\alpha}\right]=\mu_0 j_{\beta}\ ;$$

$$-\partial^{\alpha}F_{\alpha\beta}=\mu_0 j_{\beta}\ ;$$

$$-F^{\alpha\beta}{}_{,\alpha}=\mu_0 j^{\beta}\ ;$$

$$F^{\beta\alpha}{}_{,\alpha}=\mu_0 j^{\beta}\ .$$

což jsou Maxwellovy rovnice ve tvaru (1.246).

Lorentzova pohybová rovnice

Pro pohyb částic samozřejmě nadále platí Lorentzova pohybová rovnice (1.47), kterou lze snadno zapsat za pomoci tenzoru elektromagnetického pole. Zaveďme nejprve vlastní čas částice dτ jako čas plynoucí přímo u částice. Pro interval v místě částice máme

$$\mathrm{d}s^2=-c^2\mathrm{d}t^2+\mathrm{d}\mathbf{x}^2=-c^2\mathrm{d}\tau^2\ . \tag{1.260}$$

Mezi vlastním a obecným časem tedy existuje vztah

$$\begin{aligned}-c^2\mathrm{d}\tau^2&=-c^2\mathrm{d}t^2+\mathrm{d}\mathbf{x}^2 \qquad \Rightarrow\\ \mathrm{d}\tau&=\sqrt{1-v^2/c^2}\ \mathrm{d}t=\frac{\mathrm{d}t}{\gamma}\end{aligned}\ . \tag{1.261}$$

Vlastní čas je invariantem, který využijeme při zavedení čtyřrychlosti a čtyřhybnosti:

► $$U^{\alpha}\equiv\frac{\mathrm{d}x^{\alpha}}{\mathrm{d}\tau}\ ; \tag{1.262}$$

► $$P^{\alpha}\equiv m_0 U^{\alpha}\ . \tag{1.263}$$

Pohybová rovnice nabité částice má potom tvar

► $$\frac{\mathrm{d}P^{\alpha}}{\mathrm{d}\tau}\equiv QF^{\alpha\beta}U_{\beta}\ . \tag{1.264}$$

Pouhým dosazením za tenzor elektromagnetického pole (1.243) a s využitím rovnosti $\mathrm{d}/\mathrm{d}\tau=\gamma\,\mathrm{d}/\mathrm{d}t$ snadno ověříme, že vztah (1.264) je jen elegantním přepisem Lorentzovy pohybové rovnice.

Shrnutí

Uveďme nyní klíčové Lagrangeovy funkce a integrály akce $S = \int L \, \mathrm{d}t = \int \mathscr{L} \, \mathrm{d}^4x$. pro elektřinu a magnetizmus

	částice	interakce	pole
$\mathscr{L}$	–	$j_\mu A^\mu$	$-\frac{1}{4\mu_0} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}$
L	$-m_0 c^2 \sqrt{1-\frac{\mathbf{v}^2}{c^2}}$	$-Q\phi + Q\mathbf{A}\cdot\mathbf{v}$	–
S	$-m_0 c^2 \int \mathrm{d}\tau$	$\int j_\mu A^\mu \, \mathrm{d}^4x$	$-\frac{1}{4\mu_0} \int F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \, \mathrm{d}^4x$

Pro hmotný bod postrádá smysl hustota Lagrangeovy funkce, i když je možné ji v principu napsat. U vyjádření částicového lagranžiánu jsme využili vztah $\mathrm{d}\tau = (1-\mathbf{v}^2/c^2)^{1/2}\mathrm{d}t$. Stejně tak postrádá smysl celková Lagrangeova funkce pro pole, které je rozprostřené v času a prostoru. Pokud vezmeme v úvahu pouze částicovou Lagrangeovu funkci, dostaneme pohybovou rovnici volné částice:

$$\frac{\mathrm{d}P^\alpha}{\mathrm{d}\tau} = 0 \,. \tag{1.265}$$

Pokud vezmeme v úvahu Lagrangeovy funkce pro částici a pro interakce, dostaneme pohybovou rovnici

$$\frac{\mathrm{d}P^\alpha}{\mathrm{d}\tau} = QF^{\alpha\beta}U_\beta \,. \tag{1.266}$$

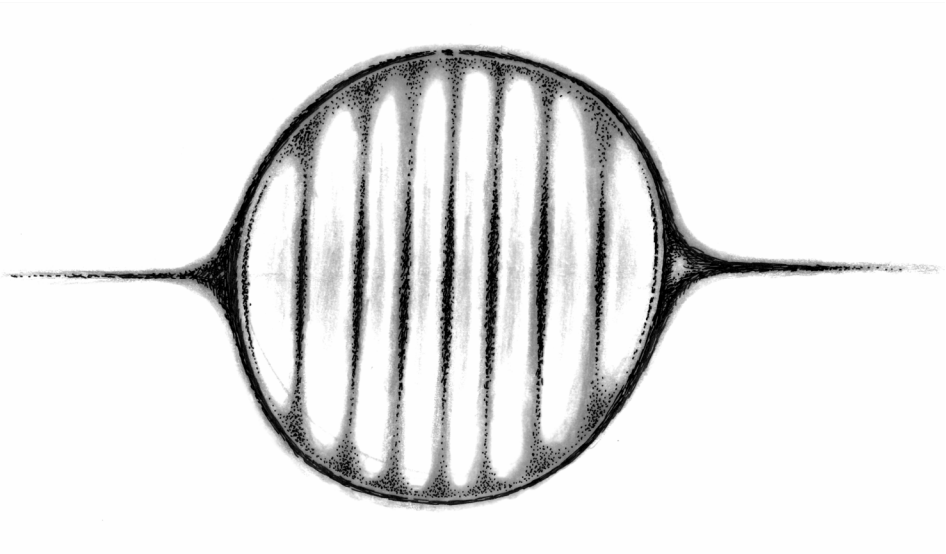
Pokud vezmeme v úvahu pouze Lagrangeovu funkci pro pole, dostaneme Maxwellovy rovnice ve vakuu:

$$F^{\mu\nu}{}_{,\nu} = 0 \,. \tag{1.267}$$

A pokud uvážíme polní a interakční části Lagrangeovy funkce, dostaneme Maxwellovy rovnice se zdrojovými členy:

$$F^{\mu\nu}{}_{,\nu} = \mu_0 j^\mu \,. \tag{1.268}$$

2. Kvantová teorie



2.1 Úvod

2.1.1 Mikrosvět a makrosvět

Teoretická mechanika vychází ze zobecněných zkušeností člověka, z toho, jak vnímáme svět kolem sebe v našich měřítkách – v tzv. *makrosvětě*. Snažíme-li se zákony teoretické mechaniky aplikovat na tělesa malých rozměrů, například atomy nebo částice (tzv. *mikrosvět*), nebudou již předpovědi ve shodě s experimentem. V mikrosvětě platí jiné zákony. Například samotný akt měření může ovlivnit objekty mikrosvěta. Chceme-li určit polohu fotbalového míče, zachytíme okem fotony odražené od míče a informaci zpracujeme. Chceme-li určit polohu elektronu, odražený foton, z kterého na polohu usuzujeme, udělí elektronu nezanedbatelný impuls a změní jeho stav. Asi největší rozdíl mezi jevy v makrosvětě a mikrosvětě souvisí s *komutativností*. V makrosvětě jsme si zvykli na to, že jevy, které pozorujeme, jsou komutativní – nezáleží na pořadí. Je jedno, zda nejprve provedeme měření A a poté měření B nebo naopak. Zkrátka $AB = BA$. V mikrosvětě tomu tak ale není. Akt měření ovlivňuje stav objektů a záleží na tom, které měření provedeme jako první. To je také hlavním důvodem selhání teoretické mechaniky při popisu mikrosvěta. Teoretická mechanika je založena na komutujících matematických objektech. Jedinou nekomutující strukturou v mechanice jsou Poissonovy závorky, a to navíc ještě pomocnou.

První jevy v mikrosvětě, které byly v příkrém rozporu s teoretickou mechanikou, byly objeveny na počátku 20. století. Jejich analýza vedla ke zrodu kvantové teorie – jedné ze dvou nejúspěšnějších teorií v dějinách lidstva (druhou je Einsteinova obecná teorie relativity). Předpovědi dnešní kvantové teorie se shodují s experimentem na mnoho platných cifer. Základní rovnice a vztahy zůstávají shodné s teoretickou mechanikou, platí však pro zcela jiné objekty. Například Lieova algebra Poissonových závorek je aplikována na operátory, které představují dynamické proměnné. Proto je nutné se před studiem kvantové teorie důkladně seznámit s dodatkem E.

Uveďme nyní některé základní rozdíly světa malých rozměrů – *mikrosvěta* – oproti situacím, na které jsme zvyklí z našeho okolí – *makrosvěta*:

► Diskrétní hodnoty některých dynamických proměnných

V určitých situacích můžeme u sledované veličiny naměřit jen některé hodnoty a žádné jiné. Nejčastěji jde o energii nebo moment hybnosti. V makrosvětě jsou měřené hodnoty vždy spojité. Přesněji řečeno jsou tak blízko u sebe, že je nejsme schopni rozlišit.

► Dualismus vln a částic

Objekty mikrosvěta se mohou chovat někdy jako vlny a jindy jako částice. Například světlo se při fotoelektrickém jevu projevuje jako částice (fotony) a při interferenci nebo ohybu jako vlnění. A nejde jen o světlo. Elektron, který si představujeme jako částici, se v elektronovém mikroskopu chová jako vlnění a v jiných situacích má vlnovou povahu. Obdobně je to s neutrony a dalšími elementárními „částicemi“.

► Nekomutativnost aktu měření

Při měření hodnot dvou dynamických proměnných (například polohy a rychlosti) může výsledek záležet na pořadí provedení měření. Akt měření totiž ovlivňuje stav systému, po měření se systém obecně nachází v jiném stavu než před měřením.

► Relace neurčitosti

Zvýšení přesnosti měření jedné dynamické proměnné sníží v některých případech přesnost měření jiné dynamické proměnné. Tato měření se navzájem ovlivňují a jsou nekomutativní. Vždy se ovlivní měření určité zobecněné souřadnice a jí odpovídající zobecněné hybnosti.

► Nedeterminizmus kvantové teorie

Dva experimenty připravené za stejných podmínek mohou dopadnout různě. Při provedení mnoha pokusů zjistíme, že výsledky mají pravděpodobnostní charakter. Jsme tedy schopni předpovědět jen to, s jakou pravděpodobností naměříme ten či onen možný jev, nikoli to, který jev konkrétně nastane.

► Superpozice stavů

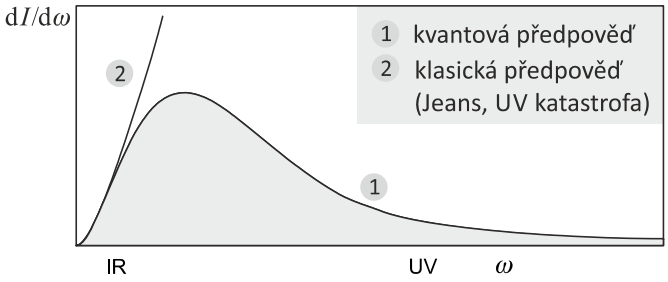
V makrosvětě nikdy nemůžete být na dvou místech současně, například v posluchárně na přednášce a v restauraci na večírku. V mikrosvětě taková situace možná je. Objekty mikrosvěta mohou být, a také běžně jsou, v superpozici dvou i více stavů.

2.1.2 Experimenty, které vedly ke kvantové teorii

Shrňme nyní základní experimentální fakta, která vedla ke zrodu kvantové teorie:

Záření absolutně černého tělesa

V absolutně černém tělese (lze za ně považovat například každou hvězdu) je v rovnováze látka a záření při nějaké konkrétní teplotě *T*. Sledujeme-li vyzařování absolutně černého tělesa, zjistíme, že na různých frekvencích vyzařuje s různou intenzitou. Experimentálně pozorovaný průběh energie vyzářené na jednotkovou frekvenci je na obrázku. Teoretické výpočty křivky záření absolutně černého tělesa, které prováděli lord Rayleigh, James Jeans a Wilhelm Wien, vedly k odlišným závislostem. Buď divergovaly v infračervené (IR), nebo v ultrafialové (UV) oblasti spektra.



Obr. 47: Záření absolutně černého tělesa.

Správnou formuli uhodnul až Max Planck v srpnu 1900 tím, že zkoušel porovnávat různé funkce s naměřenými údaji. Jeho výsledek zněl: $\mathrm{d}I/\mathrm{d}\omega \sim \omega^3 \exp[-\mathrm{const}\,\omega/T]$. Za další dva měsíce odvodil Planck tuto závislost i teoreticky za předpokladu, že energie světla o určité frekvenci ω se nemění spojitě, ale je celistvým násobkem základního energetického kvanta

$$E = \hbar\omega; \qquad \hbar = 1{,}05457\times10^{-34}\ \mathrm{Js}. \tag{2.1}$$

Veličina $\hbar$ se nazývá redukovaná Planckova konstanta (někdy také Planckova-Diracova konstanta). Planck původně použil předpoklad o kvantování energie pro zjednodušení matematických výpočtů. Později se ukázalo, že energie elektromagnetického záření určité frekvence je skutečně kvantována, tj. její pozorované hodnoty nejsou spojité, ale mění se skokem o základní energetické kvantum $\hbar\omega$.

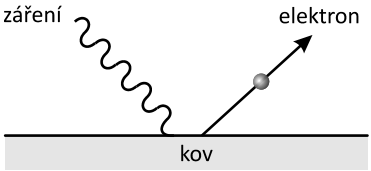
Poznámka: Planck ve svých úvahách použil namísto kruhové frekvence obyčejnou frekvenci, a tak měla jím zavedená konstanta úměrnosti jinou hodnotu:

$$E = h\nu; \qquad h = 2\pi\hbar = 6.62607\times10^{-34}\ \mathrm{Js}. \tag{2.2}$$

Skutečný fyzikální význam má redukovaná Planckova konstanta (je elementárním kvantem momentu hybnosti), kterou označujeme přeškrtnutým písmenem $\hbar$ a kterou budeme používat v této učebnici.

Fotoelektrický jev (fotoefekt)

Při dopadu světla (elektromagnetického záření) na povrch kovu může být z kovu vytržen elektron, který opustí povrch kovu. K uvolňování elektronů z kovu dochází při frekvencích světla vyšších než prahová frekvence ω_0, která je pro daný kov charakteristická. Máme-li k dispozici světlo s frekvencí nižší než prahovou, emise elektronů nenastane, byť bychom použili světlo se sebevětší intenzitou. Tento experiment je v rozporu s představou o světle jako elektromagnetickém vlnění. K fotoefektu by mělo docházet při každé frekvenci a dostatečnou energii k emisi by mělo jít získat zvýšením intenzity dopadajícího světla.



Obr. 48: Fotoelektrický jev.

Řešení podal Albert Einstein v roce 1905. Elektromagnetické vlnění se chová při fotoefektu jako částice. Tyto částice dnes nazýváme *fotony*. Energie jednoho fotonu záření o frekvenci ω je právě energie jednoho energetického kvanta (2.1). Vysvětlení fotoelektrického jevu je nyní velice jednoduché. Na povrchu kovu dochází ke srážce fotonu s elektronem. Aby foton vyrazil elektron, musí mít vyšší energii než je vazbová energie elektronu v kovu: $\hbar\omega \geq E_\mathrm{i}$. Prahová frekvence zřejmě je $\omega_0 = E_\mathrm{i}/\hbar$. Celková energetická bilance pro foton a elektron

► $$\hbar\omega = E_{\mathrm{i}} + \frac{1}{2} m_{\mathrm{e}} v^2 \tag{2.3}$$

se nazývá Einsteinova rovnice pro fotoefekt. Energie dopadlého fotonu se spotřebuje na vytržení elektronu z kovu a na kinetickou energii vylétávajícího elektronu. Elektromagnetické vlnění tedy můžeme považovat za soubor fotonů. Proto i při záření absolutně černého tělesa se mění energie záření o dané frekvenci skokem – tento skok představuje přírůstek nebo úbytek jednoho fotonu.

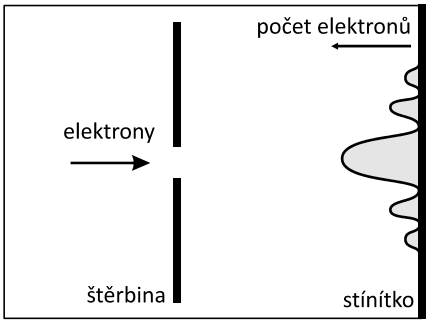
Poznámka: Albert Einstein získal za objasnění fotoelektrického jevu Nobelovu cenu za fyziku pro rok 1921. Jeho obecná relativita byla sice významnějším počinem, ale v té době ji mnoho fyziků považovalo spíže za kontroverzní hypotézu než za novou teorii gravitační interakce.

Comptonův jev

Arthur Compton v roce 1923 zjistil, že rentgenové paprsky odražené od povrchu grafitu mění svoji vlnovou délku. Podle klasických představ by vlny měly rozkmitat povrchové elektrony a ty generovat vlnu se stejnou frekvencí. Vysvětlení bylo nakonec jednoduché. Fotony se opět chovají jako částice, srážejí se s elektrony a při srážce ztrácí část energie, a proto mění svou vlnovou délku. V extrémně horkém plazmatu může docházet k opačnému jevu, fotony zde při srážkách s energetickými elektrony naopak energii získávají, hovoříme o tzv. *inverzním Comptonově jevu*.

Ohyb elektronů

Fotoelektrický jev ukázal, že vlnění se může chovat v určitých situacích jako částice. Naopak, někdy se částice chovají jako vlny. Například svazek elektronů procházející štěrbinou nebo dvojštěrbinou po dopadu na stínítko vytvoří typický ohybový obrazec. Nemůžeme předem říci, kam který elektron dopadne, ale při velkém množství elektronů můžeme určit pravděpodobnosti dopadu do konkrétního místa na stínítku. Vzniklý ohybový obrazec je tedy typickým statistickým jevem.



Obr. 49: Ohyb elektronu na štěrbině.

Dnes jsou vlnové vlastnosti elektronů využívány například v elektronových mikroskopech. Elektrony mají výrazně kratší vlnovou délku než viditelné světlo, a proto je rozlišovací schopnost elektronového mikroskopu podstatně vyšší než optického. Poprvé byly vlnové vlastnosti elektronu pozorovány americkými fyziky Clintonem Davissonem

a Lesterem Germerem v roce 1927. Zkoumali odraz elektronů od povrchu niklu. Po vyžíhání niklu došlo k rekrystalizaci a odražené elektrony začaly vykazovat na přesných velkých krystalech ohybový obrazec.

Poznámka: Částice popisujeme čtveřicí veličin (E, $\mathbf{p}$). Definice energie E a hybnosti $\mathbf{p}$ souvisí se symetriemi při posunutí v čase a v prostoru (viz teorém Noetherové v kapitole 1.2). Vlnění popisujeme čtveřicí veličin (ω, $\mathbf{k}$). Úhlová frekvence ω je definována jako změna fáze vlnění s časem $\omega = \partial\varphi/\partial t$ a vlnový vektor $\mathbf{k}$ je změnou fáze vlnění s prostorovými souřadnicemi $\mathbf{k} = \partial\varphi/\partial\mathbf{x}$. Při periodickém ději s konstantní periodou T v čase a λ v prostoru (vlnová délka) lze psát $\omega = 2\pi/T$, $k = 2\pi/\lambda$. Louis de Broglie vyslovil hypotézu, že objekty mikrosvěta se chovají jako vlny i jako částice (hovoříme o tzv. dualismu vln a částic). Převodní vztah dnes píšeme ve tvaru:

► $$E = \hbar\omega, \qquad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}. \tag{2.4}$$

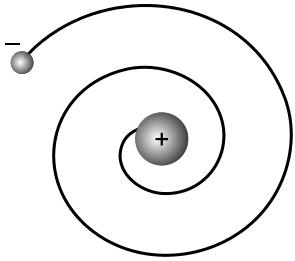
Pokud bychom používali přirozenou soustavu jednotek, která se volí tak, aby $\hbar = 1$, měly by vztahy (2.4) ještě jednodušší tvar. Často nás zajímá vlnová délka vlnění odpovídajícího konkrétní částici, například elektronu v elektronovém mikroskopu. Z druhého vztahu (2.4) máme $mv = 2\pi\hbar/\lambda$ a tedy

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{mv}. \tag{2.5}$$

Existence atomu

Podle klasického planetárního modelu atomu obíhají záporně nabité elektrony kolem kladně nabitého jádra tak, jako ve sluneční soustavě obíhají planety kolem Slunce. Planety jsou na oběžné dráze drženy gravitační silou, zatímco u elektronů v obalu je odstředivá síla vyrovnána přitažlivou Coulombovou silou.

Mezi gravitačními a elektromagnetickými jevy je ale podstatný rozdíl. Z Maxwellovy teorie elektromagnetického pole plyne, že každá nabitá částice, která se pohybuje se zrychlením, vyzařuje elektromagnetické vlnění a ztrácí tak energii. Při kruhovém pohybu elektronu kolem jádra se mění směr rychlosti, zrychlení $\mathrm{d}\mathbf{v}/\mathrm{d}t$ je nenulové (míří do centra atomu, jde o dostředivé zrychlení) a elektron ztrácí energii zářením. Měl by se proto pohybovat po spirále a nakonec dopadnout na jádro atomu. Tento proces by měl například pro vodík trvat pouhých 10^{-11} s. Podle klasické teorie by tedy za velice krátkou dobu neměly žádné atomy existovat! Na tento paradox upozornil poprvé dánský fyzik Niels Bohr.



Obr. 50: Paradox atomového obalu.

Niels Bohr vytvořil tzv. *Bohrův model atomu* na základě tří umělých postulátů, které přidal ke klasické teorii:

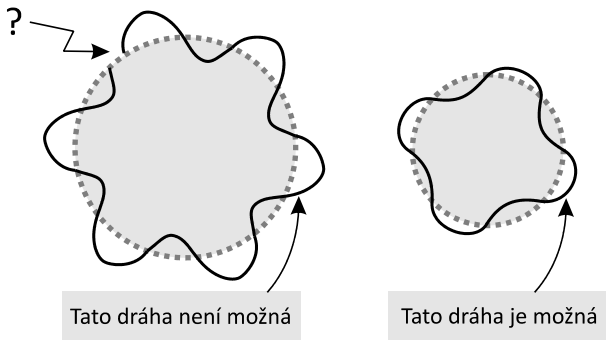
5) Elektrony se pohybují jen po tzv. *stacionárních drahách* – tj. po takových drahách, ve kterých je odpovídající de Broglieho vlnová délka ze vztahu (2.5) „namotána“ na oběžnou dráhu tj. obvod dráhy je *n*-násobkem vlnové délky. Výsledkem je jednoduchá kvantovací podmínka

$$2\pi r_n = n\lambda; \qquad \lambda = \frac{2\pi\hbar}{mv_n}. \tag{2.6}$$

Index *n* čísluje možné stavy elektronu v atomu (r_n možný poloměr dráhy, v_n rychlost na *n*-té dráze, E_n odpovídající energie) podle počtu vlnových délek elektronu na jeho oběžné dráze.

6) Na stacionární dráze elektron nezáří.

7) Při přeskoku elektronu mezi dvěma stacionárními hladinami dojde k vyzáření fotonu o energii odpovídající rozdílu energií těchto hladin.



Obr. 51: Bohrův model atomu.

Tento jednoduchý Bohrův model atomu není řešením výše uvedeného paradoxu, jde spíše o postulování nebo konstatování experimentálně známých skutečností. Navíc je tento model aplikovatelný jen na nejjednodušší atomy s jediným elektronem v atomárním obalu (H, He^+). Tento jednoduchý model ale poprvé správně určil hladiny energie elektronu v atomu vodíku a vysvětlil spektrum atomu vodíku.

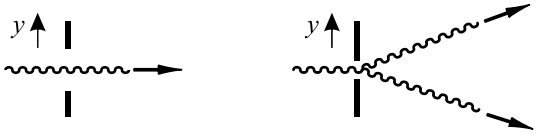
Heisenbergovy relace neurčitosti

Při měření polohy a hybnosti objektu mikrosvěta budou nepřesnosti měření Δx, Δp splňovat relaci, kterou objevil Werner Heisenberg

► $$\Delta x\,\Delta p \geq \frac{\hbar}{2}. \tag{2.7}$$

Čím přesněji určíme polohu objektu, tím méně přesně určíme odpovídající hybnost a naopak. Samotný akt měření ovlivňuje náš objekt, ale relace (2.7) je splněna i tehdy, neprovedeme-li měření vůbec. Jde o principiální hranici danou přírodou, za kterou nelze nahlédnout. Tato relace platí pro jakoukoli zobecněnou souřadnici a jí odpovídající zobecněnou hybnost.

Například obyčejný ohyb světla na štěrbině lze chápat jako důsledek relací neurčitosti pro fotony. Průchod fotonů štěrbinou není nic jiného než pokus o určení jejich polohy y s přesností Δy (velikost štěrbiny). Fotony, které prošly štěrbinou, určitě měly v okamžiku průchodu souřadnici y rovnou souřadnici y štěrbiny. Zmenšíme-li šířku štěrbiny Δy, zvýšíme přesnost měření y; podle relací (2.7) se ale zvýší nepřesnost Δp_y určení odpovídající složky hybnosti. Výsledkem je známý ohybový jev – fotony za štěrbinou vyletují do různých směrů se střední kvadratickou fluktuací hybnosti Δp_y danou Heisenbergovými relacemi neurčitosti.



Obr. 52: Ohyb částice na štěrbině a relace neurčitosti.

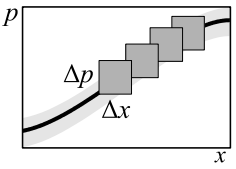
Výčet experimentálních faktů, které jsme uvedli výše, není zdaleka úplný. Všechny ale přispěly ke zrodu kvantové teorie popisující pro nás nezvyklý svět atomů a elementárních částic.

2.2 Základní principy kvantové teorie

Jak už víme, klasická mechanika selhala při popisu dějů mikrosvěta zejména proto, že je postavena na komutujících objektech. V mikrosvětě děje ale nekomutují. Základním cílem bude tedy místo dynamických proměnných používat nekomutující objekty (operátory) a nalézt vztah mezi operátory a reálnými měřitelnými veličinami. Základy matematiky, kterou je třeba znát pro pochopení kvantové teorie a pro studium této učebnice, naleznete v dodatku E, se kterým byste se měli seznámit, než budete číst dále.

2.2.1 Základní axiomy a definice

I. Redefinice stavu



V klasické mechanice je stav částice určen polohou a hybností. Vzhledem k tomu, že v mikrosvětě nelze současně tyto veličiny měřit a měření jedné ovlivní měření druhé, je nutné pojem stavu definovat novým způsobem. Fázové trajektorie již nelze v mikrosvětě popsat křivkami. Vnímáme je s přesností danou relacemi neurčitosti $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$. Můžeme si představit, že fázovou trajektorii vidíme rozmazanou čáru s rozlišením daným obdélníčkem o ploše $\hbar/2$ (pokud sledujeme jednu souřadnici a jí odpovídající hybnost). Zaveďme si nejprve některé pojmy.

Kompatibilita: Řekneme, že dvě dynamické proměnné jsou kompatibilní, jestliže měření jedné veličiny neovlivní měření veličiny druhé. Příkladem kompatibilních proměnných jsou souřadnice (x, y), příkladem nekompatibilních proměnných jsou souřadnice a jí odpovídající hybnost (x, p_x). Kompatibilita je symetrická vlastnost:

$$(A \text{ komp } B) \quad \Rightarrow \quad (B \text{ komp } A) \ . \tag{2.8}$$

Kompatibilita ale není tranzitivní vlastnost. Z toho, že $(x \text{ komp } y) \wedge (y \text{ komp } p_x)$ neplyne, že by muselo platit $(x \text{ komp } p_x)$. Obecně můžeme psát

$$(A \text{ komp } B) \wedge (B \text{ komp } C) \quad \not\Rightarrow \quad (A \text{ komp } C) \ . \tag{2.9}$$

Úplná množina pozorovatelných: Jde o maximální nezávislou množinu vzájemně kompatibilních dynamických proměnných. Jakákoli další dynamická proměnná už s nimi není kompatibilní. Například v nerelativistické teorii jsou nejznámější úplné množiny pozorovatelných (x, y, z) nebo (p_x, p_y, p_z). Pro centrální pole je úplnou množinou pozorovatelných také energie, druhá mocnina momentu hybnosti a jeho jedna složka (E, L^2, L_3). Současně lze tedy změřit všechny tři souřadnice nebo všechny tři složky hybností. Nelze již ale současně změřit všechny tři složky momentu hybnosti.

Stav systému: Řekneme, že známe stav systému, známe-li výsledek měření některé úplné množiny pozorovatelných. Stavem tedy nazveme jen to, co lze ve skutečnosti současně změřit.

Základním rysem nové teorie musí být nekomutující objekty – operátory. Místo dynamických proměnných z klasické mechaniky (souřadnice, hybnost, energie, moment hybnosti,…) budeme používat operátory (operátor souřadnice, hybnosti,…). Nekomu-

tativnost těchto operátorů bude vyjadřovat nekomutativnost aktu měření dynamických proměnných v mikrosvětě. Veličiny naměřené přístrojem v mikrosvětě jsou reálná čísla, někdy spojitá (poloha částice), někdy diskrétní (například jednotlivé hladiny energie elektronu vázaného v atomu). Jak získat z operátoru dynamické proměnné sadu reálných čísel spojitého nebo diskrétního charakteru? Takovou sadou je právě spektrum hermitovských operátorů (viz dodatek E). *Dynamickým proměnným budeme tedy přiřazovat hermitovské operátory*.

Každý operátor působí na prvky nějakého Hilbertova prostoru $\mathcal{H}$. Musíme se tedy ptát, jaký význam bude v naší teorii mít sám Hilbertův prostor a také prvky, na které operátory působí. Později uvidíme, že příliš nezáleží na volbě Hilbertova prostoru. Podstatné jsou spíše vztahy mezi dynamickými proměnnými, nyní operátory. Kvantová mechanika založená na prostoru $\mathcal{L}^2$ funkcí integrovatelných s kvadrátem je známá Schrödingerova vlnová mechanika vedoucí na Schrödingerovu rovnici a vlnové funkce. Kvantová teorie založená na prostoru l^2 posloupností sčitatelných s kvadrátem je Heisenbergova maticová mechanika. Obě teorie se na první pohled zdají naprosto odlišné. Přesto vlastní čísla operátorů v obou teoriích jsou stejná a obě teorie tak dávají stejné předpovědi. Hilbertův prostor se všemi svými prvky a s operátory, které na prvky působí, koresponduje s vlastnostmi celého systému z klasické mechaniky. *Místo systému budeme proto v kvantové teorii hovořit o Hilbertově prostoru daného systému* (například Hilbertův prostor elektronu).

Zbývá rozluštit poslední hádanku – k čemu jsou prvky Hilbertova prostoru? Již v úvodu jsme si řekli, že v mikrosvětě sám akt měření ovlivní stav systému. Před měřením je systém v jiném stavu než po měření. Akt měření dynamické proměnné zastupuje v kvantové teorii hermitovský operátor této proměnné. Působením tohoto operátoru na prvek prostoru dostáváme jiný prvek tohoto prostoru. A to je přesně to, co hledáme. *Prvky (vektory) prostoru tedy představují stav systému*. Akt měření koresponduje s působením příslušného operátoru na stav (prvek prostoru) a nový stav je prvek, který vznikl působením operátoru.

Vlastní číslo operátoru prezentuje naměřenou hodnotu a vypovídá tak o stavu systému. Víme už, že násobky každého vlastního vektoru jsou opět vlastním vektorem. V $\mathcal{H}$ tedy existuje k danému vlastnímu číslu celý vlastní směr (paprsek). Stavu systému proto musí odpovídat celý paprsek v $\mathcal{H}$, nikoli jen jeden jediný vektor. Přicházíme tak ke třem základním *axiomům* kvantové teorie, které říkají, jak spolu korespondují klasické a kvantové pojmy:

systém	$\rightarrow$	Hilbertův prostor $\mathcal{H}$
stav systému	$\rightarrow$	paprsek natažený na $\|\psi>$
dynamická proměnná A	$\rightarrow$	hermitovský operátor $\hat{\mathbf{A}}$

S linearitou budované teorie se pojí velmi důležitý princip:

■ **Princip superpozice:** Nechť $|\varphi> \in \mathcal{H}$ a $|\psi> \in \mathcal{H}$ a reprezentují dva různé stavy systému. Potom je každý vektor $\alpha_1|\varphi> + \alpha_2|\psi>$ také fyzikálně realizovatelný stav. Bez tohoto požadavku by nebylo možné vybudovat lineární teorii. Navíc jde o již výše zmíněnou vlastnost kvantového světa. Systém v mikrosvětě může být (na rozdíl od makrosvěta) v superpozici více stavů.

II. Měření v kvantové teorii

Akt měření dynamické proměnné A v nějakém stavu znamená aplikaci operátoru $\hat{\mathbf{A}}$ této dynamické proměnné na daný stav $|\psi>$. Operátorem $\hat{\mathbf{A}}$ a stavem $|\psi>$ musí tedy být zcela jednoznačně dáno, co je a co není možné na systému naměřit. Odpověď na tuto otázku poskytují tzv. *interpretační postuláty*:

■ **Postulát A:** Měříme-li dynamickou proměnnou A, můžeme na systému naměřit jen některou z vlastních hodnot $\{a_j\}$ operátoru $\hat{\mathbf{A}}$ této dynamické proměnné:

$$\hat{\mathbf{A}}|j> = a_j\ |j> . \tag{2.10}$$

■ **Postulát B:** Pozorování dynamické proměnné A na systému, který byl připraven ve vlastním stavu $|j>$ operátoru $\hat{\mathbf{A}}$, vede zcela jistě k naměření vlastní hodnoty a_j.

■ **Postulát C:** Je-li systém připraven v obecném stavu $|\psi> \in \mathcal{H}$, vede opakované měření veličiny A k různým výsledkům a_j. Střední hodnota těchto opakovaných měření bude rovna

$$< A > = < \psi | \hat{\mathbf{A}} | \psi > . \tag{2.11}.$$

Poznámka 1: Opakovaná měření si nemusíme představovat tak, že bychom na stejném systému opakovali neustále tatáž měření. V praxi by to nebylo proveditelné. Těžko můžeme na jednom jediném elektronu zopakovat nějaké měření. Musíme mít připraveno velké množství systémů ve stejném stavu (například svazek elektronů) a opakovat měření na mnoha různých elektronech (systémech).

Poznámka 2: Výraz pro střední hodnotu je nejjednodušším možným výrazem složeným z operátoru $\hat{\mathbf{A}}$ a stavu $|\psi>$, který dá jako výsledek reálné číslo. Střední hodnotu bývá zvykem označovat $<A>$ nebo $\overline{A}$.

Poznámka 3: Automaticky předpokládáme, že stavové vektory jsou normovány k jedné. Není-li stavový vektor normován, musíme výraz pro střední hodnotu vydělit ještě kvadrátem normy stavového vektoru:

► $$< A > = \frac{< \psi | \hat{\mathbf{A}} | \psi >}{< \psi | \psi >} . \tag{2.12}$$

Poznámka 4: Výraz pro střední hodnotu rozepsaný v prostoru $\mathcal{L}^2(\mathcal{R}^3)$ dá:

$$< A > = \frac{\int \psi^*(\mathbf{x})\, \hat{\mathbf{A}}\, \psi(\mathbf{x})\, d^3\mathbf{x}}{\int \psi^*(\mathbf{x})\, \psi(\mathbf{x})\, d^3\mathbf{x}} . \tag{2.13}$$

Poznámka 5: Jsou-li všechny systémy připraveny ve vlastním stavu $|j>$ operátoru $\hat{\mathbf{A}}$, dá střední hodnota daná postulátem C samozřejmě příslušnou vlastní hodnotu podle postulátu B a všechna měření dají v tomto výjimečném případě stejný výsledek (přes j se nesčítá):

$$< A > = \frac{< j | \hat{\mathbf{A}} | j >}{< j | j >} = \frac{a_j < j | j >}{< j | j >} = a_j .$$

III. Statistická interpretace stavového vektoru

Rozvineme-li stavový vektor do ortonormální spočetné báze $|\, n >$ nebo nespočetné báze $|\, x >$, bude mít rozvoj tvar (viz dodatek E)

$$|\,\psi> = \sum |\, n><n\,|\,\psi> = \sum \psi_n\,|\, n> \text{ resp.}$$
$$|\,\psi> = \int |\, x><x\,|\,\psi>\mathrm{d}x = \int \psi(x)|\, x>\mathrm{d}x\,. \tag{2.14}$$

Koeficienty rozvoje ψ_n, respektive $\psi(x)$ chápeme jako *amplitudu pravděpodobnosti*, že systém nalezneme ve stavu $|\, n >$, respektive $|\, x >$. K tomu nás opravňuje fakt, že jde o projekce stavového vektoru do patřičného prvku báze. Z normovanosti stavu k jedné okamžitě plyne

$$\sum \psi_n^* \psi_n = 1\,, \text{ resp.} \qquad \int \psi^*(x)\psi(x)\mathrm{d}x = 1 \tag{2.15}$$

a výrazy

► $$w_n = \psi_n^* \psi_n\,, \text{ resp.} \qquad w(x) = \psi^*(x)\psi(x) \tag{2.16}$$

proto chápeme jako pravděpodobnost realizace stavu $|\, n >$ resp. hustotu pravděpodobnosti nalezení systému ve stavu $|\, x >$. Pravděpodobnosti jsou automaticky normovány k jedné. Druhý ze vztahů (2.14) představuje superpozicí systému v několika polohách.

IV. Princip korespondence

Posledním ze základních principů kvantové teorie je princip korespondence. Vymezuje, které části z teoretické mechaniky je možné převzít v kvantové teorii.

■ **Princip korespondence pro základní relace.** Základní relace mezi dynamickými proměnnými v teoretické mechanice a příslušnými operátory v kvantové mechanice se mohou lišit jen pořadím operátorů.

■ **Princip korespondence pro algebru Poissonových závorek.** Struktura Poissonových závorek v teoretické mechanice je shodná se strukturou komutátorů v kvantové teorii:

$$\begin{matrix} A \to \hat{\mathbf{A}} \\ B \to \hat{\mathbf{B}} \\ C \to \hat{\mathbf{C}} \end{matrix} \qquad \Rightarrow \qquad \{A,B\} = C \to [\hat{\mathbf{A}},\hat{\mathbf{B}}] = k\,\hat{\mathbf{C}}\,.$$

První část principu korespondence platí pro jednoduché relace mezi dynamickými proměnnými, které neobsahují derivace. Například definice Hamiltonovy funkce v potenciálním poli V

$$H \equiv \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V(x,y,z) \tag{2.17}$$

přejde v definici Hamiltonova operátoru

► $$\hat{\mathbf{H}} \equiv \frac{\hat{\mathbf{P}}_x^2 + \hat{\mathbf{P}}_y^2 + \hat{\mathbf{P}}_z^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{X}},\hat{\mathbf{Y}},\hat{\mathbf{Z}})\,. \tag{2.18}$$

Výraz pro potenciální energii je typickou funkcí operátoru (viz dodatek E). Pro výrazy typu $A = xp$ nelze kvantový analog jednoznačně určit. Může jím být buď

$$\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{X}}\hat{\mathbf{P}}, \text{ nebo } \hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{P}}\hat{\mathbf{X}}.$$

Operátory nekomutují, a proto záleží na jejich pořadí. Správná varianta z obou možných musí být vybrána na základě experimentu. Stejně tak můžeme z různých Lagrangeových funkcí téhož systému obdržet různé kvantové teorie a správnou variantu je třeba opět vybrat na základě toho, jak se ve skutečnosti chová příroda.

Druhá část principu korespondence se týká Poissonových závorek – výrazů, které v klasické mechanice obsahují derivace dynamických proměnných. Poissonovým závorkám v kvantové teorii odpovídají komutátory dynamických proměnných. Nelze však položit rovnost mezi komutační relací a Poissonovou závorkou. Důvody jsou hned dva:

1) *rozměrový*: Poissonova závorka obsahuje derivace, které do výrazů vnášejí fyzikální rozměr, komutátory nikoli. Proto je třeba použít rozměrový převodní koeficient k.
2) *principiální*: Dynamickým proměnným v kvantové teorii můžeme přiřazovat jen hermitovské operátory (mají reálná vlastní čísla, která interpretujeme jako měřitelné hodnoty). Jsou-li operátory odpovídající A a B hermitovské, musí být operátor odpovídající C také hermitovský. To lze opět zajistit pomocí konstanty k.

Určeme nyní podmínku na konstantu k, která plyne z požadavku hermitovosti operátorů:

$$\begin{aligned}
[\hat{\mathbf{A}},\hat{\mathbf{B}}] &= k\hat{\mathbf{C}} \\
\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}} - \hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{A}} &= k\hat{\mathbf{C}} \qquad /\,^{\dagger} \\
\hat{\mathbf{B}}^{\dagger}\hat{\mathbf{A}}^{\dagger} - \hat{\mathbf{A}}^{\dagger}\hat{\mathbf{B}}^{\dagger} &= k^{*}\hat{\mathbf{C}}^{\dagger} \qquad /\,\hat{\mathbf{O}}^{\dagger} = \hat{\mathbf{O}} \\
\hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{A}} - \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}} &= k^{*}\hat{\mathbf{C}} \\
-[\hat{\mathbf{A}},\hat{\mathbf{B}}] &= k^{*}\hat{\mathbf{C}}.
\end{aligned}$$

Při úpravě jsme použili vztah (E.18) pro hermitovské sdružení součinu dvou operátorů. Porovnáme-li počáteční a koncový výraz, musí platit $k^{*} = -k$. To ale splňují jen ryze imaginární čísla. Převodní konstanta tedy musí mít tvar:

$$k = \mathrm{i}\hbar. \tag{2.19}$$

Konstanta $\hbar$ je nějaké reálné číslo a je jedinou fundamentální konstantou kvantové teorie. Tato konstanta se bude vyskytovat ve všech předpovědích kvantové teorie (například v energetickém spektru elektronu vázaného v atomech, ve vztazích pro záření absolutně černého tělesa, v Heisenbergových relacích neurčitosti atd.). Její hodnotu je možné změřit experimentálně na základě těchto předpovědí a je rovna:

► $$\hbar = 1{,}054572\times10^{-34}\ \mathrm{J\,s}. \tag{2.20}$$

Jde o tzv. redukovanou Planckovu konstantu. Princip korespondence pro Poissonovy závorky můžeme stručně zapsat jako

► $$\{A,B\} \rightarrow \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{\mathbf{A}},\hat{\mathbf{B}}]. \tag{2.21}$$

Tím jsme zakončili přehled základních principů kvantové teorie. Jelikož jde o základní neodvoditelné principy, na kterých teorii stavíme, bylo by možné jen stroze vypsat axiomy, postuláty a principy označené v této kapitole čtverečkem. Doplňující texty se snaží jen poukázat na to, že právě tato volba základních axiomů je přirozená a povede k cíli. O správnosti základních principů však mohou rozhodnout jedině experimenty ověřující výpovědi z těchto principů plynoucí.

2.2.2 Kompatibilita měření a Heisenbergovy relace

Rozhodnout o tom, zda se měření dvou dynamických proměnných ovlivňují či nikoli, je jednoduché. Stačí znát komutátor operátorů těchto proměnných. Je-li tento komutátor nulový, je

$$\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}} = \hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{A}} \tag{2.22}$$

a měření se neovlivňují. Základní komutátory pro souřadnice a hybnosti můžeme odvodit z principu korespondence, ostatní už pak z vlastností komutátorů. Pro Poissonovy závorky mezi souřadnicemi a hybnostmi platí vztah (1.42):

$$\{x_k, x_l\} = \{p_k, p_l\} = 0\,, \qquad \{x_k, p_l\} = \delta_{kl}\,. \tag{2.23}$$

Tomu odpovídají podle principu korespondence komutační relace:

► $$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{X}}_k,\ \hat{\mathbf{X}}_l] = [\hat{\mathbf{P}}_k,\ \hat{\mathbf{P}}_l] = 0, \\ [\hat{\mathbf{X}}_k,\ \hat{\mathbf{P}}_l] = \mathrm{i}\hbar\hat{\mathbf{1}}\delta_{kl}\,. \end{aligned} \tag{2.24}$$

Z nich je zřejmé, že současně lze u objektu změřit všechny tři souřadnice nebo hybnosti. Také se vzájemně neovlivní měření například souřadnice x a hybnosti p_y. *Jediná měření, která se vzájemně ovlivňují a u kterých záleží na pořadí měření* (nenulový komutátor) *je měření zobecněné souřadnice a jí odpovídající zobecněné hybnosti*.

Rovnice (2.24) jsou základními komutačními relacemi v kvantové teorii. Bylo by samozřejmě možné hledat ostatní složitější komutační relace také z Poissonových závorek. Výhodnější je ale odvozovat je ze základních relací (2.24) a vlastností Lieovy algebry komutátorů. Tím se oprostíme od klasické mechaniky a nemusíme se k ní při každé komutační relaci vracet. Kvantová mechanika začíná „žít vlastním životem“. To, co přebrala z klasické mechaniky prostřednictvím principu korespondence, jsou jen relace (2.24) mezi souřadnicemi a hybnostmi.

Odvoďme nyní komutační relaci mezi první a druhou složkou momentu hybnosti:

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{L}}_1, \hat{\mathbf{L}}_2] &= [\hat{\mathbf{X}}_2\hat{\mathbf{P}}_3 - \hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{P}}_2, \hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{P}}_1 - \hat{\mathbf{X}}_1\hat{\mathbf{P}}_3] = \\ &= [\hat{\mathbf{X}}_2\hat{\mathbf{P}}_3, \hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{P}}_1] - [\hat{\mathbf{X}}_2\hat{\mathbf{P}}_3, \hat{\mathbf{X}}_1\hat{\mathbf{P}}_3] - [\hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{P}}_2, \hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{P}}_1] + [\hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{P}}_2, \hat{\mathbf{X}}_1\hat{\mathbf{P}}_3] = \\ &= \hat{\mathbf{X}}_2[\hat{\mathbf{P}}_3, \hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{P}}_1] + [\hat{\mathbf{X}}_2, \hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{P}}_1]\hat{\mathbf{P}}_3 - \hat{\mathbf{X}}_2[\hat{\mathbf{P}}_3, \hat{\mathbf{X}}_1\hat{\mathbf{P}}_3] - [\hat{\mathbf{X}}_2, \hat{\mathbf{X}}_1\hat{\mathbf{P}}_3]\hat{\mathbf{P}}_3 - \\ &- \hat{\mathbf{X}}_3[\hat{\mathbf{P}}_2, \hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{P}}_1] - [\hat{\mathbf{X}}_3, \hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{P}}_1]\hat{\mathbf{P}}_2 + \hat{\mathbf{X}}_3[\hat{\mathbf{P}}_2, \hat{\mathbf{X}}_1\hat{\mathbf{P}}_3] + [\hat{\mathbf{X}}_3, \hat{\mathbf{X}}_1\hat{\mathbf{P}}_3]\hat{\mathbf{P}}_2 = \\ &= \hat{\mathbf{X}}_2\hat{\mathbf{X}}_3[\hat{\mathbf{P}}_3, \hat{\mathbf{P}}_1] + \hat{\mathbf{X}}_2[\hat{\mathbf{P}}_3, \hat{\mathbf{X}}_3]\hat{\mathbf{P}}_1 + \hat{\mathbf{X}}_3[\hat{\mathbf{X}}_2, \hat{\mathbf{P}}_1]\hat{\mathbf{P}}_3 + [\hat{\mathbf{X}}_2, \hat{\mathbf{X}}_3]\hat{\mathbf{P}}_1\hat{\mathbf{P}}_3 - \\ &- \hat{\mathbf{X}}_2\hat{\mathbf{X}}_1[\hat{\mathbf{P}}_3, \hat{\mathbf{P}}_3] - \hat{\mathbf{X}}_2[\hat{\mathbf{P}}_3, \hat{\mathbf{X}}_1]\hat{\mathbf{P}}_3 - \hat{\mathbf{X}}_1[\hat{\mathbf{X}}_2, \hat{\mathbf{P}}_3]\hat{\mathbf{P}}_3 - [\hat{\mathbf{X}}_2, \hat{\mathbf{X}}_1]\hat{\mathbf{P}}_3\hat{\mathbf{P}}_3 - \\ &- \hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{X}}_3[\hat{\mathbf{P}}_2, \hat{\mathbf{P}}_1] - \hat{\mathbf{X}}_3[\hat{\mathbf{P}}_2, \hat{\mathbf{X}}_3]\hat{\mathbf{P}}_1 - \hat{\mathbf{X}}_3[\hat{\mathbf{X}}_3, \hat{\mathbf{P}}_1]\hat{\mathbf{P}}_2 - [\hat{\mathbf{X}}_3, \hat{\mathbf{X}}_3]\hat{\mathbf{P}}_1\hat{\mathbf{P}}_2 + \end{aligned}$$

$$+\hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{X}}_1[\hat{\mathbf{P}}_2,\hat{\mathbf{P}}_3]+\hat{\mathbf{X}}_3[\hat{\mathbf{P}}_2,\hat{\mathbf{X}}_1]\hat{\mathbf{P}}_3+\hat{\mathbf{X}}_1[\hat{\mathbf{X}}_3,\hat{\mathbf{P}}_3]\hat{\mathbf{P}}_2+[\hat{\mathbf{X}}_3,\hat{\mathbf{X}}_1]\hat{\mathbf{P}}_3\hat{\mathbf{P}}_2=$$
$$=0-\hat{\mathbf{X}}_2[\hat{\mathbf{X}}_3,\hat{\mathbf{P}}_3]\hat{\mathbf{P}}_1+0+0-0-0-0-0-0-0-0-0-0+0+0+\hat{\mathbf{X}}_1[\hat{\mathbf{X}}_3,\hat{\mathbf{P}}_3]\hat{\mathbf{P}}_2+0=$$
$$=-\mathrm{i}\hbar\hat{\mathbf{X}}_2\hat{\mathbf{1}}\hat{\mathbf{P}}_1+\mathrm{i}\hbar\hat{\mathbf{X}}_1\hat{\mathbf{1}}\hat{\mathbf{P}}_2=\mathrm{i}\hbar(\hat{\mathbf{X}}_1\hat{\mathbf{P}}_2-\hat{\mathbf{X}}_2\hat{\mathbf{P}}_1)=\mathrm{i}\hbar\hat{\mathbf{L}}_3.$$

Je jasné, že postup je velmi zdlouhavý, ale přímočarý. Hledanou komutační relaci postupně „rozmělňujeme“ podle pravidel Lieovy algebry až na elementární relace mezi souřadnicemi a hybnostmi. Prakticky všechny symbolicky orientované programy či programovací jazyky bez problémů tuto úlohu řeší za nás a obsahují balíky pro výpočet komutačních relací.

Analogickým postupem můžeme nalézt komutační relace pro ostatní složky momentu hybnosti. Není to ale nutné, stačí je získat cyklickou záměnou souřadnicových os ($1 \to 2 \to 3 \to 1$). Kompletní komutační relace pro moment hybnosti potom jsou:

$$\begin{aligned}[\hat{\mathbf{L}}_1,\hat{\mathbf{L}}_2]&=\mathrm{i}\hbar\hat{\mathbf{L}}_3\,,\\ [\hat{\mathbf{L}}_2,\hat{\mathbf{L}}_3]&=\mathrm{i}\hbar\hat{\mathbf{L}}_1\,,\\ [\hat{\mathbf{L}}_3,\hat{\mathbf{L}}_1]&=\mathrm{i}\hbar\hat{\mathbf{L}}_2\,.\end{aligned}\qquad(2.25)$$

Výsledkem je, že současně není možné změřit žádné dvě složky momentu hybnosti. Měření každé složky ovlivní měření kterékoli jiné složky. Zaveďme operátor kvadrátu velikosti momentu hybnosti

$$\hat{\mathbf{L}}^2\equiv\hat{\mathbf{L}}_1^2+\hat{\mathbf{L}}_2^2+\hat{\mathbf{L}}_3^2\,.\qquad(2.26)$$

Stejným postupem jako dříve dopočteme komutační relace kvadrátu momentu s jednotlivými složkami. Tentokráte při „rozmělňování“ komutační relace postačí dostat se jen k relacím (2.25) pro moment hybnosti. Jejich výsledek už známe. Výpočet provedeme například pro třetí složku:

$$[\hat{\mathbf{L}}^2,\hat{\mathbf{L}}_3]=[\hat{\mathbf{L}}_1^2+\hat{\mathbf{L}}_2^2+\hat{\mathbf{L}}_3^2,\hat{\mathbf{L}}_3]=[\hat{\mathbf{L}}_1^2,\hat{\mathbf{L}}_3]+[\hat{\mathbf{L}}_2^2,\hat{\mathbf{L}}_3]+[\hat{\mathbf{L}}_3^2,\hat{\mathbf{L}}_3]=$$
$$\hat{\mathbf{L}}_1[\hat{\mathbf{L}}_1,\hat{\mathbf{L}}_3]+[\hat{\mathbf{L}}_1,\hat{\mathbf{L}}_3]\hat{\mathbf{L}}_1+\hat{\mathbf{L}}_2[\hat{\mathbf{L}}_2,\hat{\mathbf{L}}_3]+[\hat{\mathbf{L}}_2,\hat{\mathbf{L}}_3]\hat{\mathbf{L}}_2+0+0=$$
$$-\mathrm{i}\hbar\hat{\mathbf{L}}_1\hat{\mathbf{L}}_2-\mathrm{i}\hbar\hat{\mathbf{L}}_2\hat{\mathbf{L}}_1+\mathrm{i}\hbar\hat{\mathbf{L}}_2\hat{\mathbf{L}}_1+\mathrm{i}\hbar\hat{\mathbf{L}}_1\hat{\mathbf{L}}_2=0\,.$$

Stejný výsledek dostaneme pro jakoukoli složku:

$$[\hat{\mathbf{L}}^2,\hat{\mathbf{L}}_k]=0\,,\qquad k=1,2,3\,.\qquad(2.27)$$

Není tedy možné současně změřit dvě různé složky momentu hybnosti. Vždy je ale možné změřit kvadrát velikosti momentu hybnosti a jednu z jeho libovolných složek, zpravidla se používá třetí složka. Ze zatím provedených úvah je zřejmé, že současně můžeme měřit dynamické proměnné $\{x, y, z\}$ nebo $\{p_x, p_y, p_z\}$ nebo $\{L^2, L_3\}$. V kapitole 2.5 uvidíme, že v případě sféricky symetrického potenciálu je s poslední množinou kompatibilní ještě energie, tj. úplnou množinu pozorovatelných tvoří trojice $\{E, L^2, L_3\}$.

Nalezli jsme tedy jednoduchý postup, pomocí kterého zjistíme, které veličiny lze současně měřit a které ne. Postačí nalézt komutátor odpovídajících operátorů. Tento postup nám ale umožní odpověď typu ano/ne. V případě, že dynamické proměnné spolu současně měřit nelze, nás zajímá, jak moc naruší akt měření jedné proměnné akt měření proměnné druhé. Na tuto otázku odpovídají Heisenbergovy relace neurčitosti, které si

nyní odvodíme. Předtím si uveďme přehled základních statistických pojmů a jejich operátorových analogií v kvantové teorii:

statistika		**kvantová teorie**	
střední hodnota	$\overline{a}$	střední hodnota	$\overline{a} \equiv <\psi \mid \hat{\mathbf{A}} \mid \psi>$
odchylka	$\Delta a \equiv a - \overline{a}$	operátor odchylky	$\Delta \hat{\mathbf{A}} \equiv \hat{\mathbf{A}} - \overline{a}\,\hat{\mathbf{1}}$
průměr odchylek	$\overline{\Delta a} = 0$	průměr odchylek	$<\psi \mid \Delta \hat{\mathbf{A}} \mid \psi> = 0$
variance	$\overline{(\Delta a)^2} = \overline{a^2} - \overline{a}^2$	variance	$<\psi \mid \Delta \hat{\mathbf{A}}^2 \mid \psi> = <\psi \mid \hat{\mathbf{A}}^2 \mid \psi> - <\psi \mid \hat{\mathbf{A}} \mid \psi>^2$
střední kvadratická odchylka	$\Delta a_{\mathrm{kv}} = \sqrt{\overline{(\Delta a)^2}}$	střední kvadratická odchylka	$\Delta a_{\mathrm{kv}} = \sqrt{<\psi \mid \Delta \hat{\mathbf{A}}^2 \mid \psi>}$

Zkuste si dokázat oba dva statistické vztahy v klasické statistice i v kvantové teorii. V obou případech stačí jen dosadit z příslušných definic. Nyní již můžeme přistoupit k odvození relací neurčitosti. Předpokládejme, že máme dvě nekompatibilní proměnné:

$$A, B \to \hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}\,; \qquad [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}] = \hat{\mathbf{C}}\,. \tag{2.28}$$

Nalezněme součin středních kvadratických chyb měření:

$$\begin{aligned}
(\Delta a_{\mathrm{kv}})^2 (\Delta b_{\mathrm{kv}})^2 &= <\psi \mid (\Delta \hat{\mathbf{A}})^2 \mid \psi><\psi \mid (\Delta \hat{\mathbf{B}})^2 \mid \psi> \overset{(*1)}{=} \\
&= <\Delta \hat{\mathbf{A}}\psi \mid \Delta \hat{\mathbf{A}}\psi><\Delta \hat{\mathbf{B}}\psi \mid \Delta \hat{\mathbf{B}}\psi> = \| \Delta \hat{\mathbf{A}}\psi \|^2 \cdot \| \Delta \hat{\mathbf{B}}\psi \|^2 \overset{(*2)}{\geq} \\
&\geq |<\Delta \hat{\mathbf{A}}\psi \mid \Delta \hat{\mathbf{B}}\psi>|^2 = |<\psi \mid \Delta \hat{\mathbf{A}}\Delta \hat{\mathbf{B}}\mid \psi>|^2 \overset{(*3)}{=} \\
&= |<\psi \mid \frac{1}{2}(\Delta \hat{\mathbf{A}}\Delta \hat{\mathbf{B}} + \Delta \hat{\mathbf{B}}\Delta \hat{\mathbf{A}}) \;+\; \frac{1}{2}(\Delta \hat{\mathbf{A}}\Delta \hat{\mathbf{B}} - \Delta \hat{\mathbf{B}}\Delta \hat{\mathbf{A}}) \mid \psi>|^2 \overset{(*4)}{\geq} \\
&\geq |<\psi \mid \frac{1}{2}(\Delta \hat{\mathbf{A}}\Delta \hat{\mathbf{B}} - \Delta \hat{\mathbf{B}}\Delta \hat{\mathbf{A}}) \mid \psi>|^2 \;= \\
&= |\frac{1}{2}<\psi \mid [\Delta \hat{\mathbf{A}}, \Delta \hat{\mathbf{B}}] \mid \psi>|^2 \overset{(*5)}{=} \\
&= |\frac{1}{2}<\psi \mid [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}] \mid \psi>|^2 \;= \\
&= |\frac{1}{2}<\psi \mid \hat{\mathbf{C}} \mid \psi>|^2 .
\end{aligned}$$

Při odvození byly použity tyto triky a postupy (ve výpočtu označené hvězdičkou):

(1) využití hermitovosti operátorů;
(2) Schwartzovo lemma (viz dodatek E);
(3) rozdělení na symetrickou (S) a antisymetrickou (D) část;
(4) symetrická část S je reálná (je součtem dvou navzájem komplexně sdružených čísel), antisymetrická část D je naopak ryze imaginární (je rozdílem dvou navzájem komplexně sdružených čísel) a tvoří dohromady komplexní číslo, pro které platí $|S+D| = |x+iy| = (x^2+y^2)^{1/2} \geq |y| = |D|$;
(5) jednotkový operátor v definici $\Delta\hat{\mathbf{A}}$ komutuje s čímkoli.

Po odmocnění posledního výrazu dostáváme konečný tvar Heisenbergových relací:

► $$\Delta a_{\mathrm{kv}}\,\Delta b_{\mathrm{kv}} \;\geq\; \frac{1}{2}|<\psi\,|\,\hat{\mathbf{C}}\,|\,\psi>|\,. \tag{2.29}$$

Známe-li výsledek komutační relace operátorů příslušících dvěma dynamickým proměnným, můžeme z Heisenbergových relací určit míru ovlivnění jednoho měření druhým. Toto vzájemné ovlivnění výsledků měření závisí na stavu, ve kterém je systém připraven. Jen jsou-li obě dynamické proměnné ve vztahu *zobecněná souřadnice – zobecněná hybnost*, nezávisí vzájemné ovlivnění na stavu systému:

$$[\hat{\mathbf{X}},\hat{\mathbf{P}}] = \mathrm{i}\,\hbar\,\hat{\mathbf{1}} \qquad \Rightarrow \qquad \Delta x\,\Delta p \;\geq\; \frac{\hbar}{2}|<\psi\,|\,\hat{\mathbf{1}}\,|\,\psi>| \;=\; \frac{\hbar}{2}|<\psi\,|\,\psi>| \;=\; \frac{\hbar}{2}\,.$$

To je nejznámější tvar relací neurčitosti

► $$\Delta x\,\Delta p \geq \frac{\hbar}{2}\,. \tag{2.30}$$

Jde o první měřitelný výsledek námi budované teorie, který obsahuje Planckovu konstantu. Heisenbergovy relace jsou velmi důležitým rysem kvantové teorie, se kterým musíme při posuzování jevů v mikrosvětě počítat. V úvodu jsme již zmínili příklad štěrbiny, kterou prolétá paprsek světla. Je-li štěrbina dostatečně široká, nedojde k výraznému ohybu světla. Hybnost fotonů ve směru štěrbiny známe téměř přesně (je přibližně nulová, fotony letí kolmo na rovinu štěrbiny), ale neznáme místo, kterým foton štěrbinou prošel. Pokud štěrbinu výrazně zúžíme, získáme sice přesnější informaci o poloze fotonu, nicméně dojde k ohybu světla a ztratíme informaci o hybnosti fotonu ve směru štěrbiny. Akt měření polohy zhoršil dostupnou informaci o odpovídající hybnosti.

Jiným příkladem je elektron v atomárním obalu. Je lokalizovaný v určité malé oblasti (řádově 10^{-10} m, přesnou polohu samozřejmě neznáme) a tomu musí odpovídat určitá hybnost (resp. rychlost) ve shodě s Heisenbergovými relacemi neurčitosti. Elektron se nemůže například v atomárním obalu „zastavit“. Obdobná situace panuje v krystalické látce při velmi nízké teplotě. Se snižováním teploty látky se snižuje chaotický pohyb částic, nicméně tento pohyb se nemůže nikdy zcela zastavit. Pokud by při absolutní nule ustal veškerý pohyb látky, nacházely by se ionty přesně ve vrcholech krystalické mříže (znali bychom přesně jejich polohu) a nehýbaly by se (znali bychom přesně jejich hybnost, byla by nulová). Znalost obou veličin odporuje Heisenbergovým relacím neurčitosti. Krystal bude i při absolutní nule vykonávat tzv. nulové kmity. Absolutní nula není stav látky s nulovým pohybem částic, ale stav s minimálním možným pohybem, který připouštějí zákony kvantové mechaniky. Ze stejného důvodu není nejnižší energetický stav harmonického oscilátoru nulový, ale harmonický oscilátor vždy vykonává alespoň tzv. nulové kmity (viz kapitola 2.3).

Jak jsme viděli, relace neurčitosti ve tvaru (2.30) platí pro jakoukoli zobecněnou souřadnici a jí odpovídající zobecněnou hybnost. Není proto možné například současně změřit u kyvadla úhel a jemu odpovídající moment hybnosti. Obecně pro každé dvě kanonicky sdružené proměnné (q, p) platí

► $$\Delta q \, \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}. \tag{2.31}$$

V teoretické mechanice jsme se zabývali také Lagrangeovou formulací teorie elektromagnetického pole (viz kapitola 1.6). Viděli jsme, že potenciály elektromagnetického pole můžeme chápat jako spojitou zobecněnou souřadnici a že k nim existuje odpovídající kanonicky sdružená hybnost pole. Pro obě veličiny opět platí Heisenbergovy relace neurčitosti, a tak není možné, aby ve vakuu bylo současně nulové pole i jeho kanonicky sdružená hybnost. Vakuum není tedy prostor bez polí, ale s minimálním množstvím různých fluktuací všech možných polí, které nám připouštějí zákony kvantové mechaniky. Situace je velmi podobná definici absolutní nuly. Skutečné vakuum nemůže být díky kvantové teorii nikdy prázdné, půjde o netriviální dynamický systém plný fluktuací různých polí. Tyto fluktuace se mohou projevovat dočasnou kreací párů částice-antičástice. Takový pár po dosti krátké době opět zanikne.

Relace neurčitosti odvozené ve tvaru (2.30) platí pro všechny tři složky polohového vektoru objektu. V rámci relativity jsou ale prostorové složky součástí čtyřvektoru (ct, $\mathbf{x}$), stejně tak jako hybnosti jsou součástí čtyřvektoru (E/c, $\mathbf{p}$). Rychlost světla v časové oblasti čtyřvektorů pouze zajišťuje, aby měly všechny čtyři složky stejný rozměr. Relace neurčitosti je možné napsat i pro časovou složku čtyřvektorů:

► $$\Delta E \, \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}. \tag{2.32}$$

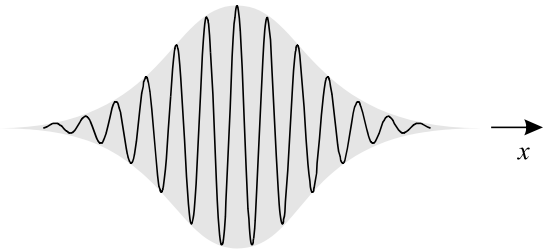
Ve shodě s tímto vztahem může ve vakuu jakoby z ničeho vzniknout pár částice-antičástice s celkovou energií ΔE, pokud zase zanikne v době kratší než $\Delta t = \hbar/(2\Delta E)$. Takový proces sice porušuje zákon zachování energie, jde o jakési vypůjčení si energie z vakua „na dluh“, nicméně pro nás bude nepozorovatelný, protože porušuje relace neurčitosti (2.32). K těmto procesům skutečně ve vakuu dochází, důsledkem neustálého vzniku a zániku elektron-pozitronových párů je například pozorovatelná polarizace vakua nebo Lambův posuv spektrálních čar. Spekuluje se o tom, že zrychlená expanze vesmíru, která byla objevena Adamem Riessem a Saulem Perlmutterem v roce 1998, by mohla mít původ v netriviálním chování kvantového vakua.

Vztah (2.32) můžeme také uplatnit při popisu vzniku spektrálních čar v atomárním obalu. Pokud přeskok elektronu mezi dvěma hladinami trvá konečnou dobu Δt, nebude mít vzniklý foton přesně definovanou energii, minimální neurčitost energie bude $\Delta E \sim \hbar/(2\Delta t)$ a spektrální čára nebude nikdy dokonale ostrá – bude mít vždy konečnou šířku danou relacemi neurčitosti (jde o statistický jev způsobený mnoha přeskoky elektronů, jež jsou zodpovědné za vznik spektrální čáry).

Relace neurčitosti platí v podobě (2.29) i pro proměnné, které nejsou vzájemně kanonicky sdružené. Míra ovlivnění jednoho měření druhým potom závisí na stavu, ve kterém se systém nachází. Například operátory kinetické a potenciální energie zpravidla vzájemně nekomutují. To má za následek, že není současně přesně zjistitelná kinetická i potenciální energie a částice se může (na rozdíl od klasické fyziky) „přehoupnout“ přes potenciálovou bariéru. Jde o tzv. tunelový jev, který je dalším zajímavým důsledkem kvantové mechaniky a jehož podstata tkví v Heisenbergových relacích neurčitosti.

◖ Příklad 38: Gaussův vlnový balík

Ukažme nyní, že pokud má částice vlnovou funkci ve tvaru Gaussova balíku, platí pro ni $\Delta x \Delta p = \hbar/2$, tj. v Heisenbergových relacích neurčitosti (2.30) platí rovnost a aktem měření lze získat maximální možnou informaci. Veškeré potřebné integrály k výpočtu jednotlivých kroků tohoto příkladu naleznete v dodatku G.



Obr. 54: Gaussův vlnový balík.

Předpokládejme, že vlnová funkce ve tvaru balíku má tvar, ve kterém je základní vlna dána funkcí $\cos(k_0 x)$ a obálka je tvarována Gaussovou exponenciální funkcí:

► $$\psi(x) \approx \cos(k_0 x)\, \mathrm{e}^{-\alpha x^2} \,. \tag{2.33}$$

Vlnový vektor vlny je k_0, tomu odpovídá z částicově-vlnové duality hybnost popisovaného objektu $\hbar k_0$. V exponenciální notaci včetně normování k jedné budou mít vlnová funkce a jí odpovídající pravděpodobnost tvar, viz vztah (G.4):

$$\begin{aligned} \psi(x) &= (2\alpha/\pi)^{1/4}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0 x}\, \mathrm{e}^{-\alpha x^2} \,; \\ w(x) &\equiv \psi^* \psi = (2\alpha/\pi)^{1/2}\, \mathrm{e}^{-2\alpha x^2} \,. \end{aligned} \tag{2.34}$$

V případě zahrnutí časového vývoje by naše vlnová funkce měla ještě časovou část. Spočtěme nyní střední polohu, střední hodnotu kvadrátu polohy a střední kvadratickou fluktuaci. Výpočty jsou přímočaré za pomoci vztahů z dodatku G:

$$\begin{aligned} &< x > = \int_{-\infty}^{+\infty} x\, w(x)\, \mathrm{d}x = 0 \,; \\ &< x^2 > = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2\, w(x)\, \mathrm{d}x = 1/(4\alpha) \,; \\ &\Delta x \equiv \sqrt{< x^2 > - < x >^2} = 1/\sqrt{4\alpha} \,. \end{aligned} \tag{2.35}$$

Naši vlnovou funkci můžeme rozložit do jednotlivých Fourierových komponent za pomoci Fourierovy transformace (je definována například v [1], dodatek B4)

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathscr{A}(k)\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\, \mathrm{d}k \,; \\ \mathscr{A}(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\, \mathrm{d}x \,. \end{aligned} \tag{2.36}$$

Výpočet provedeme doplněním argumentu v exponenciále na čtverec.

$$\mathscr{A}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\, \mathrm{d}x =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0 x}\, \mathrm{e}^{-\alpha x^2}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\, \mathrm{d}x =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\alpha[x^2 - \mathrm{i}(k-k_0)x/\alpha]}\, \mathrm{d}x =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \mathrm{e}^{-(k-k_0)^2/(4\alpha)} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\alpha[x - \mathrm{i}(k-k_0)x/(2\alpha)]^2}\, \mathrm{d}x =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \mathrm{e}^{-(k-k_0)^2/(4\alpha)} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\alpha[x-x_0]^2}\, \mathrm{d}x =$$

$$= \frac{1}{(2\pi\alpha)^{1/4}} \mathrm{e}^{-(k-k_0)^2/(4\alpha)}\,.$$

Pro amplitudu $\mathscr{A}(k)$ máme tedy finální vztah

► $$\mathscr{A}(k) = \frac{1}{(2\pi\alpha)^{1/4}} \mathrm{e}^{-(k-k_0)^2/(4\alpha)}\,. \tag{2.37}$$

Amplitudu $\mathscr{A}(k)$ lze chápat jako vlnovou funkci v k prostoru (resp. v hybnostním prostoru, protože $p = \hbar k$) a její kvadrát je hustotou pravděpodobnosti v k prostoru:

$$w_p(k) = \mathscr{A}^* \mathscr{A} = \frac{1}{(2\pi\alpha)^{1/2}} \mathrm{e}^{-(k-k_0)^2/(2\alpha)}\,. \tag{2.38}$$

Snadno zkontrolujeme, že pravděpodobnost je již správně normovaná, tj. $\int w_p(k)\, \mathrm{d}k = 1$. Jako další krok určíme střední hodnoty hybnosti a kvadrátu hybnosti objektu:

$$< p > = \int_{-\infty}^{+\infty} \hbar k\, w_p(k)\, \mathrm{d}k = \hbar k_0\,;$$

► $$< p^2 > = \int_{-\infty}^{+\infty} (\hbar k)^2\, w_p(k)\, \mathrm{d}k = \hbar^2\alpha + \hbar^2 k_0^2\,; \tag{2.39}$$

$$\Delta p \equiv \sqrt{< p^2 > - < p >^2} = \hbar\sqrt{\alpha}\,.$$

Nyní již máme vše potřebné k sestavení levé strany Heisenbergovy relace neurčitosti:

► $$\Delta x \Delta p = \frac{1}{\sqrt{4\alpha}} \hbar\sqrt{\alpha} = \frac{\hbar}{2}\,. \tag{2.40}$$

Gaussův vlnový balík tedy minimalizuje Heisenbergovy relace neurčitosti. Jinými slovy: *minimum Heisenbergových relací neurčitosti se nabývá pro Gaussův vlnový balík.*

◗

2.2.3 Vlastní stavy energie, Schrödingerova rovnice

V minulé kapitole jsme se naučili rozhodnout, které dynamické proměnné lze společně měřit a které ne. Pomocí Heisenbergových relací neurčitosti jsme schopni i kvalitativně postihnout míru narušení jednoho měření měřením druhým. Nyní se budeme věnovat druhé základní úloze kvantové mechaniky: nalézt spektrum operátoru energie – hodnoty energie, které je možné na systému naměřit. Úlohu můžeme zformulovat například takto:

$$\hat{\mathbf{H}} \mid n> = E_n \mid n>, \tag{2.41}$$

$$\hat{\mathbf{H}} \equiv \frac{\hat{\vec{\mathbf{P}}}^2}{2m} + V(\hat{\vec{\mathbf{X}}}) = \frac{\hat{\mathbf{P}}_x^2 + \hat{\mathbf{P}}_y^2 + \hat{\mathbf{P}}_z^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{Y}}, \hat{\mathbf{Z}}), \tag{2.42}$$

$$\left[\hat{\mathbf{X}}_k, \hat{\mathbf{X}}_l\right] = \left[\hat{\mathbf{P}}_k, \hat{\mathbf{P}}_l\right] = 0, \qquad \left[\hat{\mathbf{X}}_k, \hat{\mathbf{P}}_l\right] = \mathrm{i}\hbar\, \hat{\mathbf{1}}\, \delta_{kl}. \tag{2.43}$$

Budeme hledat vlastní hodnoty operátoru energie (Hamiltonova operátoru) ze vztahu (2.41). Tato rovnice pro vlastní hodnoty Hamiltonova operátoru se nazývá *Schrödingerova rovnice*. Operátor energie (Hamiltonův operátor) je dán vztahem (2.42). Základní operátory, ze kterých je složen Hamiltonův operátor, podléhají komutačním relacím (2.24), resp. (2.43). Nezáleží příliš na tom, jaký Hilbertův prostor zvolíme. V příští kapitole uvidíme řešení harmonického oscilátoru v různých prostorech $\mathcal{H}$, vždy dostaneme stejné spektrum Hamiltonova operátoru. Na daném prostoru je nejpodstatnější zvolit Hermitovy operátory zobecněných souřadnic a hybností tak, aby splňovaly komutační relace (2.43).

Ukažme si nyní přepis Schrödingerovy rovnice v prostoru $\mathcal{L}^2(\mathcal{R}^3)$ funkcí integrovatelných s kvadrátem na celém prostoru $\mathcal{R}^3$. Nejjednodušším operátorem na tomto prostoru je operátor násobení souřadnicí. Tento operátor ztotožníme s operátorem souřadnice:

$$\hat{\mathbf{X}} = x; \qquad \hat{\mathbf{Y}} = y; \qquad \hat{\mathbf{Z}} = z. \tag{2.44}$$

Nyní zbývá nalézt hermitovské operátory pro hybnost tak, aby splňovaly komutační relace (2.43). Operátor derivace a operátor násobení souřadnicí splňují v jedné dimenzi komutační relaci (viz příklad E6, dodatek E)

$$[\hat{\mathbf{D}}, \hat{\mathbf{X}}] = \hat{\mathbf{1}}, \text{ resp} \qquad [\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{D}}] = -\hat{\mathbf{1}} \tag{2.45}$$

Je zřejmé, že relaci (2.43) splňuje v jedné dimenzi operátor

► $$\hat{\mathbf{P}} \equiv -\mathrm{i}\hbar\, \mathrm{d}/\mathrm{d}x. \tag{2.46}$$

Pokud operátor souřadnice zvolíme jako pouhé násobení souřadnicí, má operátor (2.46) význam operátoru hybnosti. Samotný operátor derivace není hermitovský, ale operátor derivace vynásobený ryze imaginární konstantou již hermitovský je (viz příklad E8 v dodatku E). Ve třech dimenzích postupujeme zcela analogicky. Pokud požadujeme, aby operátory souřadnice měly jednoduchý tvar (2.44) a přitom platily relace (2.43), musí mít operátor hybnosti tvar

$$\hat{\mathbf{P}}_x = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x};$$

► $$\hat{\mathbf{P}}_y = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial y}; \tag{2.47}$$

$$\hat{\mathbf{P}}_z = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial z},$$

neboli

► $$\hat{\vec{\mathbf{P}}} = -\mathrm{i}\hbar\nabla. \tag{2.48}$$

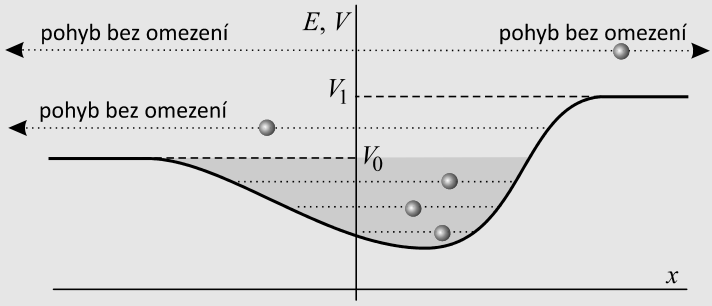
Schrödingerova rovnice (2.41) s operátorem energie (2.42), volbou prostoru $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathcal{R}^3)$ a operátory (2.44) a (2.47) vede potom na slavnou Schrödingerovu rovnici v tzv. x reprezentaci (operátor souřadnice je reprezentován násobením souřadnicí):

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{x})\right]\psi_n(\mathbf{x}) \;=\; E_n\,\psi_n(\mathbf{x}). \tag{2.49}$$

Řešení Schrödingerovy rovnice pro konkrétní potenciál V poskytne spektrum operátoru energie $\{E_n\}$ jakožto množinu možných měřitelných hodnot energie pro daný potenciál.

Poznámka 1: Řešení rovnice (2.49) lze nalézt pro každou hodnotu energie. Ne vždy je však toto řešení z prostoru $\mathcal{L}^2(\mathcal{R}^3)$. Je proto vždy třeba vybrat z možných řešení jen ta, která jsou integrovatelná s kvadrátem, tj. do nekonečna ubývají dostatečně rychle, aby zajistila integrovatelnost.

Poznámka 2: Existuje jednoduchý způsob, jak odhadnout typ spektra pro daný potenciál. Může-li se v klasické mechanice částice vzdálit do nekonečna, je spektrum operátoru energie spojité. Nemůže-li se ani v jednom směru vzdálit do nekonečna, je spektrum operátoru energie diskrétní.

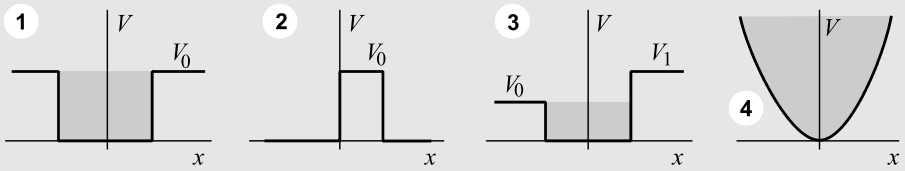


Obr. 55: Pohyby v potenciální energii s minimem

Připomeňme, že v klasické mechanice se částice může pohybovat tam, kde je její celková energie větší než potenciální. To plyne ze vztahu $E = mv^2 + V(x)$. Jde vlastně o podmínku nezápornosti kinetické energie. V nakreslené situaci je pro $E < V_0$ spektrum energie diskrétní, pro $E > V_0$ spojité.

Ukázky potenciálů

U jednorozměrného potenciálu může nabývat poloha objektu x jakékoli reálné hodnoty, tj. platí $x \in (-\infty, +\infty)$



Obr. 56: Ukázky jednorozměrných potenciálů.

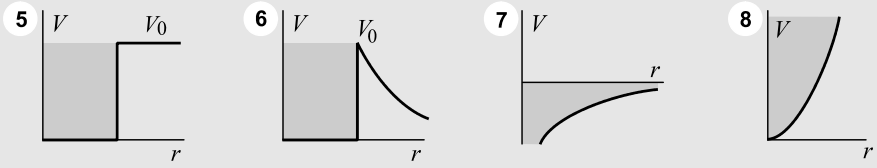
1. Symetrická pravoúhlá jáma. Částice v jámě má diskrétní spektrum energie pro $E < V_0$, kde se v klasickém případě nemůže vzdálit do nekonečna. Tato oblast je zobrazena šedou barvou. Pro $E > V_0$ má částice v tomto potenciálu spojité spektrum energie. Pro nekonečnou jámu ($V_0 \to \infty$) je spektrum jen diskrétní.

2. Bariéra. Částice se v klasickém případě vždy může vzdálit do nekonečna. V kvantové teorii tomu odpovídá zcela spojité spektrum energie.

3. Nesymetrická pravoúhlá jáma. Částice má diskrétní spektrum pro $E < V_0$, kde se v klasickém případě nemůže vzdálit do nekonečna. Spektrum energie je spojité pro $E > V_0$, kdy se v klasickém případě může vzdálit buď na jednu stranu ($E > V_0$ a současně $E < V_1$), nebo na obě strany ($E > V_1$).

4. Harmonický oscilátor. Harmonický oscilátor má parabolický průběh potenciální energie. Částice v klasickém případě osciluje a nikdy se nemůže vzdálit do nekonečna. Tomu odpovídá v kvantové teorii diskrétní spektrum energie.

V následujících ukázkách uvažujeme sféricky symetrické pole, kdy je potenciální energie jen funkcí radiální souřadnice, tj. $V = V(r)$. Na samotnou radiální souřadnici klademe omezení $r \geq 0$, tj. částice nemůže mít zápornou hodnotu radiální souřadnice.



Obr. 57: Ukázky třírozměrných potenciálů.

5. Sférická jáma. Částice ve sférické jámě má diskrétní spektrum energie pro $E < V_0$, spojité spektrum energie pro $E > V_0$. V podobném potenciálu se pohybuje například neutron v atomovém jádře.

6. Coulombova bariéra. Průběh potenciálu je kombinací potenciálu sférické jámy a potenciálu Coulombova odpuzování. V podobném potenciálu se pohybuje proton nebo α částice v atomovém jádře. Částice má diskrétní spektrum energie pro $E < V_0$,

spojité spektrum energie pro $E > V_0$. Existuje nenulová pravděpodobnost průniku vzniklou potenciálovou bariérou. Tomuto jevu říkáme tunelový jev. Je způsoben tím, že operátory kinetické a potenciální energie spolu nekomutují.

7. Coulombův přitažlivý potenciál. Částice má diskrétní spektrum energie pro $E < 0$, spojité pro $E > 0$. V podobném potenciálu se pohybuje elektron v atomárním obalu. Stavy se zápornou energií jsou vázané stavy, stavy s kladnou energií jsou volné, tj. elektron není vázán k atomovému jádru.

8. Sférický harmonický oscilátor. Částice má v tomto potenciálu jen diskrétní stavy energie. Systém je při vychýlení do kteréhokoli směru vracen do počátku podle předpisu $V(r) = 1/2\ kr^2$.

2.2.4 Různé interpretace kvantové teorie

Kvantová teorie je první teorií, jejíž součástí je samotný experiment. Není pochyb, že experiment provedený v mikrosvětě ovlivní objekty mikrosvěta a změní jejich stav. Při experimentu je z mnoha možných výsledků měření vybrán právě jeden jediný. Způsob, jakým k tomu dochází, je spíše filosofickou než fyzikální otázkou a různé skupiny fyziků mají na průběh samotného aktu měření různé názory. Kvantová teorie je elegantní matematickou konstrukcí, jejíž výsledky jsou v mimořádně přesném souladu s prováděnými experimenty. U mnoha částí kvantové teorie ale zcela selhává naše představivost a tzv. „zdravý selský rozum“. Objekty mikrosvěta už nemůžeme ztotožnit s našimi důvěrně známými kuličkami, mají jiné, mnohem bohatší vlastnosti. Příkladem může být vnitřní moment hybnosti, tzv. spin, jehož existence plyne z Lorentzovy symetrie (dva experimenty provedené ve dvou inerciálních souřadnicových soustavách, jež se vzájemně pohybují rovnoměrně přímočaře, dopadnou stejně). Představit si spin je téměř nemožné. Dokážeme spočítat, jak se skládá s momentem hybnosti částice, víme jaké má projevy, jak způsobuje štěpení spektrálních čar v magnetickém poli nebo jak je zodpovědný za vazbu molekul. Můžeme si přestavit, že elektron obíhá kolem jádra (moment hybnosti) a navíc se točí kolem vlastní osy (spin), ale jde jen o představu, která má ke skutečnosti velmi daleko. Elektron ani neobíhá kolem jádra a ani nerotuje kolem nějaké osy. Někdy je ale i špatná představa lepší než žádná. Šlo o jeden příklad za všechny, v kvantové teorii je mnoho věcí nepředstavitelných a neuchopitelných našimi nedokonalými smysly, které nejsou uzpůsobeny pro pozorování mikrosvěta. V následujícím textu se seznámíme s některými názory na úlohu kvantové teorie při popisu reálného světa.

Kodaňská interpretace

Kodaňská interpretace vznikala v Kodani v letech 1924 až 1927. Dnes jde o nejrozšířenější názor na kvantovou teorii. Autory kodaňské interpretace jsou především Niels Bohr a Werner Heisenberg, který byl od roku 1926 Bohrovým asistentem. Kvantová teorie není schopna předpovědět přesně výsledek měření, ale jen hodnoty, které je možné naměřit, a pravděpodobnost, s jakou se tak stane. Ta je rovna kvadrátu vlnové funkce (2.16). Před měřením je systém v superpozici stavů. Tato superpozice je vše, co je možné se o systému dozvědět. V průběhu měření systém přejde do jednoho ze stavů této superpozice. Akt měření se chová jako projekční operátor, který ze superpozice stavů vybere jednu konkrétní projekci, jeden konkrétní stav. Pokud systém popisujeme za pomoci vlnové funkce, říkáme, že dojde k tzv. *kolapsu vlnové funkce*.

Původní vlnová funkce je před aktem měření rozprostřená v prostoru a poskytuje nenulovou hustotu pravděpodobnosti ($\psi^*\psi$) výskytu částice (objektu) v různých místech prostoru. V průběhu měření se musí pravděpodobnost dramaticky změnit, neboť po měření je částice lokalizována v konkrétním místě $\mathbf{x}_0$, kde ji naleznul detektor. Ke stejně prudké změně musí těsně před měřením dojít u celé vlnové funkce. Kolaps vlnové funkce se děje naráz v celém prostoru, a je proto nelokálním procesem. Právě nelokálnost aktu měření a vůbec nelokálnost kvantové teorie v některých situacích byla terčem velké kritiky zastánců lokálních teorií (v daném místě je změna ovlivněna jen nekonečně malým okolím tohoto místa).



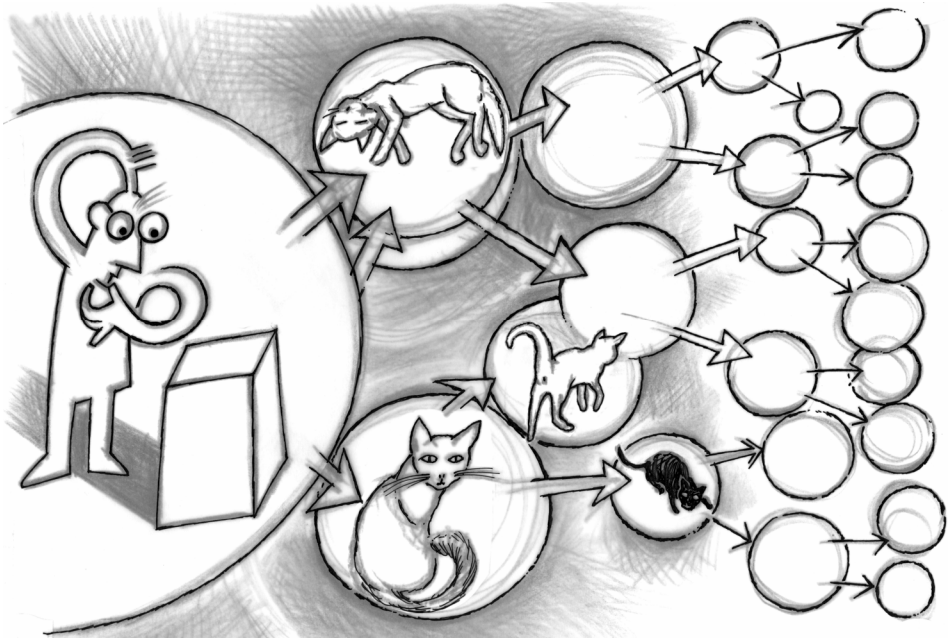
Obr. 58: Paradox Schrödingerovy kočky.

Kodaňskou interpretaci lze využívat jen pro objekty mikrosvěta. Při její aplikaci na makroskopické objekty dostáváme zjevně nesmyslné výsledky, nejznámější ukázkou je tzv. paradox Schrödingerovy kočky – myšlenkový experiment, který předložil Erwin Schrödinger. Kočka je uzavřena v neprůhledné krabici, kde je umístěna sklenička se smrtícím jedem. Kladivo, které skleničku rozbije, je ovládáno pomocí náhodného radioaktivního rozpadu. Po určité době je padesátiprocentní šance, že došlo k rozbití skleničky a usmrcení kočky. Dokud ale neotevřeme krabici a nepřesvědčíme se o skutečném stavu kočky, je kočka z hlediska kvantové teorie v superpozici obou dvou možných stavů: $|$ mrtvá kočka $>$ a $|$ živá kočka $>$. Teprve akt měření způsobí kolaps vlnové funkce kočky a pro nás bude definitivně živá nebo mrtvá. Z tohoto myšlenkového experimentu je zřejmé, že kvantovou teorii nemůžeme aplikovat na makroskopický objekt. Pak ale nutně vzniká otázka: Kde je hranice mezi kvantovým světem, ve kterém platí kvantové zákony, a makrosvětem, kde zjevně neplatí?

Klasická interpretace

Autorem klasické interpretace je Albert Einstein, který se nikdy nesmířil se statistickou (neboli kodaňskou) interpretací kvantové teorie. Vyjádřil to známou větou: „*Bůh nehraje v kostky*.“ Podle Einsteina je fakt, že systém je před měřením v superpozici stavů, důsledkem a odrazem naší neznalosti všech mikroskopických parametrů systému. Při měření pak vybíráme jednu z možností jen zdánlivě. Ta by byla jednoznačně dána, kdybychom měli veškerou informaci o objektu. O teoriích tohoto typu se hovoří jako o *teorii se skrytými parametry*. Dnes je tato interpretace vyloučena na základě potvrzení neplatnosti tzv. Bellových nerovností v kvantových systémech (viz kapitola 2.9.4). Einsteinovi i dalším vadila kromě statistické interpretace kvantové teorie také její nelokálnost a nemožnost současného měření některých veličin. Einstein spolu s Podolským a Rosenem zformulovali v roce 1935 myšlenkový experiment (viz kapitola 2.9.3), který měl ukázat na vnitřní spornost kvantové teorie. Dnešní pohled zde žádný spor nevidí.

Mnohasvětová interpretace



Obr. 59: Mnohasvětová interpretace paradoxu Schrödingerovy kočky.

Mnohasvětové chápání kvantové teorie zavedl americký fyzik Hugh Everett roku 1957. Velkým zastáncem a propagátorem mnohosvětové interpretace byl v 60. a 70. letech 20. století americký teoretik Bryce DeWitt. Podstatou je myšlenka, že při měření se v našem světě realizuje jeden ze stavů superpozice. V jiných paralelních světech (vesmírech) se realizují ostatní možnosti. Vše, co se může stát, se stane, ale v různých vesmírech, které paralelně koexistují. Akt měření je tak chápán jako větvení světočáry objektu. U paradoxu Schrödingerovy kočky je kočka až do provedení měření skutečně v superpozici dvou stavů | mrtvá > a | živá >. Pokud zjistíme, že je například | živá >, bude se tento stav realizovat v našem vesmíru. V nějakém jiném vesmíru se bude realizovat stav | mrtvá >. Není jasné, zda tato interpretace přináší nějaká nová měřitelná fakta.

Holografická interpretace

Americko-anglický teoretický fyzik David Bohm (1917–1992) výrazně přispěl k pochopení nelokálnosti kvantové teorie. Objekty, jako jsou subatomární částice, vnímáme vzájemně oddělené, protože vidíme jen část jejich reality. Vzájemné sepjetí celku nemá nic společného s umístěním částice v prostoru a v čase, které vnímáme. Měřením na jedné části celku se můžeme dozvědět informace o jiné části, která se nám jeví jako prostorově vzdálená. Každá částice je součástí tohoto nedílného celku, který měl při velkém třesku jednu jedinou vlnovou funkci. Dnes je celek je zahrnut do každé jeho části. Nelokálnost je proto kvantové teorii vlastní. Často se při této interpretaci vyjadřuje souhrnným potenciálem, který všechny částice ovlivňují a na který každá z nich reaguje. Všechno, co existuje ve fyzikální realitě, je uloženo v menších částech a vesmír sám je obrazem tohoto základu, který můžeme nazvat *hologramem* (z menšího celku je možné rekonstruovat větší celek, ten již není skutečností, ale jen jakýmsi obrazem skutečnosti, kterou vnímáme svými smysly). Tato interpretace přináší nový úhel pohledu na nelokálnost kvantové teorie a v budoucnu by mohla sehrát roli při pochopení stavby kvantové teorie.

Interpretace související s vědomím

Se zajímavou interpretací kvantové teorie přišel v roce 1932 maďarský matematik John von Neumann (mj. autor prvního návrhu architektury dnes používaných počítačů). Neuman předpokládal, že kolaps vlnové funkce do určitého stavu při aktu měření způsobí vědomí pozorovatele. Pozorovatel je přirozenou součástí kvantového světa a jeho vědomí může ovlivnit výsledek experimentu. Zastáncem této myšlenky se stal i maďarsko-americký teoretik Eugene Wigner. Obecně nebyla tato interpretace mezi fyziky přijata. Opět je diskutabilní, zda vůbec přináší nová, měřením ověřitelná fakta.

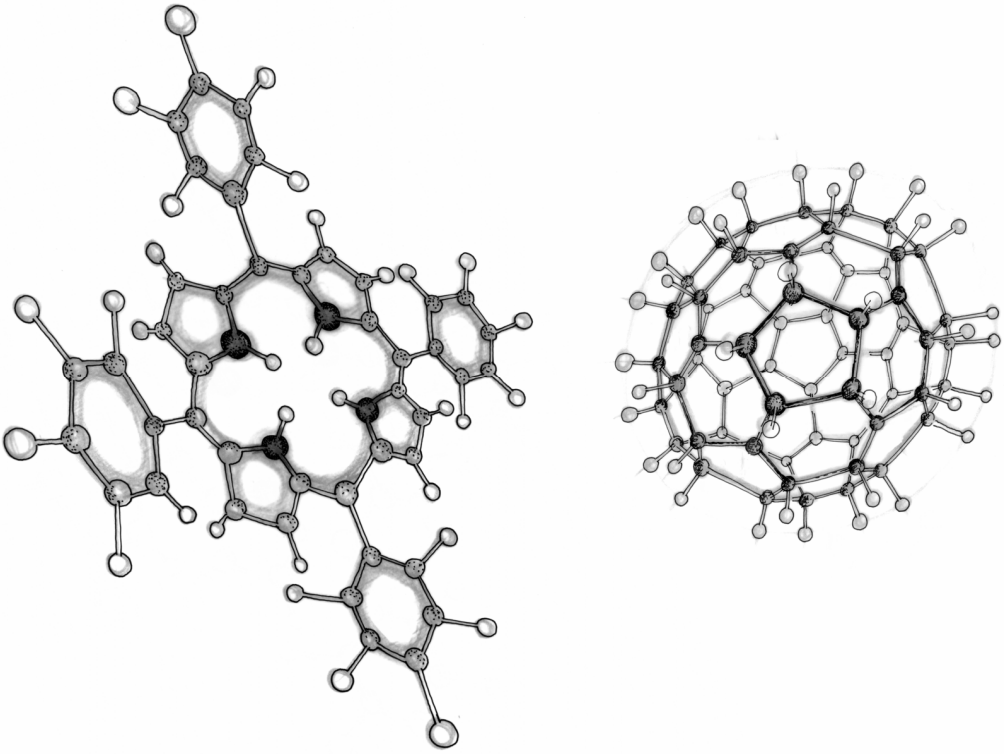
Hranice kvantového světa

Elektron je zcela nepochybně částice kvantového světa se všemi svými podivnými vlastnostmi – někdy se chová jako částice, jindy jako vlna, může být v několika stavech naráz atd. Pokud mu dáme do cesty dvě štěrbiny vhodné šířky a vzdálenosti, neprojde jen jednou z nich, jako částice makrosvěta. Využije superpozice stavů a projde oběma štěrbinami naráz. Oba stavy budou poté interferovat, a tak elektron vlastně interferuje v jistém smyslu sám se sebou. Na stínítku se po dopadu mnoha elektronů objeví interferenční obrazec. Budete-li na dvojštěrbinu házet klasické kamínky nebo kuličky, objeví se na stínítku jen dvě maxima (proti každé štěrbině). Kamínek nemůže být v superpozici stavů a nemůže interferovat sám se sebou.

Pokud vysíláme dostatečný počet elektronů, místa jejich dopadu nebudou proti štěrbinám, jako u klasických kuliček, ale vytvoří proužky obdobné interferenčnímu jevu u vlnění. Tyto proužky nezmizí, ani když bude proud elektronů natolik řídký, že bude v prostoru detektoru v daném okamžiku maximálně jeden jediný elektron. Naopak proužky zmizí, existuje-li principiální možnost detekce polohy elektronu.

Kde je hranice mezi oběma světy? Do jakých rozměrů se částice chovají kvantově, interferují samy se sebou a jsou (pro nás) podivnými objekty mikrosvěta? A kdy nastoupí klasické chování, které je nám tak důvěrně známé? Experimenty prováděné Antonem Zeilingrem a jeho kolegy z Vídeňské univerzity kolem roku 2005 ukázaly, že žádná ostrá hranice neexistuje. Vědci prováděli experimenty s obřími molekulami, které procházely Talbotovým interferometrem (štěrbin je zde větší množství). Největší mole-

kula $C_{60}F_{48}$ v sobě měla 1 632 nukleonů a měla přibližně kulový tvar. Vídeňský tým ale zkoušel použít i molekuly jiných tvarů, například plošnou molekulu porphyrinu.



Obr. 60: Molekuly porphyrinu (nalevo) a fulerenu $C_{60}F_{48}$ (napravo) byly používány při víceštěrbinových experimentech ve Vídni.

Ukázalo se, že schopnost interferovat sama se sebou tato molekula měla jen tehdy, pokud nijak neinteragovala s okolím a nebylo principiálně možné zjistit její polohu (kterou štěrbivou prošla). Interferenční obrazec se objevoval s poklesem tlaku v aparatuře (nebylo možné detekovat polohu obřích molekul z odrazu atomů atmosféry od těchto molekul). Interferenční obrazec se také objevoval s poklesem teploty. Při nízkých teplotách již molekula nevysílala žádné fotony, ze kterých by se dalo určit, kde se nachází. Závěr je jednoduchý. Objekty se chovají kvantově, pokud nemohou interagovat s okolím, a klasicky, pokud interagují s okolím. V takovém případě říkáme, že mají provázané stavy s okolím, což znamená, že vlnovou funkci objektu spolu s okolím nelze separovat na prostý součin, v němž jedna část závisí pouze na proměnných objektu a druhá pouze na proměnných popisujících okolí.

Pokud tedy chcete, aby se váš kamarád choval kvantově, stal se vlnou a interferoval sám se sebou, musíte ho zamrazit téměř na absolutní nulu (nebude již vysílat žádné fotony) a dát do vakua, kde s ním nebudou interagovat žádné molekuly okolních plynů. V tu chvíli nebudete mít s kamarádem žádnou interakci a nebudete vědět, kde je. Začne se chovat jako kvantový objekt, bude interferovat sám se sebou a třeba projde i více štěrbinami naráz. Alespoň současné experimenty s obřími molekulami to naznačují. Samozřejmě ale může existovat nějaká další principiální hranice mezi kvantovým světem a makrosvětem, kterou jsme zatím neobjevili.

Detailnější informace o různých interpretacích kvantové teorie se čtenář může dozvědět z publikace [30].



Obr. 61: Princip dvojštěrbinového experimentu.

2.3 Harmonický oscilátor

Na příkladu harmonického oscilátoru, jehož klasické řešení známe z kapitoly 1.3.2, si ukážeme typické postupy při hledání vlastních hodnot operátoru energie. Naše úloha je

$$\hat{\mathbf{H}} \mid n> = E_n \mid n>,$$

$$\hat{\mathbf{H}} \equiv \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{\mathbf{X}}^2, \tag{2.50}$$

$$\left[\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{P}} \right] = \mathrm{i}\hbar\, \hat{\mathbf{1}}.$$

Jde o problém vlastních hodnot Hamiltonova operátoru s konkrétním průběhem potenciální energie a zadanými základními komutačními relacemi mezi operátorem polohy a hybnosti.

V kapitole 2.3.1 úlohu vyřešíme v rámci klasické Schrödingerovy vlnové mechaniky. Za Hilbertův prostor zvolíme prostor $\mathcal{L}^2(\mathcal{R})$, volba operátorů (2.44) a (2.47) povede na Schrödingerovu rovnici (2.49) v jedné dimenzi. Řešení této rovnice se provádí rozvojem do nekonečných řad, které je třeba „oříznout“ tak, aby řešení bylo z prostoru $\mathcal{L}^2(\mathcal{R})$, tj. integrovatelné s kvadrátem. Odsud získáme spektrum operátoru energie.

V kapitole 2.3.2 si ukážeme řešení úlohy (2.50) bez volby reprezentace. Nebudeme vůbec volit konkrétní podobu Hilbertova prostoru. Řešení nalezneme jen z formulace úlohy (2.50). Uvidíme tak, že konkrétní volba Hilbertova prostoru není podstatná. Při tomto přístupu si zavedeme kreační a anihilační operátory, které svým působením posouvají energii o jednu hladinu výše či níže. Tyto operátory jsou v kvantové teorii velmi užitečné, a proto se s nimi seznámíme již nyní u jednoduchého příkladu harmonických oscilací.

V kapitole 2.3.3 si ukážeme řešení úlohy (2.50) na prostoru l^2 nekonečných posloupností sčitatelných s kvadrátem (v rámci tzv. Heisenbergovy maticové mechaniky). Operátory zde budou nekonečné matice. Možná se vám zdá obtížné hledat vlastní čísla nekonečných matic. Problém ale není tak složitý. Jestliže za vektory báze zvolíme vlastní vektory příslušného operátoru, bude matice odpovídající tomuto operátoru diagonální. Vlastní čísla diagonálních matic se hledají velmi snadno – jsou to právě prvky na diagonále.

Třemi různými způsoby tak uvidíte řešení jednoho a téhož problému. V kvantové teorii jde totiž o vnitřní strukturu teorie, nikoli o konkrétní reprezentaci, ve které výpočet provádíme.

2.3.1 Řešení pomocí vlnové mechaniky (Schrödinger)

Hamiltonova funkce jednodimenzionálního harmonického oscilátoru je dána součtem kinetické a potenciální energie (1.31)

$$H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 . \tag{2.51}$$

Hamiltonův operátor je v prostoru $\mathcal{L}^2(-\infty, +\infty)$ potom dán jednoduchou relací

► $$\hat{\mathbf{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 . \tag{2.52}$$

Odpovídající Schrödingerova rovnice pro vlastní funkci $\psi(x)$ z prostoru $\mathcal{L}^2(-\infty, +\infty)$ má jednoduchý tvar

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\psi(x) = E\psi(x) . \tag{2.53}$$

Jde o obyčejnou lineární diferenciální rovnici druhého řádu s nelineárním koeficientem u nulté derivace. Standardní tvar této rovnice (s jednotkovým koeficientem u nejvyšší derivace) je:

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2\right)\psi = 0 . \tag{2.54}$$

Rovnici budeme řešit ve čtyřech krocích:

1. substituce ve vnitřní (nezávislé) proměnné

V nezávislé proměnné budeme volit takovou substituci, která „zbezrozměrní“ rovnici. Přesuňme koeficienty tak, aby byly symetrické u proměnné x

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\frac{m\omega}{\hbar}\mathrm{d}x^2} - \frac{m\omega}{\hbar}x^2\psi + \frac{2E}{\hbar\omega}\psi = 0 \tag{2.55}$$

a proveďme substituci

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x , \tag{2.56}$$

po které Schrödingerova rovnice získá bezrozměrný tvar

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\xi^2} - \xi^2\psi + \lambda\psi = 0 , \qquad \lambda \equiv \frac{2E}{\hbar\omega} . \tag{2.57}$$

2. substituce ve vnější (závislé) proměnné

V závislé proměnné budeme volit takovou substituci, která zohlední chování vlnové funkce pro $\xi \to \pm\infty$. Pro velká ξ můžeme zanedbat poslední člen v rovnici (2.57) oproti předposlednímu. Přibližně platí

$$\xi \to \pm\infty \qquad \Rightarrow \qquad \frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\xi^2} - \xi^2\psi \approx 0 \qquad \Rightarrow \qquad \psi \approx \mathrm{e}^{\pm\xi^2/2} .$$

(řešení stačí dosadit do původní rovnice a zanedbat členy s nižšími mocninami ξ). Kladné z nalezených řešení evidentně není z prostoru $\mathcal{L}^2$, integrál z kvadrátu přes celý

prostor by byl nekonečný. Vlnová funkce se tedy pro velká ξ musí chovat jako funkce $\exp[-\xi^2]$. To nás přivádí k substituci pro závislou proměnnou

$$\psi(\xi) = \mathrm{e}^{-\xi^2/2}\, u(\xi)\,, \tag{2.58}$$

po jejímž provedení dostaneme rovnici

$$u'' - 2\xi u' + (\lambda - 1)u = 0\,. \tag{2.59}$$

Derivace se automaticky rozumí podle nové proměnné ξ. V principu by z matematického hlediska bylo v pořádku říci „v rovnici (2.54) provedeme substituce (2.56) a (2.58) a výsledná rovnice je (2.59)“. V bodech 1 a 2 jsme si jen ukázali, jaké pohnutky nás k těmto substitucím vedou, protože postup je obdobný i u jiných průběhů potenciální energie.

3. rozvoj řešení do mocninné řady

Řešení rovnice (2.59) budeme hledat ve tvaru mocninné řady

$$u(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \xi^k.$$

Snadno nalezneme první a druhou derivaci

$$u'(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} k\, c_k\, \xi^{k-1}; \qquad u''(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} k(k-1)\, c_k\, \xi^{k-2}.$$

Výrazy pro u a její derivace dosadíme do rovnice (2.59):

$$\sum_{k=0}^{\infty} k(k-1)\, c_k\, \xi^{k-2} - \sum_{k=0}^{\infty} 2k\, c_k\, \xi^k + (\lambda - 1) \sum_{k=0}^{\infty} c_k\, \xi^k \;=\; 0\,.$$

Jednotlivé členy upravíme tak, aby mocniny proměnné ξ byly stejné (v prvním členu položíme $k - 2 = l$):

$$\sum_{l=-2}^{\infty} (l+1)(l+2)\, c_{l+2}\, \xi^l - \sum_{l=0}^{\infty} 2l\, c_l\, \xi^l + (\lambda - 1) \sum_{l=0}^{\infty} c_l\, \xi^l \;=\; 0\,.$$

První dva členy prvního součtu jsou nulové, a proto můžeme spodní hranici posunout na hodnotu $l = 0$:

$$\sum_{l=0}^{\infty} \left[(l+1)(l+2)\, c_{l+2} - (2l + 1 - \lambda)\, c_l \right] \xi^l \;= 0\,.$$

Má-li být polynomiální výraz identicky nulový pro každou hodnotu ξ, musí být nulové všechny koeficienty, tj. výrazy v hranaté závorce. Získáváme tak rekurentní relaci pro koeficienty c_l naší řady:

► $$c_{l+2} = \frac{(2l + 1 - \lambda)}{(l+1)(l+2)}\, c_l\,. \tag{2.60}$$

Budeme-li znát koeficienty c_0 a c_1, budeme znát celé řešení, protože z rekurentní relace můžeme spočítat

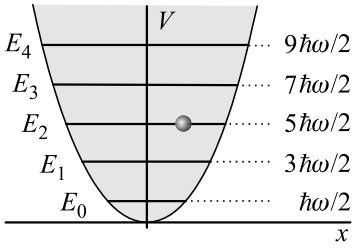
$$c_0 \quad \Rightarrow \quad c_2, c_4, c_6, \ldots$$
$$c_1 \quad \Rightarrow \quad c_3, c_5, c_7, \ldots.$$

Koeficienty c_0 a c_1 tak hrají roli dvou integračních konstant řešení diferenciální rovnice (2.59) druhého řádu. Sudá část řady se počítá z c_0 a lichá z c_1.

4. oříznutí řady

Nalezené řešení je ve tvaru nekonečné mocninné řady. Řeší sice původní rovnici, ale není z prostoru $\mathcal{L}^2$. Aby bylo řešení z $\mathcal{L}^2$ (integrovatelné s kvadrátem), musí být řada konečná, tedy polynomiální. Prakticky to znamená, že koeficienty řady musí být od určitého $l = n$ nulové. V rekurentní relaci (2.60) bude čitatel pro toto $l = n$ nulový a veškeré odvozené koeficienty c_l s $l \geq n$ nulové. Vidíme, že nebude možné takto „oříznout" současně sudé i liché členy řady. Proto jsou možná jen sudá ($c_0 \neq 0$, $c_1 = 0$) nebo jen lichá řešení ($c_0 = 0$, $c_1 \neq 0$) představující sudý nebo lichý polynom stupně n. Podmínka oříznutí (nulovost čitatele) v (2.60) je $2n + 1 - \lambda = 0$ a plyne z ní po vyjádření λ spektrum energie harmonického oscilátoru:

► $$E_n = (n + 1/2)\hbar\omega. \qquad (2.61)$$



Obr. 62: Spektrum harmonického oscilátoru.

Poznámka 1: Nezapomínejte, že energie E (vlastní hodnota operátoru $\hat{\mathbf{H}}$) je po celou dobu výpočtu schována v bezrozměrné konstantě (vlastním číslu) λ.

Poznámka 2: Sama Schrödingerova rovnice má řešení pro každou hodnotu energie. Tato řešení ale nejsou integrovatelná s kvadrátem, až výběr integrovatelných funkcí (oříznutí řady) vede k diskrétnímu spektru operátoru energie (jen pro některé vybrané hodnoty energie ubývá řešení v $\pm\infty$ dostatečně rychle, aby bylo integrovatelné s kvadrátem). Tato situace je typická pro spojité průběhy potenciální energie s minimem.

Poznámka 3: Základní hladina energie $E_0 = \hbar\omega/2$ je nenulová! Ani při nulové absolutní teplotě není harmonický oscilátor v klidu a vykonává tzv. nulové kmity (například oscilace krystalové mříže). Při absolutní nule se hmota nachází ve stavu s nejnižší možnou energií, nikoli však v klidu. To je dáno relacemi neurčitosti: nemůžeme znát současně polohu (nulovou) a hybnost (také nulovou).

Poznámka 4: Spektrum operátoru energie je ekvidistantní, rozdíl dvou libovolných sousedních energetických hladin je $\Delta E = E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$: To je právě známý Planckův vztah z počátku 20. století. Energie jakýchkoli kmitů se nemůže měnit spojitě, ale po skocích (energetických kvantech)

$$\Delta E = \hbar\omega . \tag{2.62}$$

Poznámka 5: Zde se také nachází jedna z prvních možností experimentálního určení Planckovy konstanty měřením energetických kvant (například při fotoelektrickém jevu: vyrážení elektronů z povrchu kovu za pomoci kvant energie elektromagnetického záření – fotonů). Zatím byla Planckova konstanta jediným neurčeným parametrem základních postulátů kvantové teorie. Planckova konstanta se samozřejmě vyskytuje i v jiných vztazích.

Poznámka 6: Polynomiální řešení, která jsme našli pro funkci u, se nazývají Hermitovy polynomy a označujeme je $H_n(\xi)$. Pro dané n nejprve určíme bezrozměrné vlastní číslo λ_n

$$\lambda_n \equiv \frac{2E_n}{\hbar\omega} = \frac{2(n+1/2)\,\hbar\omega}{\hbar\omega} = 2n+1$$

a z rekurentní formule (2.60) určíme pomocí c_0 nebo c_1 (podle toho zda jde o sudý či lichý polynom) ostatní koeficienty rozvoje. Pro $c_0 \neq 0$, $c_1 = 0$ nebo $c_0 = 0$, $c_1 \neq 0$ se nalezené polynomy nazývají Hermitovy. Prvních několik Hermitových polynomů vychází:

$$H_0(\xi) = 1 , \qquad H_3(\xi) = \xi - 2/3\,\xi^3 ,$$
$$H_1(\xi) = \xi , \qquad H_4(\xi) = 1 - 4\xi^2 + 4/3\,\xi^4 ,$$
$$H_2(\xi) = 1 - 2\xi^2 , \qquad H_5(\xi) = \xi - 4/3\,\xi^3 + 4/15\,\xi^5 \ldots$$

Koeficienty c_0 a c_1 jsme volili rovny jedné. Stupeň polynomu n udává současně počet nulových bodů polynomu (počet průsečíků s osou ξ).

Poznámka 7: Hermitovy polynomy se snadno počítají nenormované z rekurentní formule

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi\, H_n(\xi) - 2n\, H_{n-1}(\xi) .$$

Pro první polynomy vychází:

$$H_0(\xi) = 1 , \qquad H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi ,$$
$$H_1(\xi) = 2\xi , \qquad H_4(\xi) = 16\xi^4 - 48\,\xi^2 + 12 ,$$
$$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2 , \qquad H_5(\xi) = 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi \ldots$$

Normovací koeficienty vlnové funkce $H_n(\xi)\exp[-\xi^2/2])$ jsou dány vztahem

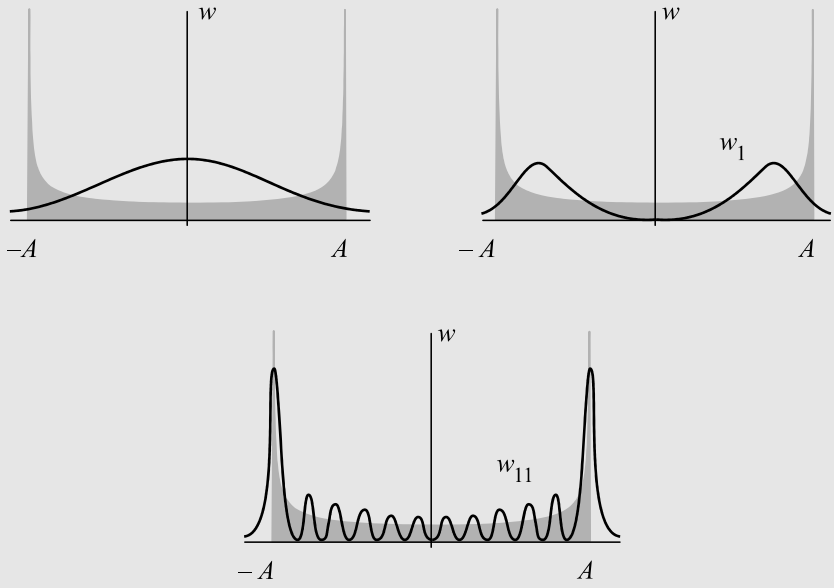
$$\alpha_n = \frac{1}{\sqrt{\pi^{1/2}\; n!\, 2^n}} .$$

Poznámka 8: Celkové řešení spektrálního problému je

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega,$$
$$|\, n > = \psi_n(\xi) = \alpha_n H_n(\xi)\, \mathrm{e}^{-\xi^2/2}; \quad n = 0,1,2,\ldots \tag{2.63}$$

Vlastní funkce $\psi_n(\xi)$ tvoří přirozený úplný ortonormální systém na Hilbertově prostoru $\mathcal{L}^2(-\infty, +\infty)$, který pro $\xi \to \pm\infty$ „dosti rychle“ ubývá k nule.

Poznámka 9: Hustota pravděpodobnosti, že částice kmitající s energií E_n (oscilátor ve stavu $|\, n >$) se nachází v poloze x (resp. bezrozměrné poloze ξ), je dána výrazem $w_n = \psi_n^* \psi_n$. Pro několik prvních stavů je vykreslena na obrázku. Pravděpodobnost má oscilující charakter a existuje malá nenulová pravděpodobnost výskytu oscilátoru i za klasickými body obratu. Tento obraz nastává pro systémy s nízkou teplotou a je zcela odlišný od klasického řešení. Pro velké energie (vysoká n) by se měla křivka blížit klasické pravděpodobnosti výskytu oscilátoru (1.36). Vidíme však, že oscilace jsou sice velmi husté, ale existuje značné množství bodů, ve kterých je kvantová pravděpodobnost nulová. Nic takového však u makroskopických systémů neměříme. Proč? To je dáno rozlišovací schopností makroskopických přístrojů. Žádný přístroj nebude měřit polohu s takovou přesností, aby registroval jednotlivá minima pravděpodobnosti u vysokých energetických stavů. Přístroj ve skutečnosti určuje polohu s konečnou přesností, do které se vejde řada minim a registruje jen střední hodnotu hustoty pravděpodobnosti. A tou je právě klasická křivka, která je na obrázku znázorněna šedou oblastí.



Obr. 63: Kvantová pravděpodobnost výskytu oscilátoru. Povšimněte si, že na okrajích je (s výjimkou základního stavu) pravděpodobnost maximální. Viz také obrázek 64.

2.3.2 Řešení bez volby reprezentace (Dirac)

Úlohu (2.50) budeme nyní řešit obecně. Hamiltonův operátor nejprve přepíšeme do bezrozměrného tvaru:

$$\hat{\mathbf{H}}\left(\hat{\mathbf{X}},\hat{\mathbf{P}}\right) \equiv \frac{1}{2}m\omega^2\hat{\mathbf{X}}^2 + \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} \quad \rightarrow \quad \frac{\hat{\mathbf{H}}}{\hbar\omega} \equiv \frac{m\omega}{2\hbar}\hat{\mathbf{X}}^2 + \frac{1}{2m\hbar\omega}\hat{\mathbf{P}}^2 . \qquad (2.64)$$

Převedení do bezrozměrného tvaru naprosto není nutné, veškeré další úvahy by bylo možné provádět i s rozměrovým hamiltoniánem a všechny následující vztahy by se lišily o konstantu $\hbar\omega$, kterou jsme hamiltonián vydělili. Důvodem je to, že vztahy získané z bezrozměrného hamiltoniánu jsou poněkud názornější. Pro komutující čísla je možné součet kvadrátů „odmocnit“ pomocí vztahu $a^2 + b^2 = (a + \mathrm{i}b)(a - \mathrm{i}b)$. U nekomutujících objektů není situace tak jednoduchá. Zaveďme operátory:

$$\hat{\mathbf{a}} \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{\mathbf{X}} + \mathrm{i}\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\,\hat{\mathbf{P}};$$
$$\hat{\mathbf{a}}^\dagger \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{\mathbf{X}} - \mathrm{i}\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\,\hat{\mathbf{P}}. \qquad (2.65)$$

Oba tyto operátory jsou pro kvantovou teorii velmi důležité. Nazývají se anihilační a kreační operátory (smysl tohoto názvu uvidíme za chvíli). Kreační a anihilační operátory, jako jedny z mála v kvantové teorii, nejsou hermitovské a nepůsobí tedy v obou částech skalárního součinu stejně. Kreační operátor je hermitovsky sdruženým operátorem k anihilačnímu. Platí pro ně některé důležité relace, například:

$$\begin{aligned}
&(1) \quad \hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}} = \frac{\hat{\mathbf{H}}}{\hbar\omega} - \frac{1}{2},\\
&(2) \quad \hat{\mathbf{a}}\,\hat{\mathbf{a}}^\dagger = \frac{\hat{\mathbf{H}}}{\hbar\omega} + \frac{1}{2},\\
&(3) \quad \hat{\mathbf{X}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{\mathbf{a}}^\dagger + \hat{\mathbf{a}}\right),\\
&(4) \quad \hat{\mathbf{P}} = \mathrm{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(\hat{\mathbf{a}}^\dagger - \hat{\mathbf{a}}\right),\\
&(5) \quad \left[\hat{\mathbf{H}}, \hat{\mathbf{a}}\right] = -\hbar\omega\hat{\mathbf{a}},\\
&(6) \quad \left[\hat{\mathbf{H}}, \hat{\mathbf{a}}^\dagger\right] = +\hbar\omega\hat{\mathbf{a}}^\dagger,\\
&(7) \quad \left[\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{a}}^\dagger\right] = \hat{\mathbf{1}}.
\end{aligned} \qquad (2.66)$$

Důkaz všech relací je triviální. Stačí jen dosadit z definice kreačních a anihilačních operátorů $\hat{\mathbf{a}}^\dagger$, $\hat{\mathbf{a}}$ (2.65) a využít základní komutační relace

$$[\hat{\mathbf{X}},\hat{\mathbf{P}}] = \mathrm{i}\hbar\,\hat{\mathbf{1}}.$$

Relace (1) a (2) jsou zobecněním vztahu

$$a^2 + b^2 = (a + \mathrm{i}b)(a - \mathrm{i}b)$$

pro nekomutující objekty a představují formální odmocnění hamiltoniánu. Kreační a anihilační operátory jsou lineární kombinací operátoru souřadnice a operátoru hybnosti. Proto je možné naopak operátory souřadnice a hybnosti vyjádřit jako lineární kombinaci kreačních a anihilačních operátorů – viz relace (3) a (4). Známe-li kreační a anihilační operátor, můžeme z relací (1) až (4) zpětně zrekonstruovat také hamiltonián. Komutační relace (5) až (7) vyjadřují základní vlastnosti kreačních a anihilačních operátorů: Uvidíme, že relace (5) znamená, že anihilační operátor posouvá stavy systému o energetickou hladinu $\hbar\omega$ dolů a relace (6) znamená, že kreační operátor posouvá stav o energetickou hladinu $\hbar\omega$ vzhůru. Relace (7) je potom vzájemným vztahem mezi anihilačním a kreačním operátorem.

V následující větě dokážeme, že operátor $\hat{\mathbf{a}}^\dagger$ je kreačním operátorem, tj. posouvá energetické stavy o jednotku vzhůru (kreuje, vytváří energetické kvantum).

Věta o kreačním operátoru

Působením kreačního operátoru na vlastní stav energie se posuneme do následujícího energetického stavu. Nechť $\hat{\mathbf{H}}\,|\,n> = E_n\,|\,n>$, potom $\hat{\mathbf{a}}^\dagger\,|\,n> \sim |\,n+1>$.

Důkaz:

$$\hat{\mathbf{H}}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\,|\,n> \overset{(6)}{=} (\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{H}} + \hbar\omega\hat{\mathbf{a}}^\dagger)|\,n> = (\hat{\mathbf{a}}^\dagger E_n + \hbar\omega\hat{\mathbf{a}}^\dagger)|\,n> = (E_n + \hbar\omega)\,\hat{\mathbf{a}}^\dagger\,|\,n>$$

$$\Downarrow$$

$$\hat{\mathbf{H}}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\,|\,n> = (E_n + \hbar\omega)\,\hat{\mathbf{a}}^\dagger\,|\,n>$$

$$\Downarrow$$

$$\hat{\mathbf{a}}^\dagger\,|\,n> \sim |\,n+1>.$$

■

Zcela analogicky můžeme z relace (5) v sadě (2.66) ukázat, že pro anihilační operátor platí $\hat{\mathbf{a}}\,|\,n> \sim |\,n-1>$. Zavedeme-li normovací konstanty (požadujeme, aby všechny stavy byly normovány k jedné, tj. tvořily ortonormální bázi z vlastních vektorů operátoru energie), můžeme posouvání v energetickém spektru prováděné kreačním a anihilačním operátorem jednoduše zapsat jako rovnosti

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{a}}^\dagger\,|\,n> &= \alpha_n^+\,|\,n+1>, \\ \hat{\mathbf{a}}\,|\,n> &= \alpha_n^-\,|\,n-1>. \end{aligned} \tag{2.67}$$

Normovací konstanty α určíme později. Nyní naše úsilí zaměříme na nalezení spektra Hamiltonova operátoru pro harmonický oscilátor, aniž bychom specifikovali volbu příslušného Hilbertova prostoru.

Hamiltonův operátor je součtem kvadrátů dvou Hermitových operátorů a je proto pozitivně definitní, tj. jeho vlastní čísla jsou nezáporná. Kreační a anihilační operátory posouvají ve spektru energie o konstantní hodnotu (energetické kvantum). Musí tedy existovat stav s nejnižší možnou energií, která je nezáporná. Tento stav nazýváme základní stav a označujeme ho $|\,ZS>$. Zapůsobíme-li na základní stav anihilačním operátorem, musíme dostat nulový vektor $|\,\mathbf{0}>$ s nulovou velikostí, který netvoří paprsek a není žádným fyzikálním stavem, protože v základním stavu již není co anihilovat, jsme ve stavu s nejnižší možnou energií). Pro základní stav tedy platí:

$$\hat{\mathbf{H}} \mid \mathrm{ZS} > = E_0 \mid \mathrm{ZS} > ; \qquad \hat{\mathbf{a}} \mid \mathrm{ZS} > = \mid \mathbf{0} > .$$

Nalezněme kvadrát velikosti poslední relace (skalární součin prvku se sebou samým):

$$< \mathrm{ZS} \mid \hat{\mathbf{a}}^{\dagger} \hat{\mathbf{a}} \mid \mathrm{ZS} > = 0 \quad \overset{(2.66.1)}{\Rightarrow} \quad < \mathrm{ZS} \mid \frac{\hat{\mathbf{H}}}{\hbar\omega} - \frac{\hat{\mathbf{1}}}{2} \mid \mathrm{ZS} > = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\frac{1}{\hbar\omega} < \mathrm{ZS} \mid \hat{\mathbf{H}} \mid \mathrm{ZS} > \; - \; \frac{1}{2} < \mathrm{ZS} \mid \hat{\mathbf{1}} \mid \mathrm{ZS} > = 0 \quad \Rightarrow \quad \left(\frac{E_0}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \right) < \mathrm{ZS} \mid \mathrm{ZS} > = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\frac{E_0}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} = 0 \quad \Rightarrow \quad E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} .$$

Známe-li hodnotu základního energetického stavu, můžeme další hodnoty energií získat působením kreačního operátoru, ten posouvá v energii o konstantu $\hbar\omega$, je tedy jasné, že

$$E_1 \; = \; E_0 + \hbar\omega \; = \frac{3}{2} \hbar\omega ,$$

$$E_2 \; = \; E_0 + 2\hbar\omega \; = \frac{5}{2} \hbar\omega ,$$

$$\vdots$$

$$E_n = E_0 + n\hbar\omega = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega ; \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

Spektrum harmonického oscilátoru jsme získali jen z vlastností Hamiltonova operátoru, resp. jen z formulace úlohy (2.50). Nikde jsme nevolili konkrétní reprezentaci, konkrétní Hilbertův prostor. Kreační a anihilační operátory, se kterými jsme se zde poprvé setkali, mají značný význam v kvantové teorii pole, kde pomocí podobných operátorů kreujeme a anihilujeme jednotlivé částice přítomné v systému. Zde u harmonického oscilátoru jen kreujeme či anihilujeme energetické kvantum a tím se dostáváme o jednu hladinu výše nebo níže. Aby naše odvození bylo úplné, určíme na závěr normovací konstanty ve výrazu (2.67). Vyjděme ze základních relací pro oba operátory

$$\hat{\mathbf{a}}^{\dagger} \mid n > \; = \; \alpha_n^{+} \mid n+1 > ,$$

$$\hat{\mathbf{a}} \mid n > \; = \; \alpha_n^{-} \mid n-1 > .$$

Nejprve určíme kvadráty obou relací

$$< n \mid \hat{\mathbf{a}} \hat{\mathbf{a}}^{\dagger} \mid n > \; = \; \left| \alpha_n^{+} \right|^2 < n+1 \mid n+1 > ,$$

$$< n \mid \hat{\mathbf{a}}^{\dagger} \hat{\mathbf{a}} \mid n > \; = \; \left| \alpha_n^{-} \right|^2 < n-1 \mid n-1 > .$$

Součiny operátorů nalevo vyjádříme ze vztahů (1) a (2) sady (2.66):

$$< n \mid \frac{\hat{\mathbf{H}}}{\hbar\omega} + \frac{1}{2} \mid n > = \left| \; \alpha_n^{+} \right|^2 < n+1 \mid n+1 > ,$$

$$< n \mid \frac{\hat{\mathbf{H}}}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \mid n > = \left| \; \alpha_n^{-} \right|^2 < n-1 \mid n-1 > .$$

Nalevo zapůsobíme Hamiltonovým operátorem a dostaneme

$$\left(\frac{E_n}{\hbar\omega} + \frac{1}{2}\right) < n \mid n > = \left|\alpha_n^+\right|^2 < n+1 \mid n+1 >,$$
$$\left(\frac{E_n}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}\right) < n \mid n > = \left|\alpha_n^-\right|^2 < n-1 \mid n-1 >.$$

Z požadavku normovanosti vlastních vektorů operátoru energie k jedné máme:

$$\left|\alpha_n^+\right|^2 = \left(\frac{E_n}{\hbar\omega} + \frac{1}{2}\right) = \left(\frac{(n+1/2)\,\hbar\omega}{\hbar\omega} + \frac{1}{2}\right) = n+1,$$

$$\left|\alpha_n^-\right|^2 = \left(\frac{E_n}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}\right) = \left(\frac{(n+1/2)\,\hbar\omega}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}\right) = n.$$

Fázový faktor při odmocňování komplexního čísla není podstatný (jednotkovou velikost vektoru neovlivní). Výsledné působení kreačního a anihilačního operátoru (2.67) včetně normovací konstanty tedy je:

► $$\begin{aligned} \hat{\mathbf{a}}^\dagger \mid n > &= \sqrt{n+1} \mid n+1 >, \\ \hat{\mathbf{a}} \mid n > &= \sqrt{n} \mid n-1 >. \end{aligned} \tag{2.68}$$

Tento výsledek si můžete snadno zapamatovat: Pod odmocninou je vždy pořadové číslo vyššího energetického stavu z obou stran rovnice. Zajímavé vlastnosti má ještě jeden operátor:

► $$\hat{\mathbf{N}} \equiv \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}}. \tag{2.69}$$

Zapůsobme tímto operátorem na stav $\mid n >$, s využitím relací (2.68) dostaneme

$$\hat{\mathbf{N}} \mid n > = \hat{\mathbf{a}}^\dagger \hat{\mathbf{a}} \mid n > = \sqrt{n}\, \hat{\mathbf{a}}^\dagger \mid n-1 > = \sqrt{n}\sqrt{n} \mid n > = n \mid n >.$$

Vlastním číslem tohoto operátoru je počet kvant přítomných v daném energetickém stavu. V kvantové teorii pole má tento operátor význam *operátoru počtu částic* a platí pro něho vztah

► $$\hat{\mathbf{N}} \mid n > = n \mid n >. \tag{2.70}$$

2.3.3 Řešení pomocí maticové mechaniky (Heisenberg)

Řešme nyní ještě jednou úlohu (2.50) o harmonickém oscilátoru na prostoru nekonečných posloupností l^2 sčitatelných s kvadrátem. Na prostoru n-tic jsou operátory čtvercové matice $n \times n$. Na prostoru nekonečných posloupností ($n \to \infty$) budou operátory nekonečně rozměrné matice. Úkol tedy je: najít nekonečně rozměrné matice **X**, **P**, **H**, které vyhovují úloze (2.50). Tyto matice nemusíme hledat „na zelené louce“. S tím co víme o kreačních a anihilačních operátorech, je snadno zkonstruujeme. Nalezneme je v energetické reprezentaci – to znamená, že určíme maticové elementy operátorů polohy, hybnosti a energie v bázi vytvořené z vlastních vektorů Hamiltonova operátoru. Všechny tři operátory umíme zkonstruovat pomocí kreačních a anihilačních operátorů podle relace (2.66). A působení kreačních a anihilačních operátorů na zvolenou bázi

také známe – viz relace (2.68). Konstrukce elementů příslušných matic je tedy víceméně triviální záležitostí:

$$X_{k\,l} = < k \,|\, \hat{\mathbf{X}} \,|\, l > = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\,\omega}} < k \,|\, \left(\hat{\mathbf{a}}^{\dagger} + \hat{\mathbf{a}} \right) |\, l > =$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\,\omega}} \left(\sqrt{l+1} < k \,|\, l+1 > + \sqrt{l} < k \,|\, l-1 > \right) =$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\,\omega}} \left(\sqrt{l+1}\, \delta_{k,\,l+1} + \sqrt{l}\, \delta_{k,\,l-1} \right), \qquad k,l = 0,1,2\ldots.$$

Operátor polohy jsme nejprve vyjádřili z (2.66) pomocí kreačního a anihilačního operátoru a poté jsme jimi zapůsobili ve shodě s (2.68). Obdobně máme pro hybnost

$$P_{k\,l} = < k \,|\, \hat{\mathbf{P}} \,|\, l > = \mathrm{i} \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} < k \,|\, \left(\hat{\mathbf{a}}^{\dagger} - \hat{\mathbf{a}} \right) |\, l > =$$

$$= \mathrm{i} \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \left(\sqrt{l+1} < k \,|\, l+1 > - \sqrt{l} < k \,|\, l-1 > \right) =$$

$$= \mathrm{i} \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \left(\sqrt{l+1}\, \delta_{k,\,l+1} - \sqrt{l}\, \delta_{k,\,l-1} \right), \qquad k,l = 0,1,2\ldots$$

Jako poslední nalezneme matici odpovídající Hamiltonovu operátoru. Tato matice jako jediná musí vyjít diagonální, protože jde o bázi z vlastních stavů operátoru energie:

$$H_{k\,l} = < k \,|\, \hat{\mathbf{H}} \,|\, l > = \hbar\omega < k \,|\, \left(\hat{\mathbf{a}}^{\dagger} \hat{\mathbf{a}} + \frac{1}{2} \right) |\, l > = \cdots$$

$$= \left(l + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega\, \delta_{kl}\,, \qquad k,l = 0,1,2\ldots.$$

Napišme si nyní nalezené matice:

$$\mathbf{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\,\omega}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{P} = \mathrm{i} \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & 0 & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar\omega}{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \frac{3\hbar\omega}{2} & 0 & \\ 0 & 0 & \frac{5\hbar\omega}{2} & \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix}.$$

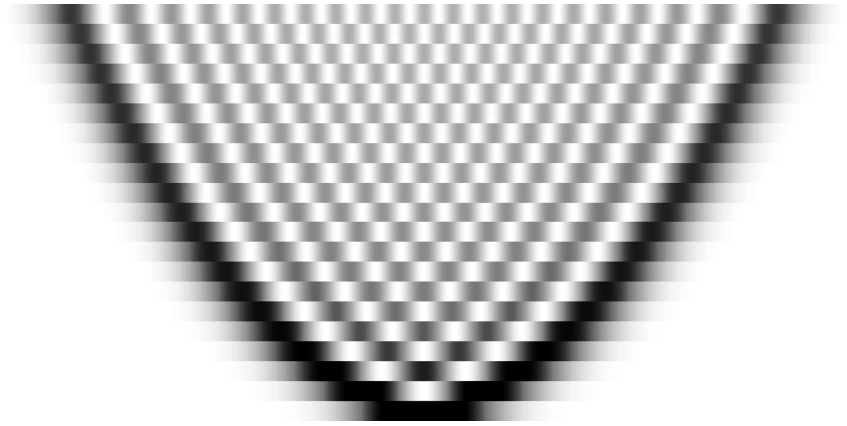
Ověřte si, že skutečně $[\mathbf{X}, \mathbf{P}] = \mathrm{i}\hbar\,\mathbf{1}$ a že také platí $\mathbf{H} = \mathbf{P}^2/2m + m\omega^2\mathbf{X}^2/2$ podle požadavků úlohy (2.50). Ze znalosti matic $\mathbf{X}$ a $\mathbf{P}$ jsme již mohli Hamiltonovu matici určit přímo z této relace. Poslední co zbývá, je nalézt vlastní čísla matice $\mathbf{H}$. Tato úloha je mimořádně jednoduchá. U diagonální matice jsou vlastní čísla právě prvky na diagonále. Výpočet je jednoduchý:

$$\mathbf{H}\,|\psi> = E\,|\psi> \quad \Rightarrow \quad (\mathbf{H} - \mathbf{1}E)\,|\psi> = 0 \quad \Rightarrow \quad \det(\mathbf{H} - \mathbf{1}E) = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\left(\frac{\hbar\omega}{2} - E\right)\cdot\left(\frac{3\hbar\omega}{2} - E\right)\cdot\left(\frac{5\hbar\omega}{2} - E\right)\ \cdots\ = 0 \quad \Rightarrow$$

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad , \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

Opět tedy máme vztah (2.61) pro spektrum harmonického oscilátoru.



Obr. 64: Hustota pravděpodobnosti výskytu oscilátoru od základního do 20. stavu. Spodní proužek odpovídá základnímu stavu, horní 20. stavu. Bílou barvou je kódována minimální pravděpodobnost, černou maximální pravděpodobnost výskytu. V bodech obratu (na parabole) je zjevně pravděpodobnost výskytu částice nejvyšší. Zdroj: Wikipedia.

2.4 Jednoduché jednorozměrné systémy

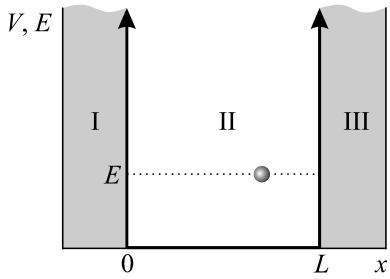
V reálné situaci se částice tu a tam ocitne v minimu potenciálu. Pro obecný tvar potenciálu není analytické řešení možné, a tak přichází na řadu nejrůznější aproximace. Potenciál je možné v okolí minima nahradit parabolickou závislostí a využít známé řešení pro harmonický oscilátor. Jinou možností je nahrazení průběhu potenciálu pravoúhlou jámou. Schrödingerova rovnice na prostoru $\mathcal{L}^2$ vede na diferenciální rovnici s konstantními koeficienty, jejíž řešení je mimořádně jednoduché. Složitější je navázání řešení v různých oblastech, které v případě jámy konečné výšky vede na celkem elegantní grafické řešení energetických hladin. Pokud bude jáma úzká a vysoká, můžeme ji v první aproximaci nahradit nekonečnou potenciálovou jámou a pak je celé řešení mimořádně jednoduché.

2.4.1 Nekonečná jáma

Předpokládejme pohyb částice v potenciálu nekonečné pravoúhlé jámy

$$V(x) = \begin{cases} 0; & x \in (0, L), \\ \infty; & x \notin (0, L). \end{cases} \tag{2.71}$$

Jde samozřejmě o fyzikální idealizaci, kterou ve skutečné přírodě nenajdeme. Potenciál rozdělíme na tři oblasti podle obrázku:



Obr. 65: Nekonečná pravoúhlá jáma.

V oblastech I a III je potenciál nekonečný a jediným možným řešením bezčasové Schrödingerovy rovnice je $\psi = 0$. Z fyzikálního hlediska to znamená, že pravděpodobnost výskytu částice mimo jámu je nulová. Kdyby byla jáma konečná (tj. konečný potenciál vně jámy), byla by vlnová funkce ψ v těsné blízkosti hranice jámy nenulová. Částice by měla sice malou, ale nenulovou pravděpodobnost existence i za hranicí jámy. V oblasti II má Schrödingerova rovnice (2.49) tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = E\psi, \tag{2.72}$$

který lze upravit na standardní rovnici kmitů v proměnné x

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + k^2\psi = 0\,; \qquad k^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2}\,, \tag{2.73}$$

jejíž řešení je

$$\psi = A\cos kx + B\sin kx\,. \tag{2.74}$$

Vlnová funkce musí být spojitá na obou hranicích jámy, jinak by první derivace vlnové funkce byla derivací skoku, tj. distribucí, a druhá derivace by se dokonce chovala jako derivace distribuce, což odporuje původní rovnici (2.72). Proto musí platit okrajové podmínky $\psi(0) = 0$, $\psi(L) = 0$, ze kterých plyne

$$A = 0\,; \qquad k = n\frac{\pi}{L}\,; \qquad n = 1, 2, 3\ldots \tag{2.75}$$

Kvantování je právě důsledkem aplikace okrajové podmínky. Hodnota k, ve které je podle vztahu (2.73) „zakuklena" energie, nemůže nabývat libovolných hodnot. Podmínka (2.75) tedy není nic jiného než kvantovací podmínka pro energii:

► $$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\,n^2\,; \qquad n = 1, 2, 3\ldots \tag{2.76}$$

Základní hladina energie je, podobně jako u harmonického oscilátoru, nenulová. Důvodem jsou opět Heisenbergovy relace neurčitosti – částice pohybující se v jámě je lokalizována v konečné oblasti a nemůže proto mít nulovou hybnost nebo energii. Pro $n = 0$ by bylo řešení nulové, tedy ve sporu s tím, že v jámě je přítomna částice. Na rozdíl od harmonického oscilátoru není spektrum energie ekvidistantní a s rostoucím číslem n rozdíl dvou sousedních hladin energie roste. Samotná vlnová funkce má tvar

$$\psi_n(x) = B\sin k_n x = B\sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right). \tag{2.77}$$

Řešením jsou celé paprsky v Hilbertově prostoru $\mathcal{L}^2$. Z nich vybereme jednotkové vektory splňující

$$\langle\psi_n|\psi_n\rangle = 1 \qquad \Rightarrow \qquad \int_0^L B^2\sin^2\left(n\pi x/L\right)\mathrm{d}x = 1 \qquad \Rightarrow \qquad B = \sqrt{\frac{2}{L}}\,.$$

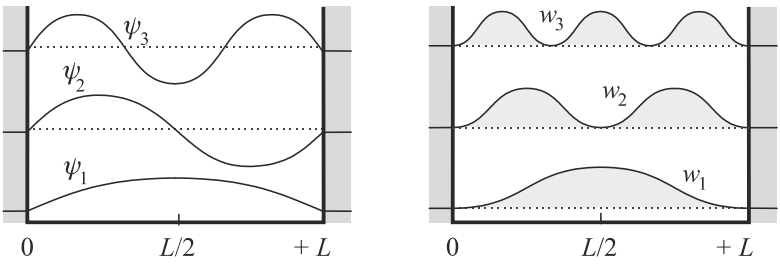
Normovací konstanta by mohla mít po odmocnění i zápornou nebo komplexní hodnotu. Vzhledem k tomu, že úkolem bylo vybrat některý z jednotkových vektorů paprsku, můžeme použít jakékoli řešení. Výsledné řešení v oblasti II tedy je

► $$|n\rangle = \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\,\sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right); \qquad n = 1, 2, 3\ldots \tag{2.78}$$

Pro pravděpodobnost výskytu částice v jámě (v oblasti II) potom máme

► $$w_n(x) = \psi_n^*\psi_n = \frac{2}{L}\sin^2\left(n\frac{\pi}{L}x\right); \qquad n = 1, 2, 3\ldots \tag{2.79}$$

Průběh prvních tří řešení naleznete na obrázku 66. Je zjevné, že uvnitř nekonečné pravoúhlé jámy existují místa, kde je pravděpodobnost výskytu částice nulová (stejně jako u harmonického oscilátoru). Mimo oblast jámy se částice nevyskytuje vůbec.



Obr. 66: Vlnové funkce (nalevo) a pravděpodobnosti (napravo) prvních tří stavů.

Pokud budeme středovat polohu přes pravděpodobnosti w_n, snadno zjistíme, že průměrná poloha částice je přesně uprostřed jámy, a to nezávisle tom, ve kterém energetickém stavu se částice nachází:

► $$< x > = \langle n | x | n \rangle = \int_0^L \psi_n^* \, x \, \psi_n \, \mathrm{d}x = \int_0^L \frac{2x}{L} \sin^2\left(n \frac{\pi}{L} x \right)) \, \mathrm{d}x = \frac{L}{2}. \qquad (2.80)$$

◖ Příklad 39: elektron v jámě

Elektron v polovodiči se nachází v elektrickém poli, jehož potenciál má tvar vysoké jámy o šířce 1 nm. Určete první tři hladiny energie. Poté řešte pro jámu s šířkou 1 mm. Nalezněte energetický rozdíl mezi třetí a druhou energetickou hladinou.

Řešení: Hodnoty určíme ze vztahu (2.76):

šířka	E_1	E_2	E_3	ΔE_{23}
1 nm	6×10^{-20} J = 0,38 eV	1,5 eV	3,4 eV	1,9 eV
1 mm	6×10^{-32} J = 0,38 peV	1,5 peV	3,4 peV	1,9 peV

Pro jámu o šířce 1 nm je kvantování podstatné a hodnoty energetických hladin jsou srovnatelné s energií elektronu v atomárním obalu. Pro jámu širokou 1 mm jsou energie o mnoho řádů nižší a rozdíly mezi energetickými hladinami běžnými prostředky nepozorovatelné.

◗

2.4.2 Konečná jáma

Jinou aproximací potenciálového minima je konečná jáma. Jde o výhodné přiblížení například pro interakce neutronů a protonů v atomovém jádře, i když zde bychom správně měli řešit třírozměrnou konečnou jámu. Šířka jámy je v tomto případě přibližně 10^{-15} m, což je zhruba dosah silné interakce. Narozdíl od nekonečné jámy nelze spektrum energie určit analyticky. Naštěstí existuje jednoduchá geometrická metoda, která vede k nalezení spektra. Budeme předpokládat, že jáma je orientována symetricky vůči počátku souřadnicového systému, což nám usnadní závěrečný výpočet spektra. Výpočet se opět rozpadne na tři oblasti, ve kterých budeme postupovat obdobně jako u nekonečné jámy. První i druhá derivace vlnové funkce musí být na rozhraní spojitá, jinak by druhá derivace ve Schrödingerově rovnici byla nepřípustnou distribucí.

Budeme tedy řešit Schrödingerovu rovnici s potenciálem konečné jámy:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\psi=E\psi\,,\qquad V(x)=\begin{cases}0; & x\in(-L/2,L/2)\,,\\ V_0\,; & x\notin(-L/2,L/2)\,.\end{cases}\tag{2.81}$$

V jednotlivých oblastech I, II a III je potenciál konstantní a řešení je jednoduché. V oblastech I a III je řešení kombinací rostoucí a klesající exponenciály, v dané oblasti je vždy jen jedna z těchto funkcí integrovatelná s kvadrátem a druhou je nutné vyloučit (položit konstantu u ní rovnou 0). V oblasti II je řešení složené z funkcí kosinus a sinus:

$$\begin{aligned}&\psi_{\mathrm{I}}(x)=C\,\mathrm{e}^{hx}\,; && x\in\mathrm{I}\,, && h^2\equiv\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}\,;\\ &\psi_{\mathrm{II}}(x)=A\cos kx+B\sin kx\,; && x\in\mathrm{II}\,, && \\ &\psi_{\mathrm{III}}(x)=D\,\mathrm{e}^{-hx}\,; && x\in\mathrm{III}\,, && k^2\equiv\frac{2mE}{\hbar^2}\,.\end{aligned}\tag{2.82}$$

Podmínky spojitosti na levé a pravé straně jámy vedou na rovnice

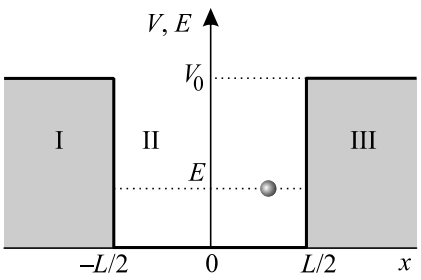
$$\begin{aligned}&\psi_{\mathrm{II}}(-L/2)=\psi_{\mathrm{I}}(-L/2)\,;\\ &\psi_{\mathrm{II}}(+L/2)=\psi_{\mathrm{III}}(+L/2)\,;\\ &\psi'_{\mathrm{II}}(-L/2)=\psi'_{\mathrm{I}}(-L/2)\,;\\ &\psi'_{\mathrm{II}}(+L/2)=\psi'_{\mathrm{III}}(+L/2)\,.\end{aligned}\tag{2.83}$$

Po dosazení dostaneme vztahy mezi konstantami A, B, C a D:

$$\begin{aligned}A\cos(kL/2)-B\sin(kL/2)&=C\,\mathrm{e}^{-hL/2}\,;\\ A\cos(kL/2)+B\sin(kL/2)&=D\,\mathrm{e}^{-hL/2}\,;\\ +Ak\sin(kL/2)+Bk\cos(kL/2)&=Ch\,\mathrm{e}^{-hL/2}\,;\\ -Ak\sin(kL/2)+Bk\cos(kL/2)&=-Dh\,\mathrm{e}^{-hL/2}\,.\end{aligned}\tag{2.84}$$

Nyní první dvojici rovnic sečteme a odečteme. S druhou dvojicí uděláme totéž:

$$\begin{aligned}2A\cos(kL/2)&=(D+C)\,\mathrm{e}^{-hL/2}\,;\\ 2B\sin(kL/2)&=(D-C)\,\mathrm{e}^{-hL/2}\,;\\ 2Bk\cos(kL/2)&=(C-D)h\,\mathrm{e}^{-hL/2}\,;\\ 2Ak\sin(kL/2)&=(C+D)h\,\mathrm{e}^{-hL/2}\,.\end{aligned}\tag{2.85}$$



Obr. 67: Konečná potenciálová jáma.

Pokud je konstanta A různá od nuly, můžeme provést výpočet z první a poslední rovnice, pokud je různé od nuly B, z druhé a třetí rovnice:

$$\begin{aligned} A \neq 0 \quad &\Rightarrow \quad k\,\mathrm{tg}\,(kL/2) = h\,, \\ B \neq 0 \quad &\Rightarrow \quad k\,\mathrm{cotg}\,(kL/2) = -h\,. \end{aligned} \tag{2.86}$$

Pokud by byly obě konstanty nenulové, dostaneme se ihned do sporu. Pokud by byly obě konstanty nulové, máme jen nulové řešení pro vlnovou funkci. V úvahu tedy přicházejí jen dvě možnosti

1. $A \neq 0$, $B = 0$. Podle (2.82) jde o řešení sudá.
2. $A = 0$, $B \neq 0$. Podle (2.82) jde o řešení lichá.

V obou případech je už snadné dopočítat z (2.85) konstanty C a D. Poslední konstantu A (v případě 1), resp. B (v případě 2), určíme z normovací podmínky $<\psi|\psi> = 1$. Nás ale spíše zajímá energetické spektrum částice v konečné jámě. To je určeno podmínkami (2.86), které představují transcendentní rovnice. V proměnných k a h je totiž obsažena energie. První podmínka je pro sudá řešení, druhá pro lichá. Zaveďme nové proměnné

$$\xi \equiv kL/2\,; \qquad \eta \equiv hL/2\,. \tag{2.87}$$

Obě proměnné jsou bezrozměrné a spektrální podmínky se změní na

► $$\begin{aligned} \eta &= \xi\,\mathrm{tg}\,\xi\,; \quad \text{sudá řešení,} \\ \eta &= -\xi\,\mathrm{cotg}\,\xi\,; \quad \text{lichá řešení.} \end{aligned} \tag{2.88}$$

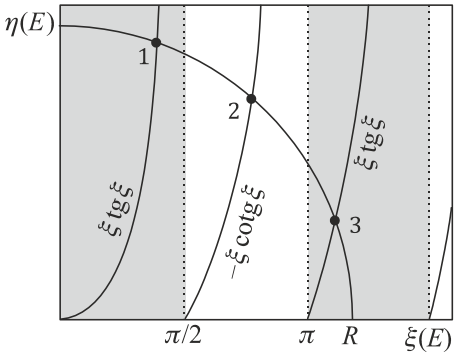
Oba vztahy můžeme snadno vykreslit do grafu v rovině (ξ, η), tj. na vodorovnou osu budeme nanášet hodnoty ξ, na svislou osu hodnoty η vypočtené z pravých stran relace. Pro nové proměnné (ξ, η) platí jedna zajímavá vlastnost, která plyne z definic (2.82):

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{(k^2 + h^2)L^2}{4} = \frac{mV_0L^2}{2\hbar^2}\,.$$

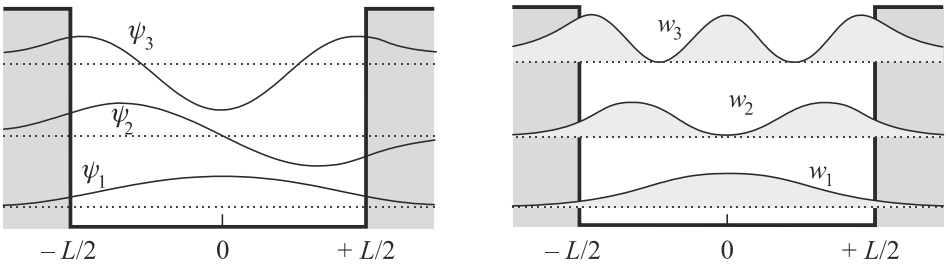
Nejde o nic jiného než o rovnici kružnice s poloměrem daným parametry jámy:

► $$\xi^2 + \eta^2 = R^2\,; \qquad R \equiv \sqrt{\frac{mV_0L^2}{2\hbar^2}}\,. \tag{2.89}$$

Průsečíky této kružnice s křivkami (2.88) dají grafické řešení energetického spektra



Obr. 68: Grafické určení energetických hladin. Jsou dány průsečíky kružnice s křivkami.



Obr. 69: Vlnové funkce (nalevo) a pravděpodobnosti (napravo) prvních tří stavů.

Na rozdíl od nekonečné jámy částice proniká i do klasicky zakázaných oblastí, tj. do oblasti $x < -L/2$ a do oblasti $x > +L/2$. Z obrázku je patrné, že hustota pravděpodobnosti je v těchto zakázaných oblastech nenulová. Vlnové funkce se střídají sudé a liché. Hustoty pravděpodobnosti jsou sudé funkce pro všechny stavy. Střední hodnota polohy částice je proto 0, tedy uprostřed jámy.

Poznámka: Pro $E < V_0$, tedy v oblasti, kde se v klasické mechanice nemůže částice vzdálit do nekonečna, je kvantové spektrum operátoru energie diskrétní. Vždy existuje alespoň jeden vázaný stav, a to i v nejplošší jámě. Pokud by částice měla $E > V_0$, tj. byla by nad jámou, bude řešení ve všech třech oblastech lineárními kombinacemi sinů a kosinů a k dispozici budeme mít 6 konstant, 4 podmínky navázání a jednu normovací podmínku. Žádná omezení typu (2.86) nedostaneme a spektrum bude spojité.

2.4.3 Bariéra, tunelový jev a rozptyl

Předpokládejme, že částice o hmotnosti m a energii E dopadá zleva na potenciálovou bariéru (viz obrázek 70) o výšce V_0. Energie částice je menší než výška potenciálové bariéry, takže by částice v klasickém případě bariérou nemohla prolétnout, protože nemá dosti velkou energii na to, aby se „přehoupla“ přes bariéru. V kvantové mechanice to možné je. Průběh potenciálu má jednoduchý tvar

$$V(x) = \begin{cases} V_0\,; & x \in (0, L)\,, \\ 0\,; & x \notin (0, L)\,. \end{cases} \tag{2.90}$$

Řešení Schrödingerovy rovnice

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\psi = E\psi \tag{2.91}$$

rozdělíme, tak jako v předchozích případech, do tří oblastí, ve kterých má potenciál jednu konkrétní konstantní hodnotu. Na bariéře se pro letící částici již řešení nerozdělí na sadu sudých a lichých řešení (tak jak tomu bylo v symetrické jámě), a tak ztrácí smysl psát řešení jako superpozici lichého sinu a sudého kosinu a udržovat počátek souřadnic uprostřed bariéry. Namísto toho využijeme superpozici kmitavých exponenciálních funkcí, se kterými se v obecném případě lépe zachází (například je jednodušší jejich derivace). Řešení Schrödingerovy rovnice v jednotlivých oblastech bude mít tvar:

$$\begin{aligned}
&\psi_{\mathrm{I}}(x) = A_{\mathrm{I}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + B_{\mathrm{I}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\,; && x \in \mathrm{I}\,, && h^2 \equiv \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\,;\\
&\psi_{\mathrm{II}}(x) = A_{\mathrm{II}}\,\mathrm{e}^{hx} + B_{\mathrm{II}}\,\mathrm{e}^{-hx}\,; && x \in \mathrm{II}\,, && \\
&\psi_{\mathrm{III}}(x) = A_{\mathrm{III}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + B_{\mathrm{III}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\,; && x \in \mathrm{III}\,, && k^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2}\,.
\end{aligned} \tag{2.92}$$

Vzhledem k pravděpodobnostnímu charakteru kvantové mechaniky musíme pokus mnohokrát opakovat, což znamená, že máme připraveno velké množství částic ve stejném stavu (se stejnou energií a hybností), které opakovaně posíláme zleva na bariéru. Vlnová funkce $\psi(x)$ má význam amplitudy pravděpodobnosti výskytu částic a její kvadrát $w(x) = \psi^*\psi$ má význam hustoty pravděpodobnosti výskytu částic. V klasické teorii vlnění (viz například navazující učebnici [1]) mají rovinné vlny šířící se ve směru (+) a proti směru (–) osy x tvar

$$\begin{aligned}
\varphi_+(t,x) &= A\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}[kx-\omega t]}\,;\\
\varphi_-(t,x) &= A\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}[-kx-\omega t]}\,.
\end{aligned} \tag{2.93}$$

Odsud snadno nahlédneme, že řešení v oblastech I a III je superpozicí vln šířících se doprava a doleva. Vzhledem k tomu, že zprava na bariéru žádné částice nepřicházejí, musí platit

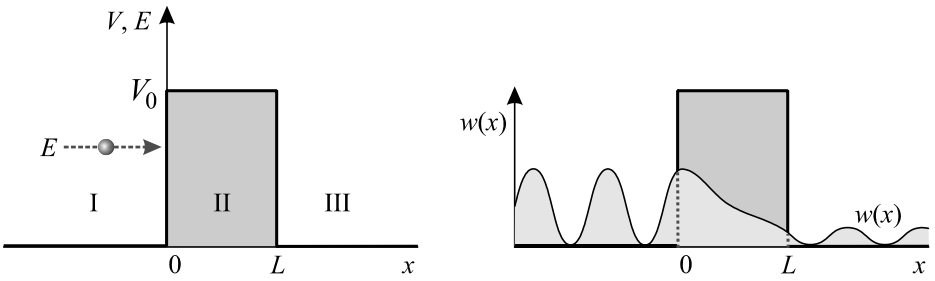
$$B_{\mathrm{III}} = 0\,. \tag{2.94}$$

V levé části (před bariérou) superpozice zůstane. Vlna šířící se doprava koresponduje s částicemi, které posíláme na bariéru, vlna šířící se doleva je způsobena částicemi odraženými od bariéry. Podmínky spojitosti vlnové funkce a její první derivace na levé a pravé straně bariéry vedou na rovnice

$$\begin{aligned}
\psi_{\mathrm{I}}(0) &= \psi_{\mathrm{II}}(0)\,; & \psi'_{\mathrm{I}}(0) &= \psi'_{\mathrm{II}}(0)\,;\\
\psi_{\mathrm{II}}(L) &= \psi_{\mathrm{III}}(L)\,; & \psi'_{\mathrm{II}}(L) &= \psi'_{\mathrm{III}}(L)\,.
\end{aligned} \tag{2.95}$$

Po dosazení dostaneme vztahy mezi konstantami A, B:

$$\begin{aligned}
A_{\mathrm{I}} + B_{\mathrm{I}} &= A_{\mathrm{II}} + B_{\mathrm{II}}\,;\\
A_{\mathrm{II}}\,\mathrm{e}^{hL} + B_{\mathrm{II}}\,\mathrm{e}^{-hL} &= A_{\mathrm{III}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kL}\,;\\
\mathrm{i}kA_{\mathrm{I}} - \mathrm{i}kB_{\mathrm{I}} &= hA_{\mathrm{II}} - hB_{\mathrm{II}}\,;\\
A_{\mathrm{II}}h\,\mathrm{e}^{hL} - B_{\mathrm{II}}h\,\mathrm{e}^{-hL} &= \mathrm{i}kA_{\mathrm{III}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kL}\,.
\end{aligned} \tag{2.96}$$



Obr. 70: Průběh potenciálu (nalevo) a pravděpodobnost výskytu (napravo) částice letící na jednorozměrnou pravoúhlou potenciálovou bariéru.

Vzhledem k tomu, že máme 4 podmínky pro pět konstant, je vše v pořádku a jedna konstanta zůstává volná pro normování nalezené vlnové funkce. Jinou možností je vzít nenormovanou vlnovou funkci a amplitudu dopadajících vln volit rovnou

$$A_{\mathrm{I}} = 1 . \tag{2.97}$$

V tomto případě budeme mít mimořádně jednoduchý výpočet koeficientu propustnosti bariérou. Ten je definován jako podíl počtu prošlých částic ku podílu počtu dopadlých částic a vypočteme ho jako podíl hustot pravděpodobností prošlé a dopadající vlny:

► $$T = \frac{A^*_{\mathrm{III}} A_{\mathrm{III}}}{A^*_{\mathrm{I}} A_{\mathrm{I}}} = A^*_{\mathrm{III}} A_{\mathrm{III}} . \tag{2.98}$$

Obdobně můžeme zavést koeficient odrazu

► $$R = \frac{B^*_{\mathrm{I}} B_{\mathrm{I}}}{A^*_{\mathrm{I}} A_{\mathrm{I}}} = B^*_{\mathrm{I}} B_{\mathrm{I}} . \tag{2.99}$$

Soustavu (2.96) přepíšeme do maticové podoby, volba $A_{\mathrm{I}} = 1$ dá vzniknout pravé straně soustavy:

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 & 0 \\ \mathrm{e}^{hL} & 0 & \mathrm{e}^{-hL} & -\mathrm{e}^{\mathrm{i}kL} \\ h & \mathrm{i}k & -h & 0 \\ h\mathrm{e}^{hL} & 0 & -h\mathrm{e}^{-hL} & -\mathrm{i}k\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kL} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_{\mathrm{II}} \\ B_{\mathrm{I}} \\ B_{\mathrm{II}} \\ A_{\mathrm{III}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \mathrm{i}k \\ 0 \end{pmatrix} \tag{2.100}$$

Vzhledem k tomu, že chceme určit koeficienty propustnosti bariéry, stačí určit jen konstantu A_{III} a ostatní eliminovat. Matici můžeme převést na trojúhelníkovou matici nebo použít metodu subdeterminantů, metodu inverzní matice atd. Výpočet je již přímočarý. Výsledek je:

► $$T = \frac{1}{1 + \dfrac{V_0^2 \sinh^2(hL)}{4E(V_0 - E)}} . \tag{2.101}$$

Koeficient odrazivosti R můžeme snadno určit ze zákona zachování počtu částic:

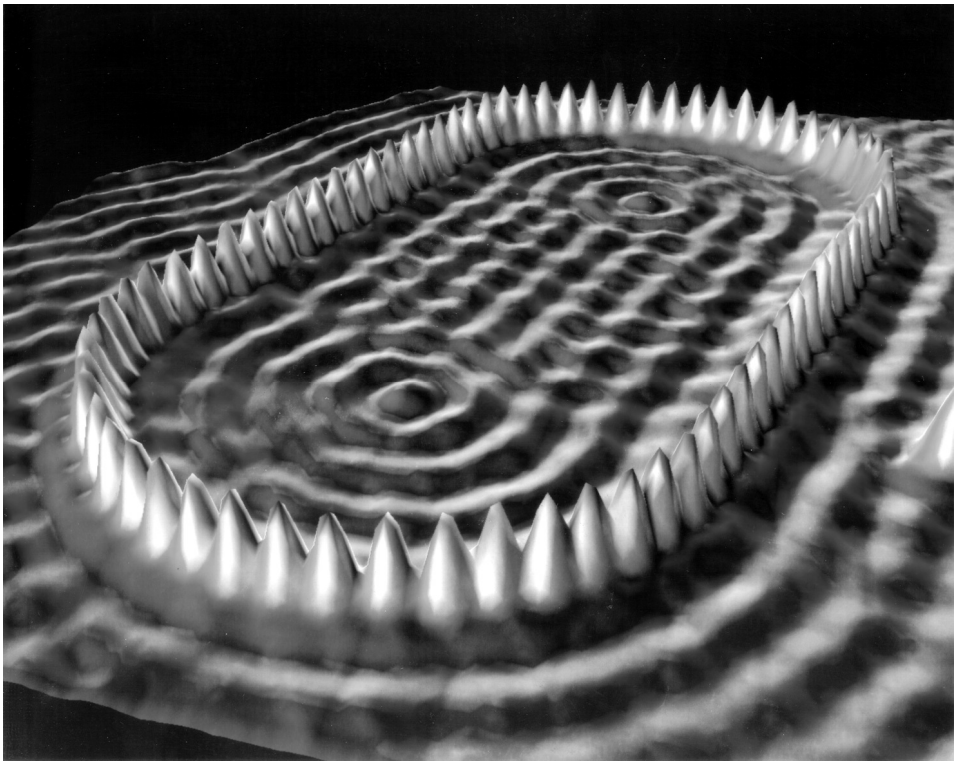
► $$R + T = 1 . \tag{2.102}$$

Kvantová teorie připouští průchod částice bariérou i v případě, že částice má nižší energii, než je hodnota potenciálu na vrcholu bariéry. Je to dáno nekomutativností potenciální a kinetické energie. Z Heisenbergových relací neurčitosti potom plyne, že obě hodnoty nemůžeme současně přesně měřit. Neurčitost kinetické a potenciální energie umožní tu a tam průchod částice bariérou. Tomuto jevu říkáme tunelový jev. Pravděpodobnost jevu exponenciálně klesá s tloušťkou bariéry. Typickým příkladem mohou být dvě oblasti kovu oddělené tenkým izolantem, přes který mohou tunelovat elektrony. Dalším příkladem jsou alfa částice tunelující z atomového jádra přes Coulombovu bariéru (viz potenciál 6 na obrázku 57) při radioaktivním alfa rozpadu. Na tunelovém jevu je založena tunelová dioda, rastrovací tunelový mikroskop a další zařízení.

Mikroskop STM

Mikroskop STM (*Scanning Tunneling Microscope*, rastrovací tunelový mikroskop) umožňuje zobrazit povrch pevné látky v rozlišení jednotlivých atomů. Povrch je doslova osaháván piezoelektricky vychylovaným wolframovým hrotem. Mezi povrchem a hrotem je nevodivá mezera, kterou tunelují elektrony. Vzniklý tunelový proud elektronů je velmi citlivý na vzdálenost hrotu od nerovnosti na povrchu látky. Jeho měřením tak vlastně zjistíme jakoukoli nerovnost na povrchu. Ve směru povrchu je rozlišení mikroskopu STM řádově 10^{-10} m, v kolmém směru k povrchu je však rozlišení řádově lepší v důsledku velmi silné nelineární závislosti velikosti proudu na vzdálenosti od povrchu. Na špičce wolframového hrotu je v ideálním případě jediný atom, podle toho, jak se hrot podaří vyleptat. Je to nejostřejší hrot jaký dokážeme vyrobit, používá se také jako studená katoda u rastrovacích elektronových mikroskopů. Rastrovací tunelový mikroskop umožňuje nejenom zviditelnit polohu atomů na povrchu krystalové mříže, ale také je přenášet z místa na místo, když se pomocí přiloženého elektrického napětí překoná chemická vazba s povrchem a atom se hrotem mikroskopu přenese.

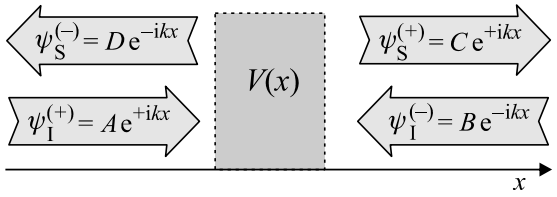
Mikroskop STM byl vyvinut Gerdem Binningem a Heinrichem Rohrerem v laboratořích IBM. Za svůj objev získali Nobelovu cenu za fyziku pro rok 1986.



Obr. 71: Ohrádka z atomů železa byla vytvořena na měděném povrchu za pomoci rastrovacího tunelového mikroskopu (STM). Výsledný povrch je skenován mikroskopem STM a z intenzity tunelového proudu v jednotlivých místech nad povrchem je vytvořena topografická mapa povrchu, na kterou se díváte. Uvnitř ohrádky jsou patrné stojaté hustotní vlny uvězněných elektronů. Tunelový jev umožnil lidstvu zkoumat látky na atomární úrovni a manipulovat s jednotlivými atomy. Crommie, Lutz & Eigler, IBM.

Rozptyl

Bariéra představuje jednoduchý příklad jednorozměrného lokalizovaného potenciálu. Je nenulový v malé prostorové oblasti, na kterou mohou nalétávat částice ze dvou směrů (zprava a zleva). Nalétávající částice popisují vlnové funkce $\psi_{\mathrm{I}}^{\pm}$. Částice interagují s oblastí nenulového potenciálu (říkáme, že se na něm rozptylují) a z oblasti částice vylétávají opět ve dvou směrech (napravo a nalevo). Popisují je vlnové funkce $\psi_{\mathrm{S}}^{\pm}$. Index S znamená rozptýlený (anglicky *scattered*). Vstupující i vystupující (rozptýlené) vlnové funkce jsou řešením Schrödingerovy rovnice s nulovým potenciálem, tedy jde o rovinné vlny. Po určité době se ustálí (v průběhu této doby se zaplní případné vázané stavy v oblasti potenciálu) tok částic jak do oblasti potenciálu, tak z oblasti potenciálu:



Obr. 72: Rozptyl na 1D lokalizovaném potenciálu

Chování částic na lokalizovaném 1D potenciálu popisuje matice rozptylu S definovaná vztahem

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}. \tag{2.103}$$

Matice rozptylu převádí vstupní svazky částic na rozptýlené. Jde o unitární matici, jak je snadno vidět ze zákona zachování toku pravděpodobnosti (rychlost × hustota) v ustáleném stavu:

$$\begin{aligned} j_{\text{zleva}} &= j_{\text{zprava}} \qquad \Rightarrow \\ v_{\text{zleva}} \left(A^* A - D^* D \right) &= v_{\text{zprava}} \left(C^* C - B^* B \right) \qquad \Rightarrow \\ \frac{\hbar k}{m} \left(A^* A - D^* D \right) &= \frac{\hbar k}{m} \left(C^* C - B^* B \right) \qquad \Rightarrow \\ C^* C + D^* D &= A^* A + B^* B \,. \end{aligned}$$

Matice S tedy nemění velikost vektoru. Ten má před a po působení matice stejnou velikost, což je definice unitarity:

$$\begin{aligned} &< \psi_{\mathrm{S}} \,|\, \psi_S > = < \psi_{\mathrm{I}} \,|\, \psi_{\mathrm{I}} > ; \\ &< S\psi_{\mathrm{I}} \,|\, S\psi_{\mathrm{I}} > = < \psi_{\mathrm{I}} \,|\, \psi_{\mathrm{I}} > . \end{aligned}$$

Vlastní čísla unitární matice leží v komplexní rovině na jednotkové kružnici a můžeme pro ně psát

$$\lambda_{1,2} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_{1,2}} \; ; \qquad \delta_{1,2} = f_{1,2}(k) \,. \tag{2.104}$$

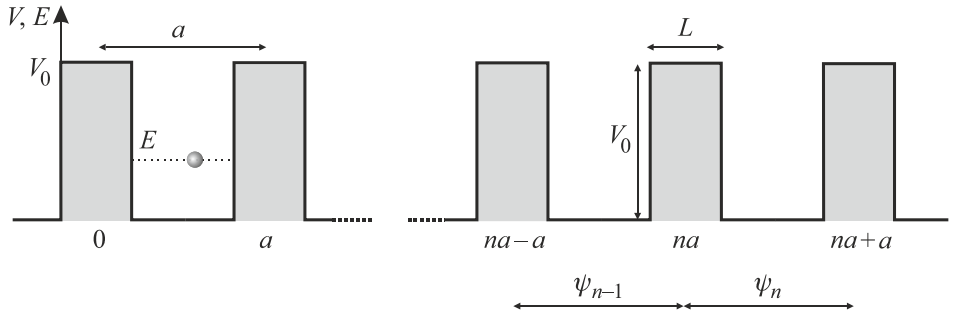
Rozptyl na lokalizovaném 1D potenciálu je proto charakterizován dvěma úhly $\delta_{1,2}(k)$, které jsou fází vlastních čísel matice rozptylu.

2.4.4 Periodický potenciál a pásové spektrum

Velmi častý je také pohyb částic v nelokalizovaném potenciálu, například v periodickém potenciálu krystalické mříže, který splňuje základní podmínku

$$V(x+a)=V(x)\,, \tag{2.105}$$

kde a je perioda potenciálu. K pochopení základních vlastností periodického potenciálu postačí řešit případ nekonečné posloupnosti střídajících se jam a bariér. Tento průběh potenciálu se nazývá Kronigův-Penneyův model. Poprvé ho použili německo-americký fyzik Ralph Kronig a anglický matematik William Penney. Budeme předpokládat, že výška opakujících se bariér je V_0, jejich šířka L a periodicita a.



Obr. 73: Kronigův-Penneyův model krystalu s periodickým potenciálem.

Kronigův-Penneyův model

Kvalitativní charakter spektra nezávisí na šířce jednotlivých bariér. Budeme je deformovat tak, aby zůstala zachována jejich plocha, tj. provedeme limitu $L \to 0$, $V_0 \to \infty$, tak, aby se součin LV_0 neměnil. Tím získáme potenciál složený z nekonečné řady Diracových impulzů a na každé bariéře postačí jedno jediné navázání vlnové funkce. Budeme tedy mít potenciál

$$V(x)=LV_0\sum_{n=-\infty}^{n=+\infty}\delta(x-na)\,, \tag{2.106}$$

pro který snadno nalezneme řešení na intervalu (na, $na + a$), kde je potenciál nulový:

$$\begin{aligned}\psi_n(x)&=A_n\cos[k(x-na)]+B_n\sin[k(x-na)]\,;\\ \psi_n'(x)&=-A_nk\sin[k(x-na)]+B_nk\cos[k(x-na)]\,;\\ k&\equiv 2mE/\hbar^2\,;\quad n=0,\pm1,\pm2\ldots\end{aligned} \tag{2.107}$$

Argument kmitavého řešení je vhodně posunut do lokálního počátku v místě každého Diracova impulzu, takže sinus začíná u každé jámy od nuly a kosinus od jednotky. Při navazování vlnových funkcí využijeme tři podmínky. Samotná vlnová funkce bude spojitá, první derivace bude mít skok (jde o Diracův impulz) a periodicita potenciálu povede na periodicitu hustoty pravděpodobnosti. Rozepišme nyní tyto tři podmínky pro navázání na n-tém Diracově impulzu (resp. na n-té infinitezimální bariéře):

1. spojitost vlnové funkce

Na každé bariéře musíme předpokládat spojitost vlnové funkce. Kdyby byla nespojitá, první derivace by dala distribuci a druhá derivace obsažená ve Schrödingerově rovnici by byla derivací distribuce, kterou by nebylo možné žádným dalším členem kompenzovat. Musí tedy platit:

$$\psi_{n-1}(na) = \psi_n(na)\,. \tag{2.108}$$

Odsud dostaneme první z výše zmíněných tří podmínek:

► $$A_{n-1}\cos(ka) + B_{n-1}\sin(ka) = A_n. \tag{2.109}$$

2. Skok v první derivaci

Napišme Schrödingerovu rovnici v naší situaci

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V(x)\psi = E\psi\,. \tag{2.110}$$

Rovnici budeme integrovat v ε-okolí n-tého Diracova impulzu:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{na-\varepsilon}^{na+\varepsilon}\psi''(x)\,\mathrm{d}x + LV_0\int_{na-\varepsilon}^{na+\varepsilon}\delta(x-na)\psi(x)\,\mathrm{d}x = \int_{na-\varepsilon}^{na+\varepsilon}E\psi(x)\,\mathrm{d}x\,.$$

Prostřední integrál lze spočítat vzhledem k přítomnosti Diracovy distribuce velmi snadno. V ostatních provedeme limitní přechod $\varepsilon \to 0$. Integrál na pravé straně dá díky spojitosti ψ nulu a levý integrál příslušný skok:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\lim_{\varepsilon\to 0}\left[\psi'\right]_{na-\varepsilon}^{na+\varepsilon} + LV_0\,\psi_n(na) = 0\,,$$

odsud plyne podmínka pro skok první derivace ψ na n-tém Diracově impulzu

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\psi_n'(na) - \psi_{n-1}'(na)\right] + LV_0\,\psi_n(na) = 0\,. \tag{2.111}$$

Po dosazení řešení (2.107) máme druhou podmínku:

► $$B_n + A_{n-1}\sin(ka) - B_{n-1}\cos(ka) = \frac{2mLV_0}{k\hbar^2}A_n\,. \tag{2.112}$$

3. Periodicita

Z periodicity potenciálu (2.105) plyne periodicita hustoty pravděpodobnosti

$$w(x+a) = w(x)\,; \qquad w(x) \equiv \psi^*(x)\,\psi(x)\,. \tag{2.113}$$

Odsud je jasné, že pro vlnovou funkci musí platit

$$\psi(x+a) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\,\psi(x)\,, \tag{2.114}$$

kde ϕ je nějaké fázové posunutí. Pro naše konstanty potom plyne:

► $$B_n = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\,B_{n-1}\,; \qquad A_n = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\,A_{n-1}\,. \tag{2.115}$$

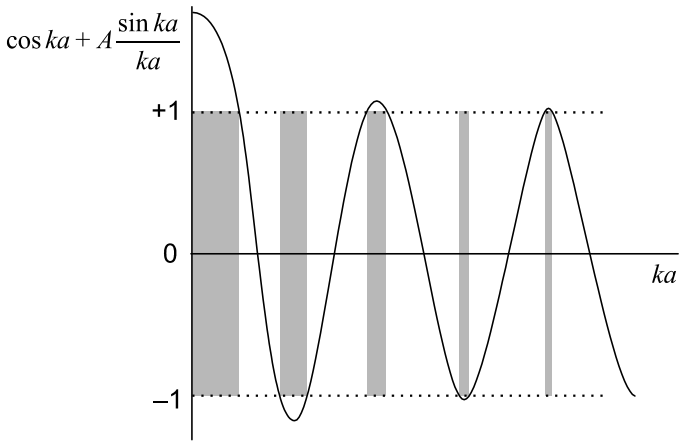
Nyní dosadíme A_{n-1} a B_{n-1} ze vztahu (2.115) do podmínek (2.109) a (2.112). Tím získáme soustavu rovnic pro neznámé konstanty A_n a B_n:

$$\begin{pmatrix} \cos ka - \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}, & \sin ka \\ \sin ka - \xi, & -(\cos ka - \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = 0\,; \qquad \xi \equiv \frac{2mLV_0}{k\hbar^2}\,. \tag{2.116}$$

Nenulové řešení získáme jen tehdy, pokud bude determinant soustavy nulový, což vede na podmínku:

► $$\cos\phi = \cos ka + A\frac{\sin ka}{ka}\,; \qquad A \equiv \frac{mLaV_0}{\hbar^2}\,. \tag{2.117}$$

Pravá strana této podmínky musí být z intervalu <–1, 1>, jinak úhel ϕ na levé straně nelze nalézt a řešení neexistuje. Výsledkem jsou pásy, ve kterých se částice pohybovat může, a zakázané pásy, ve kterých řešení neexistuje, tj. částice s takovou energií se v periodickém potenciálu nemůže vyskytovat. Připomeňme si, že vlnový vektor **k** je v podmínce (2.117) provázán s energií podle vztahu (2.107), tj. platí $k = 2mE/\hbar^2$.



Obr. 74: V grafu je vynesena pravá strana podmínky (2.117). Tam, kde je křivka mimo interval <–1,1>, řešení neexistuje a na grafu je šedou barvou označen zakázaný pás.

Zakázané pásy jsou typické v krystalových mřížích, v polovodičích, ale třeba i v periodických strukturách motýlích křídel, kde způsobují zajímavé, jakoby nepřirozené barvy.

Brillouinova zóna

Představme si nyní třírozměrnou periodicitu krystalické mříže, která se opakuje při každém posunutí o vektor **A**

► $$\mathbf{A} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3\,, \qquad n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3\ldots \tag{2.118}$$

kde $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$ jsou tři lineárně nezávislé vektory (neleží ve stejné rovině). Objem elementární buňky je dán objemem rovnoběžnostěnu nataženého na základní vektory mříže, tj.

$$V_{\mathrm{Z}} = \left|\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)\right|. \tag{2.119}$$

Potenciál musí splňovat podmínku periodicity

$$V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{A}) . \tag{2.120}$$

Periodicita mříže se samozřejmě přenáší i na hybnost pohybující se částice, která se při průletu mříží také periodicky mění. Hybnost je vždy provázána s vlnovým vektorem, tj.

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} . \tag{2.121}$$

V *k*-prostoru, do kterého se přeneseme Fourierovou transformací, bude periodicita znamenat jednoduchou podmínku na rovinnou vlnu

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{A}} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{A}} , \text{ tj.} \tag{2.122}$$

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{G}\cdot\mathbf{A}} = 1 ; \qquad \Rightarrow \qquad \mathbf{G}\cdot\mathbf{A} = 2N\pi ; \qquad N = 1, 2, 3\ldots \tag{2.123}$$

Periodicita v *k*-prostoru je tedy **G**, pro energii bude například platit

► $$E(\mathbf{k} + \mathbf{G}) = E(\mathbf{k}) . \tag{2.124}$$

Vektor **G** definuje tzv. reciprokou mříž v *k*-prostoru

► $$\mathbf{G} = m_1\mathbf{g}_1 + m_2\mathbf{g}_2 + m_3\mathbf{g}_3 ; \qquad m_1, m_2, m_3 = 1, 2, 3\ldots \tag{2.125}$$

Vektory $\mathbf{g}_l$ jsou lineárně nezávislé (neleží v rovině) a definují reciprokou mříž. Jejich rozměr je m^{-1}. Ze vztahu (2.123) plyne, že základní vektory reciproké mříže jsou

$$\mathbf{g}_1 = 2\pi\frac{\mathbf{a}_2\times\mathbf{a}_3}{V_\mathrm{Z}} ; \qquad \mathbf{g}_2 = 2\pi\frac{\mathbf{a}_3\times\mathbf{a}_1}{V_\mathrm{Z}} ; \qquad \mathbf{g}_2 = 2\pi\frac{\mathbf{a}_1\times\mathbf{a}_2}{V_\mathrm{Z}} . \tag{2.126}$$

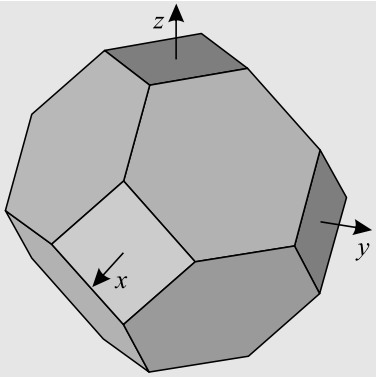
Mezi vektory $\mathbf{a}_k$ původní mříže a $\mathbf{g}_l$ reciproké mříže platí jednoduchý vztah

$$\mathbf{a}_k \cdot \mathbf{g}_l = 2\pi\delta_{kl} . \tag{2.127}$$

V reciproké mříži bude veškerá informace obsažena v základní buňce, kterou nazýváme *Brillouinova zóna*. Jejím nekonečným opakováním zrekonstruujeme celý *k*-prostor. Na hranici Brillouinových zón se veličiny mohou měnit skokem. Objem Brillouinovy zóny je dán objemem rovnoběžnostěnu nataženého na základní vektory mříže, tj.

$$V_\mathrm{B} = \left|\mathbf{g}_1 \cdot (\mathbf{g}_2 \times \mathbf{g}_3)\right| . \tag{2.128}$$

Koncept Brillouinových zón byl vytvořen francouzským fyzikem Léonem Brillouinem (1889–1969) a stal se neodmyslitelnou součástí dnešní teorie pevných látek a zejména polovodičů. Řešení v *k*-prostoru je mnohdy jednodušší a usnadní práci. My jsme se zde seznámili jen s tzv. první Brillouinovou zónou. Jejím opakováním můžeme vytvářet další Brillouinovy zóny. Řešení Schrödingerovy rovnice v třírozměrném periodickém potenciálu krystalu jde za rámec této úvodní učebnice kvantové mechaniky a čtenář ho nalezne ve specializovaných knihách, viz např. [23], [24].

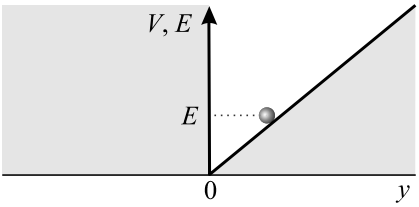


Obr. 75: Brillouinova zóna plošně centrované kubické soustavy.

2.4.5 Neutron v tíhovém poli

Gravitační interakce je nejslabší ze všech čtyř interakcí v přírodě. Snadno ji detekujeme u planet, hvězd a galaxií, ale dlouho se zdálo, že případné gravitační projevy elementárních částic jsou zcela mimo naše měřící možnosti. V roce 2011 se podařilo týmu z Vídeňské univerzity změřit detekovat kvantové stavy neutronu v tíhovém poli. Poprvé tak byly experimentálně pozorovány gravitační projevy elementární částice.

Uvažujme částici pohybující se v homogenním tíhovém poli. Pohyb částice je zdola omezen tvrdou podložkou. Jde o kvantovou analogii ping-pongu, kdy míček může poskakovat na stole, ale nemůže se dostat pod jeho desku. Situace je nakreslena na obrázku 76. Klasický pohyb částice je omezen zdola deskou stolu a shora maximální výškou, která je dána celkovou energií částice $E = \frac{1}{2}mv^2 + mgy$. Z hlediska kvantové teorie jde o nekonečnou trojúhelníkovou jámu, ve které má částice diskrétní energetické stavy.



Obr. 76: Kvantový pingpong.

Potenciální energie naší úlohy má tvar

$$V(y) = \begin{cases} \infty\,; & y \le 0\,, \\ mgy\,; & y > 0\,. \end{cases} \tag{2.129}$$

Schrödingerovu rovnici budeme řešit v oblasti $y > 0$ a budeme požadovat, aby $\psi(0) = 0$. Samotná rovnice má tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}y^2} + mgy\psi = E\psi\,. \tag{2.130}$$

Rovnici lze řešit obdobným postupem jako harmonický oscilátor v x reprezentaci. Nejprve zavedeme bezrozměrný argument vlnové funkce:

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\bar{y}^2} - \bar{y}\psi + \lambda\psi = 0\,; \qquad \bar{y} \equiv \frac{y}{y_0}\,; \qquad \lambda \equiv \frac{E}{mg\,y_0}\,; \qquad y_0 \equiv \sqrt[3]{\frac{\hbar^2}{2m^2 g}} \tag{2.131}$$

Vlastní číslo λ je ve skutečnosti bezrozměrnou energií. Proměnnou $\bar{y}$ ještě posuneme podle předpisu

$$\xi \equiv \bar{y} - \lambda \tag{2.132}$$

a výsledná rovnice bude

$$\psi'' - \xi\psi = 0\,; \qquad ' \equiv \mathrm{d}/\mathrm{d}\xi\,. \tag{2.133}$$

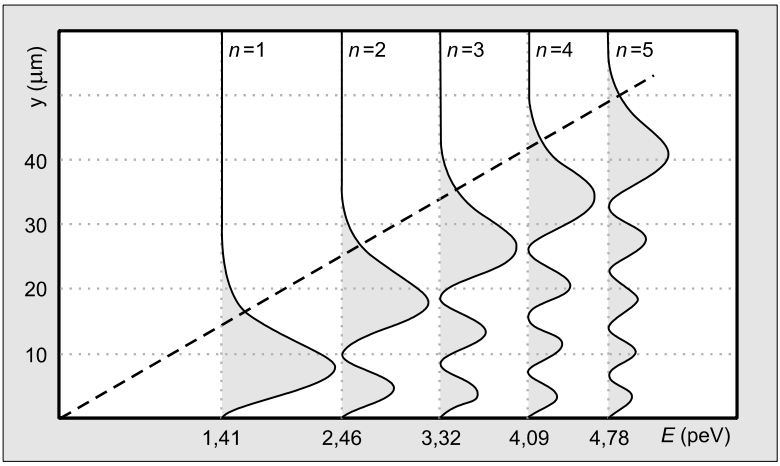
Jde o Airiho rovnici, jejímž řešením jsou Airiho funkce Ai(ξ) a Bi(ξ), viz například [25], [26]. Obě funkce lze definovat za pomoci řady, pomocí Besselových funkcí nebo pomocí integrálního vyjádření:

$$\mathrm{Ai}(\xi) = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \cos\left(t^3/3 + \xi t\right)\mathrm{d}t\,;$$
$$\mathrm{Bi}(\xi) = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \left[\exp\left(-t^3/3 + \xi t\right) + \sin\left(t^3/3 + \xi t\right)\right]\mathrm{d}t\,. \tag{2.134}$$

Funkce Bi(ξ) pro velká ξ diverguje a není integrovatelná, proto je řešením úlohy

$$\psi(\xi) = \mathrm{Ai}(\xi)\,. \tag{2.135}$$

Okrajová podmínka $\psi(\xi) = 0$ vede na numerické hledání nulových bodů Airiho funkce a tím na kvantování energie, která je v argumentu Airiho funkce, neboť $\xi = \bar{y} - \lambda(E)$. Hodnoty prvních pěti energetických stavů spolu s hustotou pravděpodobnosti výskytu částice jsou na obrázku:



Obr. 77: Kvantový míček v tíhovém poli. Na vodorovné ose je energie míčku, vyznačeny jsou přípustné energetické stavy v kvantové teorii. Na svislé ose je výška nad podložkou. Přerušovanou čárou je znázorněna výška, které by poskakující míček s danou energií dosáhl v klasické mechanice. Šedě je vyznačena kvantová pravděpodobnost výskytu míčku (její hodnota narůstá směrem doprava).

Kvantový pingpong s neutronem

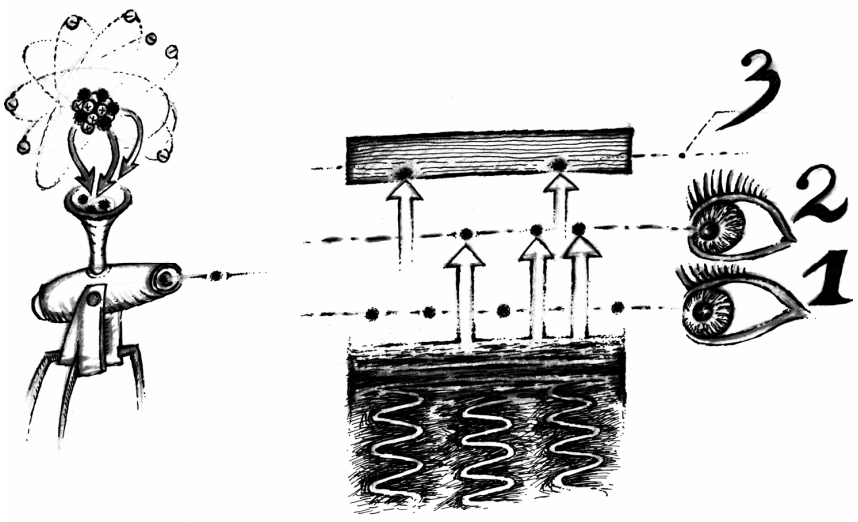
Experimenty s tíhovým polem působícím na elementární částice prováděla skupina vědců pod vedením profesora Hartmuta Abeleho z Vídeňské technické univerzity [27]. Součástí skupiny byli i vědci z Laueho-Langevinova ústavu v Grenoblu (ILL, Institute Laue-Langevin), kde byly experimenty fyzicky prováděny. Jako testovací míček posloužil neutron, který je minimálně ovlivňován všudypřítomnými elektromagnetickými silami. Neutron je velmi obtížně polarizovatelný, takže na něho nepůsobí ani různé dipólové síly, jako je například van der Waalsova síla. Neutron má pro experimenty s gravitací dostatečnou životnost, jeho poločas rozpadu je přes 800 sekund. K experimentům byl použit zdroj ultrachladných neutronů s velmi nízkou energií. Jedině u takových částic bylo možné měřit kvantové stavy neutronu v tíhovém poli. Proto byl použit zdroj neutronů z Laueho-Langevinova ústavu v Grenoblu, který vytváří neutrony s ener-

gií nižší než 300 neV (nanoelektronvoltů), tomu odpovídá teplota nižší než 2 mK (milikelviny) a rychlost nižší než 15 m/s.

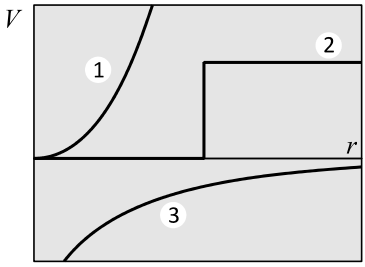
Pokud poskakuje na stole míček, může se dostat do libovolné výšky dané jeho celkovou energií. Kvantový míček v tíhovém poli se nachází jen v určitých energetických stavech daných naším řešením Schrödingerovy rovnice. Kvantový míček vystoupá jen do určitých výšek daných možnými energetickými stavy. Nejnižší energetický stav pro poskakující míček je 1,41 peV (pikoelektronvoltů), druhý 2,46 peV, třetí 3,32 peV atd. Pro normální pinpongový míček jsou tyto stavy neměřitelné, pro ultrachladné neutrony je možné takové stavy detekovat. Pravděpodobnost výskytu míčku v určité výšce nad podložkou je dána kvadrátem Airiho funkce.

Ultrachladné neutrony byly nasměrovány mezi dvě vodorovné desky. Spodní deska sloužila jako podložka, od které se neutron, pohybující se v klasickém případě po oblouku, může odrazit. Horní deska byla pomocná a byla zkonstruována tak, aby pohltila neutrony, které se dostaly až do její výšky. Vzdálenost mezi deskami byla přibližně 20 až 25 mikrometrů, takže neutrony v prvním a druhém kvantovém stavu mohly bez problémů prolétnout mezi deskami (nedosáhly výšky druhé desky). Chladné neutrony to ale neměly tak jednoduché. Spodní deska totiž vibrovala řízeným způsobem. Byla rozkmitána za pomoci piezoelektrického jevu a její kmity byly přesně kontrolovány za pomoci laseru. Pokud deska vibrovala, způsobila rezonanční přeskok neutronů mezi prvním a třetím energetickým stavem a většina neutronů mezi deskami neprolétla, protože třetí energetický stav znamená, že se neutron dostal až do výšky horní desky a byl jí absorbován. Pokud dolní deska nevibrovala, většina neutronů mezi deskami prošla.

Historicky poprvé byly měřeny kvantové stavy částice v gravitačním poli a bylo možné tyto stavy změnit za pomoci vibrující destičky. Tato rezonanční metoda může mít zcela zásadní vliv na poznání gravitační interakce na malých měřítkách, kde dosud chyběla jakákoli měření. Máme vysokou šanci se dozvědět, jak gravitace funguje ve světě elementárních částic a zda se skutečnost odchyluje od Newtonových a Einsteinových představ, či nikoli.



2.5 Sféricky symetrický potenciál



1 sférický harmonický oscilátor
2 sférická jáma
3 Coulombův potenciál

$V = V(r)$
$r \in <0,\infty)$

Obr. 79: Některé sférické potenciály.

Sféricky symetrickým (centrálním) nazýváme potenciál, který závisí jen na vzdálenosti od určitého středového bodu. Pro popis pohybu těles v sféricky symetrickém potenciálu je velmi výhodná sférická souřadnicová soustava. Mezi nejznámější sférické potenciály patří sférický harmonický oscilátor, sférická jáma a Coulombův potenciál. Sférický oscilátor si můžete představit jako tělísko v počátku souřadnic, od kterého vedou pružiny na všechny strany. Kdykoli ho vychýlíme, bude působit vratná síla směrem do středu. Průběh potenciální energie je kvadratický. Sférická jáma přibližně odpovídá potenciálu, který pociťuje neutron zachycený v atomovém jádře. Jaderné síly (derivace potenciálu) na hranici jámy ($r = a$) jsou značné – v idealizaci (2.136) dokonce nekonečné – a v jiných oblastech velmi slabé. Coulombův potenciál se uplatní například ve vodíkovém atomu, kdy osamocený elektron podléhá působení jediného protonu v atomovém jádře. Nezapomínejte, že $r \in <0, \infty)$. Průběhy těchto známých potenciálů jsou:

$$\begin{aligned} &(1) \qquad V(r) = \frac{1}{2} k r^2, \\ &(2) \qquad V(r) = \begin{cases} 0 & r < a \\ V_0 & r \geq a \end{cases}, \\ &(3) \qquad V(r) = \frac{qQ}{4\pi\varepsilon_0 r} = -\frac{\alpha}{r}. \end{aligned} \tag{2.136}$$

V klasické mechanice bude systém popsán Lagrangeovou funkcí, zobecněnými hybnostmi a energií a Hamiltonovou funkcí ve sférickém souřadnicovém systému takto:

$$L = \frac{1}{2} m\dot{r}^2 + \frac{1}{2} m r^2 \sin^2\theta\, \dot{\varphi}^2 + \frac{1}{2} m r^2 \dot{\theta}^2 - V(r), \tag{2.137}$$

$$\begin{aligned} p_r &= m\dot{r}, \\ p_\varphi &= m r^2 \sin^2\theta\, \dot{\varphi}, \\ p_\theta &= m r^2 \dot{\theta}, \end{aligned} \tag{2.138}$$

$$E = \frac{1}{2} m\dot{r}^2 + \frac{1}{2} mr^2 \sin^2\theta\, \dot{\varphi}^2 + \frac{1}{2} mr^2 \dot{\theta}^2 + V(r), \tag{2.139}$$

$$H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\theta^2}{2mr^2} + \frac{p_\varphi^2}{2mr^2 \sin^2\theta} + V(r) = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{\mathbf{L}^2}{2mr^2} + V(r). \tag{2.140}$$

Již v klasické mechanice jsme si ukázali, že zobecněné hybnosti odpovídající úhlovým proměnným jsou komponenty momentu hybnosti. Druhá část Hamiltonovy funkce odpovídá *rotačním stupňům volnosti* a lze ji zapsat pomocí vektoru momentu hybnosti **L** vzhledem k ose *z*, od které je odvozen sférický souřadnicový systém.

Z předchozího již víme, že jednotlivé složky momentu hybnosti nejsou současně měřitelné a nekomutují spolu (2.25). Současně ale můžeme měřit kvadrát momentu hybnosti (2.26) a libovolnou z jeho složek (2.27). U sféricky symetrického problému budeme preferovat třetí osu a třetí složku. Osa *z* má preferované postavení při budování sférického souřadnicového systému, ve skutečnosti je však lhostejné, kterou ze složek momentu hybnosti zvolíme do úplné množiny pozorovatelných. Je-li v systému přítomno vnější magnetické pole, volíme zpravidla souřadnicový systém tak, aby třetí osa mířila ve směru tohoto pole, osa *z* je potom současně směrem vnějšího magnetického pole. Je-li systém sféricky symetrický, potom kvadrát momentu hybnosti komutuje s hamiltoniánem:

$$\left[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{H}}\right] = \left[\hat{\mathbf{L}}^2, \frac{p_r^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2mr^2} + V(r)\right] = \left[\hat{\mathbf{L}}^2, \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2mr^2}\right] = 0.$$

Víme totiž, že zobecněné souřadnice nekomutují jedině se svými zobecněnými hybnostmi. V komutátoru mezi kvadrátem momentu hybnosti a hamiltoniánem mohou tedy být jediné nenulové členy s úhlovou částí hamiltoniánu, ale operátor sám se sebou komutuje, takže výsledek může být jedině nulový. Podobně tomu je se třetí složkou momentu hybnosti:

$$\left[\hat{\mathbf{L}}_3, \hat{\mathbf{H}}\right] = \left[\hat{\mathbf{L}}_3, \frac{p_r^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2mr^2} + V(r)\right] = \left[\hat{\mathbf{L}}_3, \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2mr^2}\right] = \frac{1}{2mr^2}\left[\hat{\mathbf{L}}_3, \hat{\mathbf{L}}^2\right] = 0.$$

Nalezli jsme tak trojici nezávislých komutujících operátorů, která tvoří úplnou množinu pozorovatelných u nerelativistického sféricky symetrického problému (v relativistické úloze k těmto proměnným ještě přibude spin):

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{L}}_3] = [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{H}}] = [\hat{\mathbf{L}}_3, \hat{\mathbf{H}}] = 0. \tag{2.141}$$

U soustavy nezávislých vzájemně komutujících operátorů je možné hledat společné vlastní vektory ke všem operátorům. U sféricky symetrického problému budeme tedy řešit soustavu tří rovnic pro vlastní vektory

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}} \,|\, v,l,m > &= E_v \,|\, v,l,m >, \\ \hat{\mathbf{L}}^2 \,|\, v,l,m > &= \lambda_l \,|\, v,l,m >, \\ \hat{\mathbf{L}}_3 \,|\, v,l,m > &= \mu_m \,|\, v,l,m >. \end{aligned} \tag{2.142}$$

Index v čísluje energetické stavy, index l stavy kvadrátu momentu hybnosti a index m stavy projekce momentu hybnosti do libovolné osy (zvolili jsme třetí osu). Vlastní čísla

jsme označili E, λ, μ. Tuto soustavu je třeba řešit současně. Co by se stalo, kdybychom například řešili jen rovnici pro energii? Nalezená vlastní čísla E by samozřejmě byla v pořádku, ale ke každému vlastnímu číslu (každé hodnotě energie) by existovalo více nezávislých vlastních vektorů (ve skutečnosti se od sebe liší čísly l a m, to ale nevíme, protože řešíme jen první rovnici). Tomuto typu spektra říkáme *degenerované spektrum*. Znamená to jen to, že k danému vlastnímu číslu existuje více vlastních vektorů. Odlišili bychom je od sebe až pomocí dalších operátorů, které komutují s operátorem, jehož spektrum právě hledáme.

V následujících dvou kapitolách se budeme zabývat momentem hybnosti, tedy druhou a třetí rovnicí v (2.142). Řešení pro moment hybnosti je stejné pro všechny průběhy potenciální energie. V kapitole 2.5.1 nalezneme řešení bez použití konkrétní reprezentace a v kapitole 2.5.2 naznačíme, jak by se při řešení postupovalo v x reprezentaci. První rovnicí v (2.142) se budeme zabývat v kapitole 2.5.3. Řešení pro energii (energetické spektrum) již samozřejmě závisí na průběhu potenciální energie a je jiné například pro vodík a jiné pro sférický oscilátor. Navíc řešení pro energii závisí na číslech l a m. To je logické: moment hybnosti souvisí s rotačními stavy systému a ty k energii přispívají. Vidíme to koneckonců i v hamiltoniánu (2.140), kde je právě rotační část energie vyjádřena přes kvadrát momentu hybnosti.

2.5.1 Moment hybnosti

Základními komutačními relacemi pro moment hybnosti jsou vztahy (2.25) a (2.27):

$$[\hat{\mathbf{L}}_1, \hat{\mathbf{L}}_2] = \mathrm{i}\hbar\hat{\mathbf{L}}_3,$$
$$[\hat{\mathbf{L}}_2, \hat{\mathbf{L}}_3] = \mathrm{i}\hbar\hat{\mathbf{L}}_1,$$
$$[\hat{\mathbf{L}}_3, \hat{\mathbf{L}}_1] = \mathrm{i}\hbar\hat{\mathbf{L}}_2,$$
$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{L}}_3] = 0.$$

Zaveďme nyní tzv. posuvné operátory

$$\hat{\mathbf{L}}_\pm \equiv \hat{\mathbf{L}}_1 \pm \mathrm{i}\,\hat{\mathbf{L}}_2 . \tag{2.143}$$

Tyto operátory budou mít podobný význam jako kreační a anihilační operátory u energie harmonického oscilátoru. Budou nás totiž posouvat ve spektru momentu hybnosti. Napišme přehledně jejich důležité vlastnosti (všechny lze snadno odvodit z definice posuvných operátorů a z komutačních relací momentu hybnosti):

$$\begin{aligned}
&(1)\quad \hat{\mathbf{L}}_1 = \frac{1}{2}\left(\hat{\mathbf{L}}_+ + \hat{\mathbf{L}}_-\right), && (5)\quad \hat{\mathbf{L}}_-\hat{\mathbf{L}}_+ = \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{L}}_3^2 - \hbar\hat{\mathbf{L}}_3 ,\\
&(2)\quad \hat{\mathbf{L}}_2 = \frac{1}{2\mathrm{i}}\left(\hat{\mathbf{L}}_+ - \hat{\mathbf{L}}_-\right), && (6)\quad \left[\hat{\mathbf{L}}_+, \hat{\mathbf{L}}_-\right] = 2\hbar\hat{\mathbf{L}}_3 ,\\
&(3)\quad \hat{\mathbf{L}}_\pm^\dagger = \hat{\mathbf{L}}_\mp , && (7)\quad \left[\hat{\mathbf{L}}_3, \hat{\mathbf{L}}_\pm\right] = \pm\hbar\hat{\mathbf{L}}_\pm ,\\
&(4)\quad \hat{\mathbf{L}}_+\hat{\mathbf{L}}_- = \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{L}}_3^2 + \hbar\hat{\mathbf{L}}_3 , && (8)\quad \left[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{L}}_\pm\right] = 0 .
\end{aligned} \tag{2.144}$$

Známe-li posuvné operátory, můžeme z relací (1), (2) a (6) zrekonstruovat celý moment hybnosti. Úlohu, kterou budeme nyní řešit, lze zformulovat takto:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 \mid \lambda,\mu > \; = \lambda \mid \lambda,\mu >,$$
$$\hat{\mathbf{L}}_3 \mid \lambda,\mu > \; = \mu \mid \lambda,\mu >.$$

Nejprve odvoďme tři pomocná lemmata týkajících se posuvných operátorů:

Lemma 1

Tvrzení: Posuvné operátory posouvají vlastní vektory ve třetí komponentě momentu hybnosti o Planckovu konstantu:

$$\hat{\mathbf{L}}_\pm \mid \lambda,\mu > \; \approx \; \mid \lambda,\mu \pm \hbar >.$$

Důkaz: Označme $\mid \psi > \equiv \hat{\mathbf{L}}_\pm \mid \lambda,\mu >$. Aplikujme operátory $\hat{\mathbf{L}}_3$ a $\hat{\mathbf{L}}^2$ na tento vektor: K vyjádření třetí složky a kvadrátu momentu hybnosti využijeme sadu základních vlastností (2.144). Z vlastnosti (7) určíme třetí složku a z vlastnosti (8) kvadrát momentu hybnosti:

$$\hat{\mathbf{L}}_3 \mid \psi > = \hat{\mathbf{L}}_3 \hat{\mathbf{L}}_\pm \mid \lambda,\mu > =$$
$$= (\hat{\mathbf{L}}_\pm \hat{\mathbf{L}}_3 \pm \hbar \hat{\mathbf{L}}_\pm) \mid \lambda,\mu > =$$
$$= (\mu \pm \hbar) \hat{\mathbf{L}}_\pm \mid \lambda,\mu > = (\mu \pm \hbar) \mid \psi >;$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 \mid \psi > = \hat{\mathbf{L}}^2 \hat{\mathbf{L}}_\pm \mid \lambda,\mu > =$$
$$= \hat{\mathbf{L}}_\pm \hat{\mathbf{L}}^2 \mid \lambda,\mu > =$$
$$= \lambda \, \hat{\mathbf{L}}_\pm \mid \lambda,\mu > = \lambda \mid \psi >.$$

Vidíme, že posuvné operátory posouvají ve spektru operátoru třetí složky o konstantu $\pm\hbar$. Ve spektru operátoru kvadrátu momentu hybnosti nedělají posuvné operátory nic. Posuvné operátory tedy mění jen hodnotu projekce momentu hybnosti do zvolené osy. ■

Lemma 2

Tvrzení: Při fixním λ je spektrum operátoru $\hat{\mathbf{L}}_3$ omezené, tj. existuje $\mu_{\min}$ a $\mu_{\max}$.

Důkaz: V relacích

$$\hat{\mathbf{L}}^2 \mid \lambda,\mu > = \; \lambda \; \mid \lambda,\mu >;$$
$$\left(\hat{\mathbf{L}}_1^2 + \hat{\mathbf{L}}_2^2 \right) \mid \lambda,\mu > \; = \; \left(\hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{L}}_3^2 \right) \mid \lambda,\mu > = (\lambda - \mu^2) \mid \lambda,\mu >$$

jsou operátory na levých stranách pozitivně definitní. Proto musí platit $\lambda \geq 0$, $\lambda - \mu^2 \geq 0$. Zřejmě tedy musí být $\mu^2 \leq \lambda \;\wedge\; \lambda \geq 0$, a proto $\mu \in \langle -\sqrt{\lambda}, +\sqrt{\lambda} \rangle$ a existuje $\mu_{\min}$ a $\mu_{\max}$.

■

Lemma 3

Spektrum je symetrické kolem nuly, tj. $\mu_{\min} = -\mu_{\max}$.

Důkaz: Podobně jako u harmonického oscilátoru zapůsobíme posuvným operátorem na první (resp. poslední) stav. Výsledek působení musí být nulový, protože další stav neexistuje. Poté napíšeme kvadrát normy tohoto vektoru a provedeme jednoduché úpravy:

$$\hat{\mathbf{L}}_+ \mid \lambda,\mu_{\max} > = 0, \qquad \wedge \qquad \hat{\mathbf{L}}_- \mid \lambda,\mu_{\min} > = 0,$$
$$< \lambda,\mu_{\max} \mid \hat{\mathbf{L}}_- \hat{\mathbf{L}}_+ \mid \lambda,\mu_{\max} > = 0, \qquad \wedge \qquad < \lambda,\mu_{\min} \mid \hat{\mathbf{L}}_+ \hat{\mathbf{L}}_- \mid \lambda,\mu_{\min} > = 0,$$
$$< \lambda,\mu_{\max} \mid \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{L}}_3^2 - \hbar \hat{\mathbf{L}}_3 \mid \lambda,\mu_{\max} > = 0, \quad \wedge \quad < \lambda,\mu_{\min} \mid \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{L}}_3^2 + \hbar \hat{\mathbf{L}}_3 \mid \lambda,\mu_{\min} > = 0,$$

$$(\lambda-\mu_{\max}^2-\mu_{\max}\hbar)\,||\,\lambda,\mu_{\max}\,||^2=0\,,\quad\wedge\quad(\lambda-\mu_{\min}^2+\mu_{\min}\hbar)\,||\,\lambda,\mu_{\min}\,||^2=0\,,$$

$$\lambda=\mu_{\max}^2+\mu_{\max}\hbar\quad\wedge\quad\lambda=\mu_{\min}^2-\mu_{\min}\hbar\,. \tag{2.145}$$

Označíme-li $\mu_{\max}\equiv a$, $\mu_{\min}=b$, potom platí

$$a^2+a\hbar=b^2-b\hbar\qquad\Rightarrow$$

$$b^2-b\hbar-(a^2+a\hbar)=0\qquad\Rightarrow$$

$$b=\frac{1}{2}\left(\hbar\pm\sqrt{\hbar^2+4(a^2+a\hbar)}\right)=\frac{1}{2}\left(\hbar\pm\sqrt{\hbar^2+4a\hbar+4a^2}\right)=$$

$$=\frac{1}{2}\left(\hbar\pm\sqrt{(\hbar+2a)^2}\right)=$$

$$\frac{1}{2}\left(\hbar\pm(\hbar+2a)\right)=\begin{cases}a+\hbar,\\-a.\end{cases}$$

První řešení je ve sporu s tím, že a je maximální hodnota, druhé řešení dokazuje lemma o symetričnosti spektra projekce momentu hybnosti. ■

Spektrum projekce momentu hybnosti

Posuvné operátory posouvají třetí komponentu momentu hybnosti o Planckovu konstantu, proto musí platit:

$$\mu=-a,-a+\hbar,-a+2\hbar,\ \ldots,a-\hbar,a\,.$$

Zaveďme bezrozměrné charakteristiky $m\equiv\mu/\hbar$, $l=a/\hbar$. Potom

$$m\in\{-l,-l+1,-l+2,\ldots,l-1,l\}\,. \tag{2.146}$$

Číslo m tedy může nabývat celkem $2l+1$ různých hodnot. Počet hodnot $2l+1$ musí být nezáporné celé číslo, a proto samo číslo l může nabývat jen poločíselných hodnot, tj.

$$l\in\{0,\frac{1}{2},1,\frac{3}{2},2,\frac{5}{2},\ldots\}\,. \tag{2.147}$$

Vlastní číslo $\lambda=\mu_{\max}\,(\mu_{\max}+\hbar)=l\,\hbar\,(l\,\hbar+\hbar)=\hbar^2\,l\,(l+1)$.

Závěr

Výsledky celého odvození můžeme zformulovat takto:

$$\begin{aligned}&\hat{\mathbf{L}}^2\,|\,l,m>=l\,(l+1)\hbar^2\,|\,l,m>,\qquad l\in\{0,\tfrac{1}{2},1,\tfrac{3}{2},2,\tfrac{5}{2},\ldots\};\\ \blacktriangleright\quad&\hat{\mathbf{L}}_3\,|\,l,m>=m\,\hbar|\,l,m>,\qquad m\in\{-l,-l+1,\ldots,l-1,l\};\\&\hat{\mathbf{L}}_\pm\,|\,l,m>\approx|\,l,m\pm1>.\end{aligned} \tag{2.148}$$

Poznámky k řešení

Následující poznámky jsou velmi důležité, čtěte je pozorněji než samo řešení!

Poznámka 1: Číslo l čísluje velikost momentu hybnosti a nazývá se *vedlejší kvantové číslo* (hlavní kvantové číslo čísluje energii). Číslo m čísluje projekci momentu hybnosti do libovolné osy a nazývá se *magnetické kvantové číslo*. Název souvisí s tím, že elektron v atomárním obalu má moment hybnosti úměrný magnetickému momentu, takže číslo m popisuje jak kvantování momentu hybnosti, tak magnetického momentu.

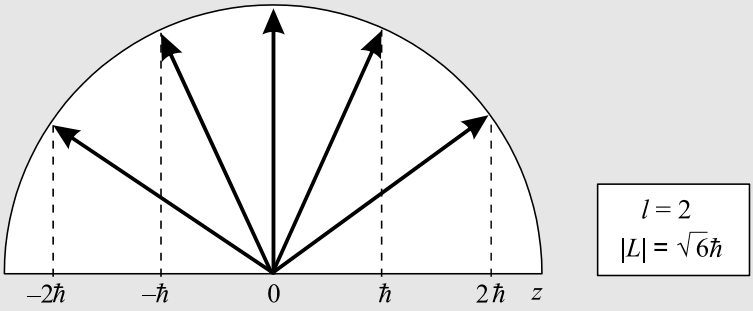
Poznámka 2: Možné hodnoty velikosti momentu hybnosti a jeho projekce jsou:

$$\begin{aligned} |L| &= \sqrt{l(l+1)}\,\hbar\,, & l &= 0, 1, 2, 3, \ldots; \\ L_3 &= m\hbar\,, & m &= -l, -l+1, \ldots, l\,. \end{aligned} \tag{2.149}$$

Poznámka 3: *Poločíselné hodnoty*, které jsme odvodili pro číslo l, jsou skutečně také možné. Realizují se u spinu, jehož operátor má stejnou komutační strukturu jako moment hybnosti. V Schrödingerově x reprezentaci (následující kapitola) tyto hodnoty nedostaneme. Volba reprezentace zde znamená *ztrátu části řešení*. To, že poločíselné hodnoty l jsou již součástí komutačních relací (2.25) bylo objeveno až relativně pozdě (v roce 1968) postupem podobným našemu odvození.

Poznámka 4: Skutečný význam Planckovy konstanty plyne z výsledku (2.149), respektive (2.148). Jedná se o *elementární kvantum momentu hybnosti*. Při měření momentu hybnosti budeme vždy měřit projekci momentu do určité osy, dané měřicím zařízením. Tato projekce je vždy násobkem redukované Planckovy konstanty (Planckovy-Diracovy konstanty).

Poznámka 5: Vidíme, že stavy s konkrétním vedlejším kvantovým číslem l jsou degenerovány – existuje více vlastních vektorů $|l, m\rangle$, které přísluší stejnému kvantovému číslu l. Tyto vektory se od sebe liší kvantovým číslem m a jejich počet je $2l+1$ (tzv. stupeň degenerace, který označujeme symbolem #).



Obr. 80: Možné projekce momentu hybnosti pro $l = 2$.

Poznámka 6: Historicky byly označovány kvantové stavy velikosti momentu hybnosti elektronu v obalu atomu vodíku písmeny s, p, d, f podle tabulky na následující stránce:

$l = 0$	s stav	$m = 0$	$\# = 1$
$l = 1$	p stav	$m = -1, 0, 1$	$\# = 3$
$l = 2$	d stav	$m = -2, -1, 0, 1, 2$	$\# = 5$
$l = 3$	f stav	$m = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$	$\# = 7$

Poznámka 7: Vztah pro velikost kvadrátu momentu hybnosti lze dostat také jako aritmetický průměr všech možných hodnot. Například pro $l = 2$ jsou možné hodnoty projekcí L_x, L_y nebo L_z rovny $-2\hbar$, $-\hbar$, 0, $\hbar$, $2\hbar$. Průměrná hodnota kvadrátu je proto dána vztahem (výsledek odpovídá hodnotě vypočtené z 2.149)

$$<L^2> = <L_x^2> + <L_y^2> + <L_z^2> = 3<L_z^2> =$$

$$= 3\,\frac{4\hbar^2 + \hbar^2 + 0 + \hbar^2 + 4\hbar^2}{5} = 6\,\hbar^2.$$

Poznámka 8: Není obtížné napočítat jednotlivé maticové elementy

$$< l, m' | \hat{\mathbf{L}}_k | l, m >$$

operátoru momentu hybnosti ve vlastní reprezentaci pomocí posuvných operátorů, podobně jako u harmonického oscilátoru v kapitole 2.3, pokud určíme normovací konstanty. Pro $l = 0$ může být m i m' jen 0, a proto jde o jediný prvek. Tato matice působí na skalární veličiny, hovoříme o *skalární reprezentaci*. Pro $l = 1/2$ může nabývat m i m' hodnot $-1/2$ a $+1/2$. Jde o matice 2×2 působící na uspořádané dvojice, které nazýváme spinory. Jedná se o tzv. *spinorovou reprezentaci*. Pro $l = 1$ může nabývat m i m' hodnot -1, 0 a $+1$. Jde o matice 3×3 působící na uspořádané trojice, které nazýváme vektory. Jedná se o tzv. *vektorovou reprezentaci*. Všimněte si, že matice $\mathbf{L}_3$ jsou diagonální s vlastními čísly na diagonále.

Spinorová reprezentace ($l = 1/2$)

$$\mathbf{L}_1 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & +1 \\ +1 & 0 \end{pmatrix}; \qquad \mathbf{L}_2 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ +\mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}; \qquad \mathbf{L}_3 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.150)$$

Vektorová reprezentace ($l = 1$)

$$\mathbf{L}_1 = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{L}_2 = \hbar\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{L}_3 = \hbar\begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.151)$$

Matice pro $l = 1/2$ (bez násobících koeficientů) se nazývají Pauliho matice.

Poznámka 9: Známé tvrzení Bohrova modelu, že na obvod dráhy elektronu v atomárním obalu musí připadnout celistvý n-násobek vlnových délek, je možné s pomocí vztahu (2.5) přepsat takto:

$$n\lambda = 2\pi r_n \qquad \Rightarrow \qquad n\,\frac{2\pi\hbar}{m_\mathrm{e} v_n} = 2\pi r_n \qquad \Rightarrow \qquad m_\mathrm{e} v_n r_n = n\hbar$$

a nejde tedy o nic jiného než o kvantování projekce momentu hybnosti.

2.5.2 Řešení v *x* reprezentaci, kulové funkce

V *x* reprezentaci budeme problém sférického potenciálu řešit ve sférických souřadnicích (jsou nejbližší symetrii potenciální energie). Je třeba řešit soustavu rovnic (2.142), která bude mít nyní tvar:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}}\psi(r,\varphi,\theta) &= E_v\,\psi(r,\varphi,\theta)\,, \\ \hat{\mathbf{L}}^2\psi(r,\varphi,\theta) &= \lambda_l\,\psi(r,\varphi,\theta)\,, \\ \hat{\mathbf{L}}_3\psi(r,\varphi,\theta) &= \mu_m\,\psi(r,\varphi,\theta)\,. \end{aligned} \qquad (2.152)$$

Přepišme nyní operátory do sférických souřadnic. K tomu účelu si nejprve rozložme Laplaceův operátor ve sférických souřadnicích na radiální a úhlovou část:

$$\begin{aligned} \nabla^2 &= \nabla_r^2 + \frac{1}{r^2}\nabla_{\theta\varphi}^2\,; \\ \nabla_r^2 &\equiv \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\,r^2\,\frac{\partial}{\partial r}\,, \\ \nabla_{\theta\varphi}^2 &\equiv \frac{1}{\sin\theta}\,\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\,\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\,. \end{aligned} \qquad (2.153)$$

Kinetickou část Hamiltonovy funkce můžeme také snadno rozložit na radiální a úhlovou část:

$$\hat{\mathbf{H}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_r^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2I} + V(r) = \frac{\hat{\mathbf{p}}_r^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2mr^2} + V(r)\,. \qquad (2.154)$$

V *x* reprezentaci má Hamiltonův operátor jednoduchou podobu

$$\hat{\mathbf{H}} = \frac{-\hbar^2}{2m}\left(\nabla_r^2 + \frac{1}{r^2}\nabla_{\theta\varphi}^2\right) + V(r)\,. \qquad (2.155)$$

Z rozkladu Laplaceova operátoru (2.153) je jasné, že jeho úhlová část musí (až na konstantu) odpovídat kvadrátu momentu hybnosti. Porovnáním obou posledních vztahů získáme operátor kvadrátu momentu hybnosti:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2\nabla_{\theta\varphi}^2\,. \qquad (2.156)$$

Operátor pro třetí složku momentu hybnosti je prostým zobecněním vtahu (2.47). Operátory úplné množiny pozorovatelných pro sférický potenciál tedy budou:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}} &= \frac{-\hbar^2}{2m}\left(\nabla_r^2 + \frac{1}{r^2}\nabla_{\theta\varphi}^2\right) + V(r)\,; \\ \hat{\mathbf{L}}^2 &= -\hbar^2\nabla_{\theta\varphi}^2\,; \\ \hat{\mathbf{L}}_3 &= -\mathrm{i}\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\,. \end{aligned} \qquad (2.157)$$

V kartézských souřadnicích se Laplaceův operátor štěpí na součet druhých derivací podle jednotlivých os, tomu odpovídá rozklad kinetické energie na složky ve směru os. Ve sférických souřadnicích se Laplaceův operátor dělí na radiální a úhlovou část, tomu odpovídá rozklad kinetické energie na radiální a úhlovou část. Právě úhlová část kinetické energie je rotační energie spojená s momentem hybnosti, a proto kvadrátu momentu hybnosti odpovídá úhlová část Laplaceova operátoru.

Hledané řešení $\psi(r, \varphi, \theta)$ samozřejmě závisí na kvantových číslech v, l, m. Řešení budeme hledat v separovaném tvaru

$$\psi(r,\varphi,\theta) = f(r)\, g(\varphi)\, h(\theta)\,. \tag{2.158}$$

Nejdříve řešme poslední z rovnic (2.152):

$$-\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} f(r) g(\varphi) h(\theta) = \mu_m f(r) g(\varphi) h(\theta) \qquad \Rightarrow$$

$$-\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}\varphi} = \mu_m g \qquad \Rightarrow$$

$$g(\varphi) = c \exp\left[\mathrm{i}\frac{\mu_m}{\hbar}\varphi\right].$$

Nalezené řešení musí být periodické v úhlu φ:

$$g(\varphi) = g(\varphi + 2\pi) \qquad \Rightarrow \qquad \mu_m = m\hbar\,; \qquad m = 0,\ \pm 1,\ \pm 2,\ \ldots$$

V x reprezentaci jsme opět odvodili kvantování projekce momentu hybnosti. Projekce momentu hybnosti může nabývat jen celistvých násobků Planckovy konstanty. Položíselná řešení nelze v x reprezentaci nalézt. Přechodem ke konkrétní reprezentaci přicházíme o část řešení. Hledané řešení má nyní tvar:

► $$\psi(r, \varphi, \theta) = f(r)\, \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\, h(\theta)\,; \qquad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \tag{2.159}$$

Konstantu c jsme zvolili tak, aby nalezené řešení bylo normováno k jedné. Jako další krok dosadíme toto řešení do druhé rovnice (2.152) s využitím (2.157) a budeme ji řešit

$$-\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\, h(\theta) \;=\; \lambda_l\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\, h(\theta) \qquad \Rightarrow$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}\theta}\right) + \left(\frac{\lambda_l}{\hbar^2} - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right) h \;=\; 0\,.$$

Výsledkem je obyčejná diferenciální rovnice pro funkci $h(\theta)$, která se řeší standardními matematickými postupy přesahujícími rámec této učebnice. Výsledkem jsou polynomiální funkce v argumentech $\cos\theta$ a $\sin\theta$, které se nazývají přidružené Legendreovy polynomy $P_{lm}(\cos\theta)$ a jsou definované vztahem

► $$P_{lm}(x) \equiv \frac{(1-x^2)^{m/2}}{2^l\, l!}\, \frac{\mathrm{d}^{l+m}}{\mathrm{d}x^{l+m}}\, (x^2-1)^l\,;$$

$$l = 0, 1, 2, \ldots; \qquad |\,m\,| \le l\,; \quad m = 0, \pm 1, \ \ldots \tag{2.160}$$

Pro $m = 0$ se tyto polynomy nazývají Legendreovy polynomy. Příslušné vlastní číslo je

► $$\lambda_l = l(l+1)\hbar^2 . \tag{2.161}$$

Celá úhlová část řešení se nazývá kulová funkce a označuje se

► $$Y_{lm}(\varphi,\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} P_{lm}(\cos\theta) . \tag{2.162}$$

Celkové řešení zbývajících dvou rovnic soustavy (2.152) tedy je

$$\psi(r,\varphi,\theta) = f(r)\, Y_{lm}(\varphi,\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} f(r)\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} P_{lm}(\cos\theta) ;$$

► $$\lambda_l = l(l+1)\hbar^2 ; \quad l = 0, 1, 2, \ldots \tag{2.163}$$

$$\mu_m = m\hbar ; \quad m = 0, \pm 1, \ldots ; \qquad |m| \le l .$$

Odvozené kvantování momentu hybnosti je až na absenci poločíselných hodnot shodné se vztahy odvozenými jinou cestou v předchozí kapitole. Pro radiální funkci $f(r)$ lze řešení získat z první rovnice (2.152). Toto řešení závisí na tvaru potenciální energie. Pro některé základní tvary potenciální energie bude řešení diskutováno v příští kapitole. Na závěr uveďme příklady některých kulových funkcí, které jsou vynikající bází na povrchu sféry:

$$Y_{00} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} ; \qquad Y_{1,-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} \sin\theta ;$$

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta ; \qquad Y_{20} = -\sqrt{\frac{5}{16\pi}} (1 - 3\cos^2\theta) ; \tag{2.164}$$

$$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} \sin\theta ; \qquad Y_{21} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} \cos\theta \sin\theta .$$

2.5.3 Jednoduché systémy: oscilátor, vodík, jáma

Nyní zbývá řešit první z rovnic (2.152) – rovnici pro energii. Tato rovnice nám poskytne energetické spektrum a radiální část celého řešení $\psi(r, \varphi, \theta)$. Jak energetické spektrum, tak radiální část mohou záviset na kvantových číslech l a m z předchozího řešení a budou závislé na konkrétním tvaru potenciální energie $V(r)$.

V poslední rovnici (2.152) známe působení rotační části kinetické energie Hamiltonova operátoru na celkovou vlnovou funkci. To je dáno působením kvadrátu momentu hybnosti podle druhé z rovnic (2.152). Známe již i vlastní číslo λ_l podle vztahu (2.161). Po zapůsobení rotační části zkrátíme úhlové části $g(\varphi)$ a $h(\theta)$ na obou stranách rovnice a získáme rovnici pro radiální část řešení:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} r^2 \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] f_{vl}(r) = E\, f_{vl}(r) . \tag{2.165}$$

Povšimněte si, že v rovnici vystupuje vedlejší kvantové číslo l, a energetické spektrum proto nezávisí jen na radiálním číslu ν, které čísluje energii, ale i na vedlejším kvantovém čísle l. Řešení rovnice (2.165) se provádí standardními metodami (rozvoj do řady, hledání asymptotického chování, oříznutí nekonečné řady). Uvedeme výsledky výpočtů pro potenciální energii sférického harmonického oscilátoru, prostorové jámy a Coulombův potenciál (2.136).

Harmonický oscilátor

Pro potenciální energii harmonického oscilátoru vychází energetické spektrum

► $$V(r) = \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 \quad \Rightarrow \quad E_{\nu l} = (2\nu + l + 3/2)\,\hbar\omega = (n + 3/2)\,\hbar\omega\,. \qquad (2.166)$$

Nejmenší možná hodnota energie (nulové kmity) je $3/2\hbar\omega$. Radiální kvantové číslo ν čísluje pořadí radiálních stavů a zpravidla také počet průsečíků radiálního řešení s osou x. Většinou se zavádí tzv. hlavní kvantové číslo n, které skutečně čísluje stavy energie:

$$n \equiv 2\nu + l \;\; ; \quad n = 0, 1, 2, \ldots \;\; , \quad l = 0, 1 \;\ldots\; n \;. \qquad (2.167)$$

Spektrum oscilátoru je degenerované (ke každé hodnotě energie přísluší více stavů, každé n lze složit z více kombinací ν a l). Snadno určíme stupeň degenerace, uvědomíme-li si, že ke každému vedlejšímu kvantovému číslu existuje $2l + 1$ hodnot magnetických čísel m:

► $$\#_n = \sum_l 2l + 1 = \sum_{\nu=0}^{n/2} 2(n - 2\nu) + 1 = \sum_{\nu=0}^{n/2} 2n - 4\nu + 1 = \frac{(n+1)(n+2)}{2}\,. \qquad (2.168)$$

Řadu (2.168) jsme sečetli jako aritmetickou řadu. Každá energetická slupka n obsahuje $(n + 1)(n + 2)/2$ stavů.

Coulombický potenciál

Pro Coulombickou potenciální energii vychází energetické spektrum

► $$V(r) \;=\; \frac{qQ}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r} \;=\; -\frac{\gamma}{r} \qquad \Rightarrow$$
$$E_{\nu l} = -\frac{\gamma^2 m_\mathrm{e}}{2\hbar^2(\nu + l + 1)^2} = -\frac{\gamma^2 m_\mathrm{e}}{2\hbar^2 n^2}\,. \qquad (2.169)$$

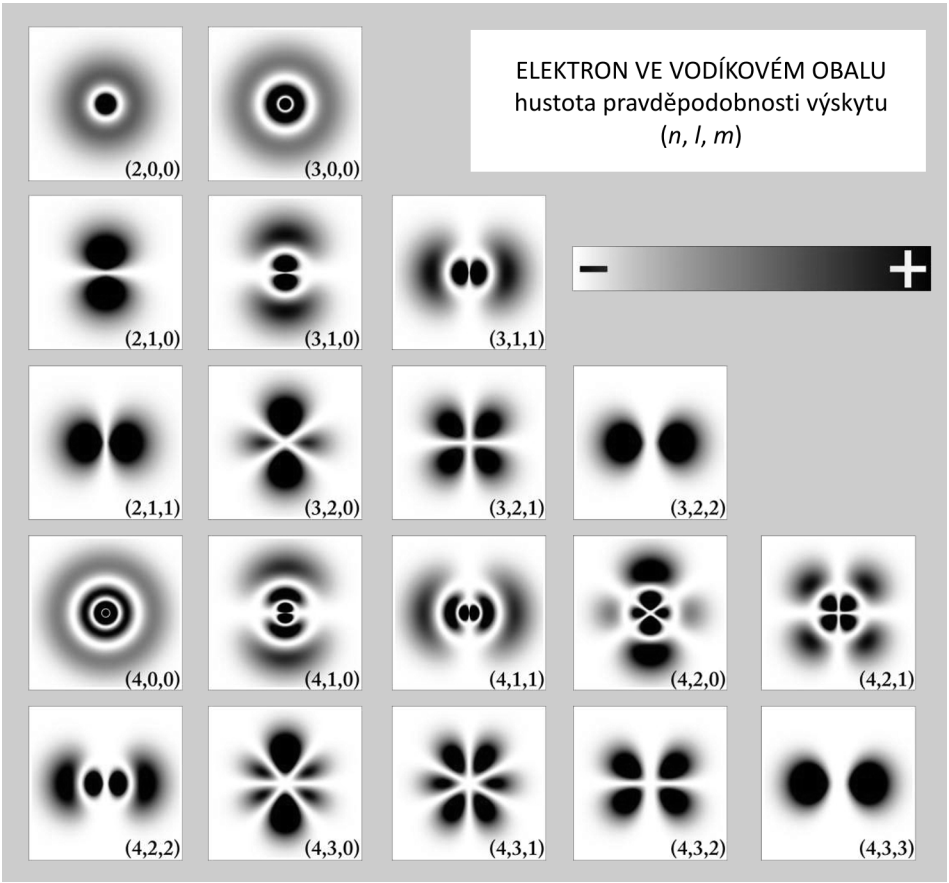
Hlavní kvantové číslo n číslující stavy energie jsme zavedli vztahem

$$n \equiv \nu + l + 1 \quad ; \qquad n = 1, 2, \ldots \quad , \quad l = 0, 1 \;\ldots\; n - 1 \;. \qquad (2.170)$$

Stupeň degenerace bude

► $$\#_n = \sum_l 2l + 1 = \sum_{\nu=0}^{n-1} 2(n - \nu - 1) + 1 = \sum_{\nu=0}^{n-1} 2n - 2\nu - 1 = n^2\,. \qquad (2.171)$$

Jde-li o atom vodíku, může mít každý elektron ještě dva spinové stupně volnosti $m_\mathrm{s} = \pm 1/2$ a celkový počet stavů v jedné energetické slupce je proto $2n^2$. Tyto stavy se liší hodnotou kvantových čísel l, m, m_s.



Obr. 81: Hustota pravděpodobnosti pro vodík. Kyle Forinash, Indiana University Southeast, 2008.

Sférická jáma

Na závěr kapitoly o sférických potenciálech zmiňme sférickou konečnou kvantovou jámu s potenciálem ve tvaru

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r < a\,; \\ V_0 & r \geq a\,. \end{cases} \tag{2.172}$$

Ani pro takto jednoduchý průběh nemá úloha analytické řešení. Problém lze řešit jen numericky nebo graficky, viz například publikace [15].

2.6 Časový vývoj

Prozatím jsme se v kvantové teorii zabývali stacionárními stavy, tj. stavy systému, které se v čase nevyvíjejí. Skutečné kvantové stavy jsou lineárními kombinacemi stacionárních stavů (prvků báze) a koeficienty těchto kombinací se mění s časem. Přechod stavu z jednoho času do času pozdějšího provádí tzv. *evoluční operátor* (operátor časového vývoje), se kterým se nyní seznámíme.

2.6.1 Evoluční operátor

Evoluční operátor převádí známý stav čase t_0 na stav, do kterého se vyvine v čase t:

$$|\psi(t)> = \hat{\mathbf{U}}(t,t_0)\,|\psi(t_0)> . \tag{2.173}$$

Evoluční operátor musí splňovat některé podmínky a požadavky:

1. POČÁTEČNÍ PODMÍNKA: vývoj z počátečního času do počátečního času nemění stav systému

$$\hat{\mathbf{U}}(t_0,t_0) = \hat{\mathbf{1}} . \tag{2.174}$$

2. SEMIGRUPOVÁ PODMÍNKA: vývoj ze stavu t_1 do t_2 dopadne stejně, je-li proveden naráz, nebo přes mezičas t. Porovnáním obou postupů získáme *semigrupovou podmínku*:

$$\begin{array}{ccc} t_1 \to t_2 & \Leftrightarrow & t_1 \to t \to t_2 \\ |\psi(t_2)> = \hat{\mathbf{U}}(t_2,t_1)|\psi(t_1)> & \Leftrightarrow & |\psi(t_2)> = \hat{\mathbf{U}}(t_2,t)\;\hat{\mathbf{U}}(t,t_1)|\psi(t_1)> \end{array}$$

$$\hat{\mathbf{U}}(t_2,t_1) = \hat{\mathbf{U}}(t_2,t)\,\hat{\mathbf{U}}(t,t_1) . \tag{2.175}$$

3. UNITARITA: časový vývoj nemění normování stavu:

$$\langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle = \langle\psi(t)|\psi(t)\rangle ,$$

$$\langle\psi_0|\psi_0\rangle = \langle\psi_0|\hat{\mathbf{U}}^{\dagger}\hat{\mathbf{U}}|\psi_0\rangle ,$$

$$\hat{\mathbf{U}}^{\dagger}\hat{\mathbf{U}} = \hat{\mathbf{1}} . \tag{2.176}$$

4. INVERZE: inverzní evoluční operátor má obrácené pořadí argumentů. Odvodíme ze semigrupové podmínky:

$$\hat{\mathbf{U}}(t,t) = \hat{\mathbf{U}}(t,t_0)\;\hat{\mathbf{U}}(t_0,t) \overset{!}{=} \hat{\mathbf{1}} \;\Rightarrow$$

$$\hat{\mathbf{U}}^{-1}(t_0,t) \;=\; \hat{\mathbf{U}}(t,t_0) . \tag{2.177}$$

5. SPOJITOST: samovolný vývoj stavu (bez aktu měření), který popisuje evoluční operátor, musí být spojitý:

$\langle\varphi|\,\hat{\mathbf{U}}(t,t_0)\,|\psi(t_0)\rangle$ je spojité pro $\forall\, t_0$ a $\forall\,|\varphi\rangle \in \mathcal{H}$.

Nyní odvodíme základní rovnici pro evoluční operátor. Vyjdeme z definice střední hodnoty dynamické proměnné (viz tabulka v kapitole 2.2.2 na straně 124) a tuto střední hodnotu budeme derivovat podle času:

$$\frac{\mathrm{d}\overline{a}}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi|\hat{\mathbf{A}}|\psi\rangle = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi_0|\hat{\mathbf{U}}^\dagger\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{U}}|\psi_0\rangle =$$

$$= \langle\psi_0|\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}^\dagger}{\mathrm{d}t}\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{U}} + \hat{\mathbf{U}}^\dagger\hat{\mathbf{A}}\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}}{\mathrm{d}t}|\psi_0\rangle .$$

Jinou možností je přímo zavést operátor časové derivace dynamické proměnné vztahem

$$\frac{\mathrm{d}\overline{a}}{\mathrm{d}t} = \langle\psi|\dot{\hat{\mathbf{A}}}|\psi\rangle = \langle\psi_0|\hat{\mathbf{U}}^\dagger\dot{\hat{\mathbf{A}}}\hat{\mathbf{U}}|\psi_0\rangle .$$

Porovnáním obou postupů získáme rovnici

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}^\dagger}{\mathrm{d}t}\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{U}} + \hat{\mathbf{U}}^\dagger\hat{\mathbf{A}}\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}}{\mathrm{d}t} = \hat{\mathbf{U}}^\dagger\dot{\hat{\mathbf{A}}}\hat{\mathbf{U}}, \tag{2.178}$$

ve které za časovou derivaci operátoru dynamické proměnné dosadíme časový vývoj dynamické proměnné zapsaný v Poissonových závorkách převedený do kvantové podoby pomocí principu korespondence (2.21):

$$\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t} = \{A, H\} \qquad \Rightarrow \qquad \dot{\hat{\mathbf{A}}} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{H}}\right]. \tag{2.179}$$

Získáme tak rovnici, ze které se budeme snažit odvodit vztah pro evoluční operátor:

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}^\dagger}{\mathrm{d}t}\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{U}} + \hat{\mathbf{U}}^\dagger\hat{\mathbf{A}}\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}}{\mathrm{d}t} = \hat{\mathbf{U}}^\dagger\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{H}}\right]\hat{\mathbf{U}}. \tag{2.180}$$

Ve všech následujících úpravách využíváme unitaritu $\hat{\mathbf{U}}\hat{\mathbf{U}}^\dagger = \hat{\mathbf{U}}^\dagger\hat{\mathbf{U}} = \mathbf{1}$. Z poslední rovnice je třeba vyloučit operátor $\hat{\mathbf{U}}^\dagger$ a jeho derivaci podle času, kterou získáme derivováním definice unitarity podle času a násobením výsledku operátorem $\hat{\mathbf{U}}^\dagger$ zprava:

$$\hat{\mathbf{U}}^\dagger\hat{\mathbf{U}} = \hat{\mathbf{1}} \quad \Rightarrow$$

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}^\dagger}{\mathrm{d}t}\hat{\mathbf{U}} + \hat{\mathbf{U}}^\dagger\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}}{\mathrm{d}t} = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}^\dagger}{\mathrm{d}t} + \hat{\mathbf{U}}^\dagger\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}}{\mathrm{d}t}\hat{\mathbf{U}}^\dagger = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}^\dagger}{\mathrm{d}t} = -\hat{\mathbf{U}}^\dagger\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}}{\mathrm{d}t}\hat{\mathbf{U}}^\dagger .$$

Výsledek dosadíme do rovnice (2.180) a vynásobíme ji operátorem $\hat{\mathbf{U}}$ zleva a operátorem $\hat{\mathbf{U}}^\dagger$ zprava. Postupnými úpravami získáme hledanou rovnici pro $\hat{\mathbf{U}}$:

$$-\hat{\mathbf{U}}^\dagger\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}}{\mathrm{d}t}\hat{\mathbf{U}}^\dagger\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{U}} + \hat{\mathbf{U}}^\dagger\hat{\mathbf{A}}\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\hat{\mathbf{U}}^\dagger\left[\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{H}}\right]\hat{\mathbf{U}} \quad \Rightarrow$$

$$-\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}}{\mathrm{d}t}\hat{\mathbf{U}}^{\dagger}\hat{\mathbf{A}}+\hat{\mathbf{A}}\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}}{\mathrm{d}t}\hat{\mathbf{U}}^{\dagger}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\hat{\mathbf{A}},\hat{\mathbf{H}}\right] \quad \Rightarrow$$

$$\left[\hat{\mathbf{A}},\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}}{\mathrm{d}t}\hat{\mathbf{U}}^{\dagger}\right]=\left[\hat{\mathbf{A}},\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\hat{\mathbf{H}}\right] \quad \Rightarrow$$

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}}{\mathrm{d}t}\hat{\mathbf{U}}^{\dagger}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\hat{\mathbf{H}} \quad \Rightarrow$$

► $$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}}{\mathrm{d}t}=\hat{\mathbf{H}}\hat{\mathbf{U}}. \tag{2.181}$$

Právě odvozená rovnice se nazývá *rovnice časového vývoje*. Zapůsobíme-li touto operátorovou rovnicí na počáteční stav $|\psi_0>$, provede evoluční operátor vývoj stavu do času t a získaná rovnice pro $|\psi(t)>$ se nazývá *časová Schrödingerova rovnice*:

► $$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\left|\psi(t)\right\rangle}{\mathrm{d}t}=\hat{\mathbf{H}}\left|\psi(t)\right\rangle. \tag{2.182}$$

Schrödingerovy rovnice tedy máme dvě. Bezčasová Schrödingerova rovnice řeší vlastní hodnoty a vlastní stavy operátoru energie (Hamiltonova operátoru). Z ní můžeme určit hodnoty energie, které jsou naměřitelné v experimentu.

Časová Schrödingerova rovnice potom řeší časový vývoj libovolného počátečního stavu. Jak uvidíme v následujícím textu, je řešení časové Schrödingerovy rovnice v jistém smyslu triviální. Pokud Hamiltonův operátor nezávisí explicitně na čase a známe-li vlastní stavy a vlastní čísla operátoru energie, můžeme řešení časové Schrödingerovy rovnice okamžitě napsat. V praxi tedy postačí řešit bezčasovou Schrödingerovu rovnici.

2.6.2 Časová Schrödingerova rovnice

Řešení časového vývoje lze najít relativně snadno, pokud není Hamiltonův operátor explicitní funkcí času, tj. závisí jen na operátorech zobecněných souřadnic a hybností. V takovém případě je výhodné volit v Hilbertově prostoru popisovaného systému bázi generovanou vlastními vektory Hamiltonova operátoru (2.41):

$$\hat{\mathbf{H}}\,|\,n>=E_n\,|\,n> \quad ; \quad \left\langle m\middle|n\right\rangle=\delta_{nm} \quad ; \quad \sum_n\left|n\right\rangle\left\langle n\right|=\hat{\mathbf{1}}.$$

Do těchto vektorů rozvineme hledaný stav, koeficienty rozvoje budou funkcemi času:

$$|\psi(t)>=\sum_n a_n(t)\,|\,n>.$$

Řešení v tomto tvaru dosadíme do časové Schrödingerovy rovnice a získáme lineární rovnici pro koeficienty $a_n(t)$.

$$\mathrm{i}\hbar\sum_n\frac{\mathrm{d}a_n}{\mathrm{d}t}\,|\,n>=\hat{\mathbf{H}}\sum_n a_n(t)\,|\,n>;$$

$$\mathrm{i}\hbar\sum_n\frac{\mathrm{d}a_n}{\mathrm{d}t}\,|\,n>=\sum_n a_n(t)E_n\,|\,n>; \qquad /\ <k|\ \text{zleva}$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}a_k}{\mathrm{d}t} = a_k(t)E_k \ ;$$

$$a_k(t) = c_k\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_k(t-t_0)} \ .$$

Řešení časového vývoje tedy je:

$$|\psi(t)> = \sum_n c_n\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n(t-t_0)}\,|n> \ . \tag{2.183}$$

Pokud dosadíme $t = t_0$, získáme rozvoj počáteční podmínky:

$$|\psi(t_0)> = \sum_n c_n\,|n> \ . \tag{2.184}$$

Koeficienty c_n jsou tedy koeficienty rozvoje počáteční podmínky do báze z vlastních vektorů energie. Časový vývoj se od rozvoje počáteční podmínky liší jen kmitající exponenciálou. Pokud tedy známe řešení bezčasové Schrödingerovy rovnice, můžeme okamžitě napsat i řešení časové Schrödingerovy rovnice. Časový vývoj nemá v kvantové teorii natolik zásadní charakter jako v newtonovské dynamice, lze ho vždy jednoduše zapsat, pokud známe vlastní stavy a vlastní čísla Hamiltonova operátoru.

Poněkud elegantnější je operátorové řešení rovnice pro evoluční operátor (2.181), které lze formálně zapsat jako

$$\mathrm{i}\,\hbar\,\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}}{\mathrm{d}t} \;=\; \hat{\mathbf{H}}\hat{\mathbf{U}} \;\;\Rightarrow$$

$$\hat{\mathbf{U}}(t,t_0) \;=\; \mathrm{e}^{\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\hat{\mathbf{H}}(t-t_0)} \ .$$

Evoluční operátor je tedy funkcí Hamiltonova operátoru. Pokud známe vlastní vektory a vlastní čísla Hamiltonova operátoru (řešení bezčasové Schrödingerovy rovnice), můžeme evoluční operátor vyjádřit z věty o spektrálním rozvoji:

$$\hat{\mathbf{U}}(t,t_0) \;=\; \sum_n \mathrm{e}^{\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}E_n(t-t_0)}\,|n><n|\,.$$

Nyní zapůsobíme nalezeným evolučním operátorem na počáteční stav $|\psi_0>$:

► $$|\ \psi(t)> = \sum_n \mathrm{e}^{\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}E_n(t-t_0)}\,|n><n|\psi_0> \tag{2.185}$$

a získáme tak okamžitě řešení časové Schrödingerovy rovnice:

► $$|\psi(t)> \;=\; \sum_n c_n\,\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}E_n(t-t_0)}\,|n>\,; \tag{2.186}$$

$$c_n \;\equiv\; <n|\psi_0>\,.$$

Oba postupy tedy vedou na shodná řešení.

◖ Příklad 40: vývoj vlastního stavu

Předpokládejme, že je systém připraven v nějakém vlastním energetickém stavu (například třetím). Nalezněte průběh pravděpodobnosti nalezení systému.

Řešení: Počáteční stav je roven

$$\psi_0(x) = c_3\psi_3(x)\,,$$

kde c_3 je normovací koeficient. Časový vývoj stavu bude dán formulí

$$\psi(t,x) = c_3\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_3 t}\,\psi_3(x)$$

a výsledná hustota pravděpodobnosti vychází

$$w(t,x) \equiv \psi^*\psi = \left|c_3\psi_3\right|^2.$$

Je patrné, že se časový vývoj neprojevil na hustotě pravděpodobnosti, v tomto smyslu se tedy systém připravený v jednom z vlastních stavů energie nevyvíjí.

◗

◖ Příklad 41: kvantová interference

Nalezněte vývoj pravděpodobnosti systému, jehož počáteční stav je zadán jako lineární kombinace dvou vlastních funkcí Hamiltonova operátoru.

Řešení: Počáteční stav je kombinací dvou vlastních stavů 1 a 2 Hamiltonova operátoru (nemusí samozřejmě jít o první a druhý energetický stav, ale o libovolné dva stavy)

$$\psi_0(x) = c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x)\,,$$

časový vývoj je

$$\psi(t,x) = c_1\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_1 t}\,\psi_1(x) + c_2\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_2 t}\,\psi_2(x)$$

a výsledná hustota pravděpodobnosti vychází

$$w(t,x) \equiv \psi^*\psi =$$

$$= \left|c_1\psi_1\right|^2 + \left|c_2\psi_2\right|^2 + \left[(c_1\psi_1)(c_2\psi_2)^*\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E_2-E_1)t} + (c_1\psi_1)^*(c_2\psi_2)\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E_2-E_1)t}\right].$$

Celková pravděpodobnost je součtem pravděpodobnosti, že se systém nachází ve stavu 1, ve stavu 2 a interferenčního kmitavého členu, který je pro kvantové procesy typický. Výsledek lze jednoduše zapsat takto:

$$\begin{aligned} w(t,x) &= w_1(x) + w_2(x) + A(x)\cos\omega t + B(x)\sin\omega t\,; \\ \omega &\equiv \Delta E/\hbar\,. \end{aligned} \tag{2.187}$$

Úhlová frekvence časových oscilací pravděpodobnosti odpovídá kvantování s energií rovnou Planckovu kvantu $\Delta E = \hbar\omega$.

◗

2.6.3 Oscilace neutrin

Neutrina (elektronové, mionové a tauonové) jsou ve skutečnosti lineární kombinací vlastních stavů hmoty

$$|\nu_\alpha\rangle = V_{\alpha k}\,|\nu_k\rangle\,, \quad \text{kde } \alpha = \mathrm{e}, \mu, \tau\,; \qquad k = 1, 2, 3.$$

Index α popisuje generace neutrin a index k vlastní hmotnostní stavy. Transformační matice je unitární a poprvé ji zavedli Ziro Maki, Masami Nakagawa a Shoichi Sakata v roce 1962, aby vysvětlili oscilace neutrin předpovězené Brunem Pontecorvem. Pro pochopení principu oscilací předpokládejme jen existenci dvou generací neutrin a mixáž jejich stavů ve tvaru

$$|\nu_\mathrm{e}\rangle = +\cos\theta\,|\nu_1\rangle + \sin\theta\,|\nu_2\rangle\,,$$

$$|\nu_\mu\rangle = -\sin\theta\,|\nu_1\rangle + \cos\theta\,|\nu_2\rangle\,.$$

Unitární matici jsme zapsali jako běžnou rotační matici za pomoci úhlu θ. Za letu neutrin se budou hmotnostní stavy vyvíjet a mixážní poměry měnit. Spíše než časový vývoj nás ale bude zajímat vývoj stavu podél letící částice. Vzhledem k tomu, že pro rovinnou vlnoplochu platí

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\omega t)} = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}-E\,t)}\,,$$

budeme moci vývoj hmotnostních stavů podél letu neutrina zapsat takto:

$$|\nu_k(x)\rangle = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_k x}\,|\nu_k(0)\rangle\,.$$

Například stav elektronového neutrina se za letu bude měnit podle formule

$$|\nu_\mathrm{e}(x)\rangle = +\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_1 x}\cos\theta\,|\nu_1(0)\rangle + \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_2 x}\sin\theta\,|\nu_2(0)\rangle\,.$$

Amplituda pravděpodobnosti, že se elektronové neutrino bude za letu jevit pozorovateli jako čistě mionové neutrino (dané svou počáteční kombinací), bude

$$\mathcal{A}_{\nu_\mathrm{e}\to\nu_\mu} = \langle\nu_\mu(0)|\nu_\mathrm{e}(x)\rangle\,.$$

Po provedení skalárního součinu (hmotnostní stavy tvoří ortonormální bázi) máme

$$\mathcal{A}_{\nu_\mathrm{e}\to\nu_\mu} = \cos\theta\sin\theta\left[\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_2 x\right) - \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_1 x\right)\right].$$

Neutrina mají velmi malou hmotnost a relativistické energie, a proto lze využít rozvoj

$$p_k = \sqrt{(E/c)^2 - m_k^2 c^2} = \frac{E}{c}\sqrt{1-\left(m_k c^2/E\right)^2} \approx \frac{E}{c} - \frac{m_k^2 c^3}{2E}\,.$$

Amplitudu pravděpodobnosti nyní snadno upravíme

$$\mathcal{A}_{\nu_e\to\nu_\mu} = \cos\theta\sin\theta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{Ex}{\hbar c}}\left[\exp\left(-\mathrm{i}\frac{m_2^2c^3}{2\hbar E}x\right)-\exp\left(-\mathrm{i}\frac{m_1^2c^3}{2\hbar E}x\right)\right]=$$

$$=\cos\theta\sin\theta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\frac{E}{\hbar c}-\frac{m_1^2c^3}{2\hbar E}\right)x}\left[\exp\left(-\mathrm{i}\frac{\Delta m^2c^3}{2\hbar E}x\right)-1\right]=$$

$$=\cos\theta\sin\theta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\frac{E}{\hbar c}-\frac{m_1^2c^3}{2\hbar E}-\frac{\Delta m^2c^3}{4\hbar E}\right)x}\left[\exp\left(-\mathrm{i}\frac{\Delta m^2c^3}{4\hbar E}x\right)-\exp\left(+\mathrm{i}\frac{\Delta m^2c^3}{4\hbar E}x\right)\right]=$$

$$=-2\,\mathrm{i}\cos\theta\sin\theta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\frac{E}{\hbar c}-\frac{m_1^2c^3}{2\hbar E}-\frac{\Delta m^2c^3}{4\hbar E}\right)x}\sin\left(\frac{\Delta m^2c^3}{4\hbar E}x\right).$$

Pokud jsou vlastní hmotnosti různé (stačí jedna nenulová), dojde k *oscilacím neutrin*. Pravděpodobnost, že původní elektronové neutrino nalezneme jako mionové je periodickou funkcí vzdálenosti od zdroje

$$\mathcal{P}_{\nu_e\to\nu_\mu} = \left|\mathcal{A}\right|^2 = \mathcal{A}\mathcal{A}^* = \sin^2 2\theta\,\sin^2\left(\frac{\Delta m^2c^3}{4\hbar E}x\right);$$

$$\Delta m^2 \equiv m_2^2 - m_1^2\,.$$

Z různých experimentů je možné určit úhel mixáže a střední vzdálenost, na které proběhne přeměna neutrin

$$L = \frac{4\pi\hbar E}{\Delta m^2c^3},$$

ze které plyne pouze rozdíl kvadrátů hmotností neutrin. Skutečná neutrina mají tři generace a transformační matice je 3×3 a obsahuje tři úhly. Princip se ale nemění. Z měření plyne, že platí

$$\Delta m_{12}{}^2 = (7{,}59 \pm 0{,}21)\times10^{-5}\ \mathrm{eV}^2\ \text{(KamLAND, 2005)}$$

$$\Delta m_{23}{}^2 = (2{,}43 \pm 0{,}13)\times10^{-3}\ \mathrm{eV}^2\ \text{(MINOS, 2006).}$$

$$\theta_{12}\sim 33°,\ \theta_{23}\sim 45°,\ \theta_{13}\le 9°.$$

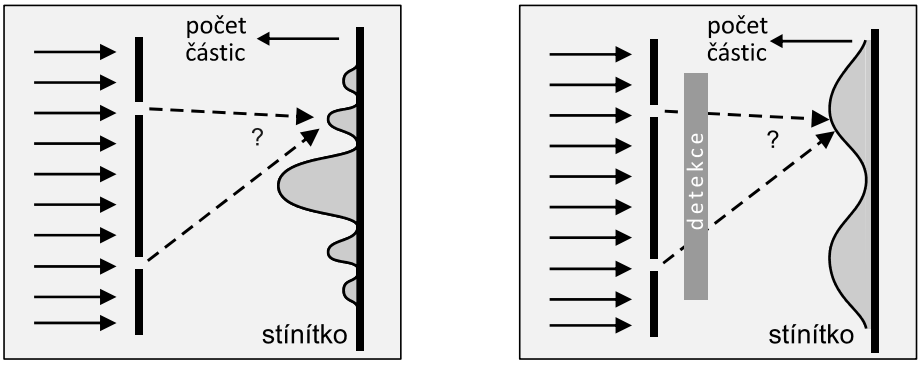
Mixážní matice se tak rozhodně nepodobá diagonální matici, jako je tomu v případě mixážní matice kvarků.

Oscilace neutrin byly poprvé pozorovány v roce 1998 na detektoru Super-Kamiokande v Japonsku. Při pozorování atmosférických neutrin (vznikají interakcí kosmického záření s horní vrstvou atmosféry) přicházel jiný poměr elektronových a mionových neutrin zhora a zdola. Neutrina přicházející zhora nestačila oscilovat, naopak neutrina přicházející zdola prolétla celou Zemí a měla dost času na oscilaci. Obdobné oscilace pozorovaly ve stejné době také na Sudburské neutrionové observatoři v USA.

2.6.4 Dvouštěrbinový experiment, AB experiment, MZ interferometr

Představme si, že na dvě štěrbiny dopadá proud částic. Po průchodu štěrbinami se na stínítku zaznamenává, kam která dopadla. Výsledkem je klasický interferenční vlnový obrazec s maximem dopadů paradoxně mezi oběma štěrbinami. Podobně jako v předchozí kapitole se sčítají amplitudy pravděpodobností obou možností, nikoli samotné pravděpodobnosti.

Na výsledku nic nezmění ani počet přítomných částic: bude-li tok zleva velmi slabý a v průměru se bude vyskytovat v oblasti experimentu jediná částice, nikdy nezjistíme, kterým otvorem prošla. Po dosti dlouhé době získáme statistický obraz dopadu částic na stínítko podle obrázku. Můžeme si třeba myslet, že část částice prošla jedním otvorem a část druhým (což by odpovídalo tomu, že byla v superpozici dvou stavů), nebo že interferovala sama se sebou. Takové úvahy nemají reálný smysl. Pro posouzení statistického výsledku mnoha opakovaných dopadů je důležitý jen souhlas experimentálního výsledku s předpovědí danou teorií.



Obr. 82: Dvojštěrbinový experiment.

Jiný obraz se nám naskytne, pokusíme-li se zjistit, kudy částice prolétla. Zakryjeme-li jeden z otvorů, bude maximum dopadajících částic proti otevřenému otvoru. Můžeme vymyslet rafinovanější postup. Budeme sledovat například pomocí částic světla – fotonů, kudy částice prolétla. Bude-li foton málo energetický, bude mít příliš dlouhou vlnovou délku a tím malou rozlišovací schopnost na to, aby určil, kudy částice letěla. Bude-li ale foton mít pro detekci dosti krátkou vlnovou délku, můžeme skutečně rozhodnout, kudy prolétla částice. Ale něco za něco: krátkovlnný foton má značnou energii a silně ovlivní stav prolétající částice. Dokonce natolik, že interferenční obrazec zcela vymizí. Obecně platí: nepokusíme-li se o detekci, sčítají se amplitudy pravděpodobnosti a statistika dopadů má charakter interferenčního jevu. Pokusíme-li se o detekci, interference zaniká a sčítají se klasicky samotné pravděpodobnosti. Věc je dokonce ještě zapeklitější. O detekci se ani nemusíme pokusit, postačí, že je principiálně možná, a kvantová interference zmizí. Těžko se nám tento fakt přijímá. Je to vlastnost mikrosvěta, která se nám zdá velmi podivná. Naše zkušenosti z makrosvěta jsou založeny na komutujících objektech. Právě nekomutativnost jevů v mikrosvětě vede ke skládání amplitud pravděpodobností a k interferenčnímu jevu.

Aharonův-Bohmův experiment

V klasické elektrodynamice je možné elektromagnetické pole popsat buď za pomoci elektrické intenzity a magnetické indukce nebo za pomoci čtyř potenciálů (viz kapitola 1.6.3). Každý z těchto popisů má své výhody a nevýhody:

1. Elektrické a magnetické pole je přímo měřitelné přístroji, potenciály nikoli. Tato situace vytváří dojem, že pole jsou reálné veličiny, zatímco potenciály jen pomocné matematické objekty.
2. Elektrická a magnetická pole jsou jednoznačná, potenciálů k danému problému existuje nekonečně mnoho. Toho lze využít ke konstrukci co nejjednodušších rovnic pro potenciály. Na druhou stranu nejednoznačnost potenciálů opět vzbuzuje dojem, že koncept potenciálů je jen pomocnou matematickou konstrukcí.
3. Maxwellovy rovnice v potenciálech jsou jednodušší, vedou na vlnovou rovnici s nenulovou pravou stranou, pro kterou existuje řada možností řešení. Po nalezení potenciálů musíme ale ještě určit pole z formulí $\mathbf{B} = \mathrm{rot}\,\mathbf{A}$, $\mathbf{E} = -\nabla\phi - \partial\mathbf{A}/\partial t$.
4. Při transformaci polí do jiné souřadnicové soustavy jsou vhodnější potenciály. Tvoří čtyřvektor, který se transformuje Lorentzovou maticí. Samotná transformace polí je poněkud nepřehledná a je dána transformací tenzoru pole.
5. Do čtyřrozměrného světa relativity na první pohled lépe zapadá čtyřpotenciál pole (ϕ, $\mathbf{A}$) než šestice hodnot $\mathbf{E}$ a $\mathbf{B}$. Ty jsou ve skutečnosti součástí tenzoru pole $F_{\mu\nu}$, jak jsme viděli v kapitole 1.6.3.

V klasické fyzice může částice měnit svou rychlost pouze vlivem elektrických a magnetických polí. Pokud jsou pole nulová a potenciály nenulové (taková situace může nastat), na částici žádné síly nepůsobí. V kvantové mechanice je situace jiná. Ukážeme si, že přítomnost nenulového potenciálu mění fázi vlnové funkce i v případě, že samotná pole jsou nulová (například v prostoru vně dlouhé cívky je magnetické pole nulové a vektorový potenciál nenulový). Změna fáze vlnové funkce se projeví změnou interferenčního obrazce u dvouštěrbinového experimentu a jde tedy o měřitelný jev. V tomto smyslu je klasická Maxwellova elektrodynamika doplněná Lorentzovou pohybovou rovnicí neúplným popisem přírody, neboť nepostihuje všechny v přírodě probíhající a měřitelné děje. Potenciály pole navíc nejsou jen matematickou konstrukcí, ale mají na pohyb nabitých částic reálný fyzikální dopad daný kvantovými zákony.

Poprvé na tuto skutečnost upozornili angličtí teoretici Werner Ehrenberg a Raymond Siday v roce 1949, jejich práce se ale dostatečně nerozšířila. Obdobný jev o deset let později, tedy v roce 1959, znovu předpověděli izraelský fyzik Yakir Aharonov a americko-anglický teoretik David Bohm. Aharonův-Bohmův jev (AB jev) byl experimentálně potvrzen až v roce 1986 japonským fyzikem Akirou Tonomurou.

Změna dopadového obrazce způsobená přítomností magnetického pole

Uvažujme nejprve dvojštěrbinový experiment s uspořádáním podle obrázku 83 nalevo. Za štěrbinami je úzký pás nenulového magnetického pole (tloušťky Δl), které míří kolmo na pohyb elektronů. Toto pole na ně bude působit Lorentzovou silou

$$F = evB \tag{2.188}$$

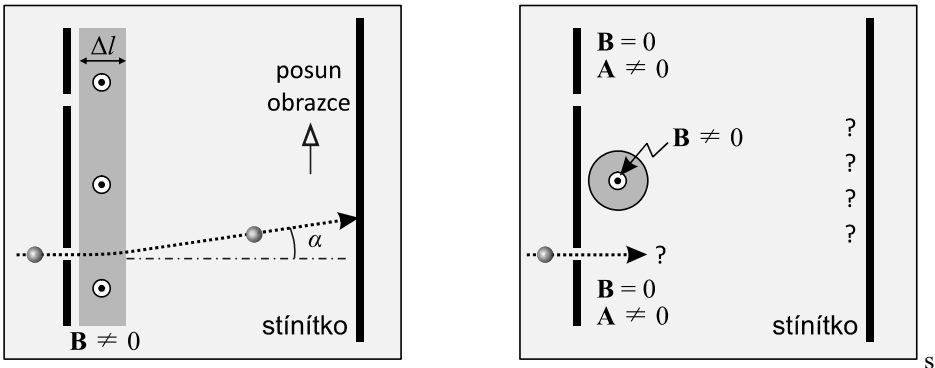
směrem vzhůru. Vzhledem k tomu, že je tloušťka vrstvy nenulového pole malá, budeme uvažovat, že se svazek elektronů pohne vzhůru vlivem působení konstantního zrychlení $a = F/m$ po dobu $\Delta t = \Delta l/v$. Ve svislém směru budou elektrony vychýleny o vzdálenost

$$\Delta y \cong \frac{1}{2} a (\Delta t)^2 = \frac{1}{2} \frac{evB}{m} \left(\frac{\Delta l}{v} \right)^2 = \frac{eB}{2mv} \Delta l^2. \tag{2.189}$$

Úhel vychýlení svazku bude podle klasického výpočtu

$$\operatorname{tg} \alpha \cong \frac{\Delta y}{\Delta l} = \frac{eB \Delta l}{2mv}. \tag{2.190}$$

Ať už bude obrazec dopadu elektronů na stínítku jakýkoli, měl by se působením magnetického pole úhlově posunout vzhůru o úhel α daný vztahem (2.190).



Obr. 83: K vysvětlení Aharonova-Bohmova jevu.

Změna dopadového obrazce způsobená nenulovým potenciálem (AB jev)

Uvažujme nyní dvojštěrbinový experiment s uspořádáním podle obrázku 83 napravo. Za štěrbinami je dlouhý solenoid, v němž je nenulové magnetické pole. Vně solenoidu, tedy v oblasti, kterou se pohybují elektrony, je magnetické pole nulové a obrazec by neměl být posunut. Nenulový je zde pouze vektorový potenciál. Uvažujme vlnovou funkci ve tvaru

$$\psi(t, \mathbf{x}) = A \, \mathrm{e}^{\mathrm{i} \varphi(t, \mathbf{x})}. \tag{2.191}$$

Konstantnost amplitudy není pro výpočet podstatná. Budeme hledat rovnici pro fázi vlnové funkce, proto dosadíme (2.191) do časové Schrödingerovy rovnice (2.182) zapsané v x reprezentaci:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi. \tag{2.192}$$

Výsledkem je rovnice

$$-\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \left(-\mathrm{i} \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{x}} \right)^2 + V \right). \tag{2.193}$$

Oddělíme-li pouze reálnou část, máme rovnici

$$-\frac{\partial \hbar \varphi}{\partial t} = \left(\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial \hbar \varphi}{\partial \mathbf{x}} \right)^2 + V \right),$$

kterou převedeme na finální tvar

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial \mathbf{x}}\right)^2+V=0\,;\qquad S=\hbar\varphi\,. \tag{2.194}$$

Jde o Hamiltonovu-Jacobiho rovnici (1.174), ve které má veličina S význam akce systému. Fáze vlnové rovnice je tedy dána akcí soustavy:

► $$\varphi=\frac{S}{\hbar}\,. \tag{2.195}$$

Pro případ interakce nabité částice s elektromagnetickým polem známe Lagrangeovu funkci (1.257)

$$L_{\mathrm{int}} == -Q\phi(t,\mathbf{x})+Q\mathbf{A}(t,\mathbf{x})\cdot\mathbf{v}\,.$$

Fáze vlnové funkce proto bude

$$\begin{aligned}\varphi=\frac{S}{\hbar}=\frac{1}{\hbar}\int_{t_0}^{t}L_{\mathrm{int}}\mathrm{d}t=\frac{Q}{\hbar}\int\left(-\phi+\mathbf{A}\cdot\mathbf{v}\right)\mathrm{d}t=\\ =\frac{Q}{\hbar}\int\left(-\phi\,\mathrm{d}t+\mathbf{A}_k\,\mathrm{d}x_k\right)=\frac{Q}{\hbar}\int A_\mu\,\mathrm{d}x^\mu\,.\end{aligned} \tag{2.196}$$

Ať zvolíme kterékoli vyjádření, je fáze vlnové funkce provázána s potenciály elektromagnetického pole, které zde hrají zcela primární úlohu. Celá vlnová funkce bude

► $$\psi=A\exp\left[\frac{\mathrm{i}Q}{\hbar}\int A_\mu\,\mathrm{d}x^\mu\right]. \tag{2.197}$$

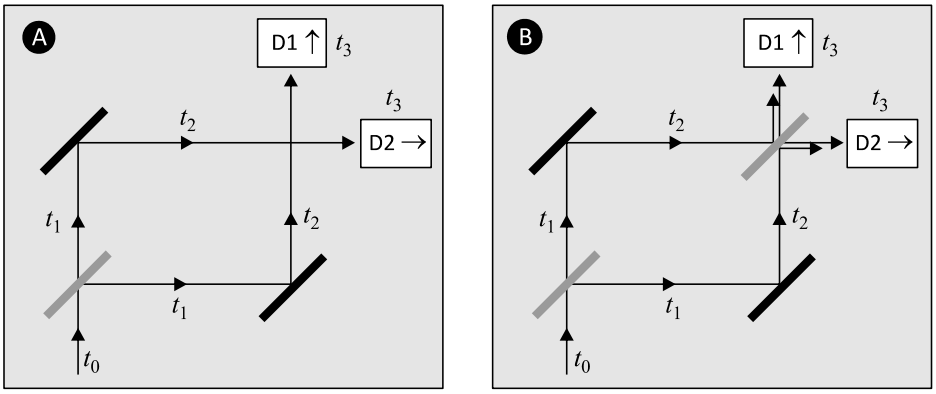
V oblasti, kterou prolétají v Aharonově-Bohmově myšlenkovém experimentu elektrony, je sice magnetické pole nulové, nenulový je ale vektorový potenciál, který způsobí změnu fáze vlnové funkce a tím posun interferenčního obrazce.

Poprvé se pokusil tento jev změřit japonský fyzik Akira Tonomura v roce 1982 za pomoci elektronového holografického mikroskopu, který dokáže kromě intenzity elektronového svazku také zaznamenat fázi elektronů (vyzařují koherentní elektromagnetické pole). Výsledky pro použitou cívku nebyly průkazné, neboť pole prosakovalo i vně cívku. Proto v roce 1986 použil Tonomura jako zdroj pole feromagnet ve tvaru toroidu o průměru 6 μm. Povrch byl pokryt supravodivým niobem, který dokonale odstínil magnetické pole. Teplota byla udržována na 5 K. Měřen byl posun interferenčních proužků mezi svazkem elektronů procházejících vnitřkem toroidu a svazkem elektronů procházejících vně magnetu. V těchto oblastech je nulové magnetické pole, ale různý vektorový potenciál. Proužky byly posunuty o hodnotu předpovězenou Aharonovým-Bohmovým jevem [28].

Poznámka: Feynman si představoval, že mezi počátečním a koncovým bodem pohybu částice je nekonečně mnoho desek s nekonečně mnoha štěrbinami. Každá trajektorie je možná a přináší amplitudu pravděpodobnosti $\psi = A\exp(\mathrm{i}S/\hbar)$. Sčítání všech amplitud pravděpodobnosti vedlo Feynmana k zavedení tzv. *integrálu po drahách*. Kvantovou interferencí se většina amplitud vyruší. Posílí se jen ty, které mají blízkou fázi, tj. pro které se příliš nemění akce S. Taková situace nastává v okolí minima nebo maxima akce. Největší pravděpodobnost tedy budou mít trajektorie, pro které je akce extremální, což je ale *Hamiltonův princip nejmenší akce*!

Machův-Zehnderův interferometr

Obdobnou variantou k dvojštěrbinovému experimentu je Machův-Zehnderův interferometr. Je pojmenovaný podle rakouského fyzika Ludwiga Macha (1868–1951), který byl synem slavného Ernsta Macha, a švýcarského fyzika Ludwiga Zehndera (1858–1949), považovaného za objevitele interferometru. Namísto elektronů je zde využíváno světlo, které má opět možnost se šířit k detektoru dvěma cestami. Tentokrát ale nejde o dvě štěrbiny, ale o dvě interferenční ramena tvořená dvěma úplnými a dvěma polopropustnými zrcadly. Budeme předpokládat, že při každém odrazu se fáze posune o 90°.



Obr. 84: Machův-Zehnderův interferometr.

Povšimněme si nejprve situace na obrázku 84 vlevo. Světlo ze zdroje se na polopropustném zrcadle větví na dva svazky (↑ a →), které už spolu nikde neinteragují a vchází do detektorů D1 (detektor svislých paprsků) a D2 (detektor vodorovných paprsků):

$$\begin{aligned} |\psi(t_0)\rangle &= |\uparrow\rangle; \\ |\psi(t_1)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}|\rightarrow\rangle; \\ |\psi(t_2)\rangle = |\psi(t_3)\rangle &= \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}|\rightarrow\rangle + \frac{\mathrm{i}\,\mathrm{i}}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}|\rightarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle. \end{aligned} \tag{2.198}$$

V čase t_1 je paprsek (nebo jednotlivý foton) v superpozici dvou stavů (svislé a vodorovné dráhy). Koeficienty superpozice zajišťují normování (součet všech pravděpodobností je roven 1). Pravděpodobnosti jsou dány kvadráty koeficientů u jednotlivých stavů superpozice, tedy u obou svazků 0,5. V časech t_2 a t_3 je situace stejná – u každého svazku došlo k jednomu odrazu, který je reprezentován fázovým posunem o 90° (násobením stavu i). V detektorech D1 a D2 je stejná pravděpodobnost záchytu fotonů, budou registrovat stejnou intenzitu světla. V situaci napravo (B) přibude jedno polopropustné zrcadlo, na kterém se každý ze stavů v čase t_2 rozdělí do další superpozice:

$$|\psi(t_3)\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}|\rightarrow\rangle + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle\right] - \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}|\rightarrow\rangle\right] = -|\uparrow\rangle. \tag{2.199}$$

Vidíme, že dojde k destruktivní interferenci vodorovného paprsku na detektoru D2 (nezaznamená žádný signál, paprsky přicházejí v protifázi) a ke konstruktivní interfe-

renci na D1 (zaznamená všechny fotony ve fázi, tj. 100 % intenzity světla). Jde o další ukázku nelokálního chování kvantové teorie způsobeného principem superpozice stavů.

Pokud bychom chtěli výsledek popsat klasicky, můžeme sledovat jen fázová posunutí horní a dolní větve interferometru. Do detektoru D1 přichází paprsek z horní větve po dvou odrazech, tedy s fázovým posunutím 180°. Paprsek z dolní větve sem přichází také po dvou odrazech, tedy opět s fázovým posunutím 180°. Je zjevné, že oba paprsky přicházejí do D1 ve fázi a budou se interferenčně zesilovat.

V detektoru D2 je ale situace jiná. Paprsek z horní větve absolvoval jediný odraz a jeho fázový posun je tedy jen 90°. Paprsek z dolní větve absolvoval tři odrazy a má fázové posunutí 270°. Oba paprsky jsou tedy v protifázi a interferencí se vyruší. Taková klasická interpretace nám ale neodpoví na otázku, kam se poděla energie obou vln, které do detektoru přicházejí v protifázi. Odpověď je v nelokálnosti kvantové teorie: foton je v čase t_3 v superpozici více stavů a byl registrován detektorem D1. V detektoru D2 je nulová pravděpodobnost registrace tohoto fotonu. Dalšími detaily interference v Machově-Zehnderově interferometru se budeme zabývat v kapitolách 2.9.1 a 2.9.2.

2.6.5 Ehrenfestovy teorémy, viriálový teorém

V této kapitole si probereme tři základní teorémy týkající se časového vývoje.

První Ehrenfestův teorém

První teorém se týká časového vývoje operátoru souřadnice. Pro jednoduchost ho odvodíme v jednorozměrném případě, vyjdeme z principu korespondence a časového vývoje (1.40):

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{X}}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{H}}\right] = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\hat{\mathbf{X}}, \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{X}})\right] =$$

$$= \frac{1}{2m\mathrm{i}\hbar}\left[\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{P}}^2\right] + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\hat{\mathbf{X}}, V(\hat{\mathbf{X}})\right] =$$

$$= \frac{1}{2m\mathrm{i}\hbar}\left(\hat{\mathbf{P}}\left[\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{P}}\right] + \left[\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{P}}\right]\hat{\mathbf{P}}\right) =$$

$$= \frac{1}{2m\mathrm{i}\hbar}\left(\mathrm{i}\hbar\hat{\mathbf{P}} + \mathrm{i}\hbar\hat{\mathbf{P}}\right) = \frac{\hat{\mathbf{P}}}{m}.$$

První Ehrenfestův teorém je tak analogií definice hybnosti z klasické mechaniky:

► $$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{X}}}{\mathrm{d}t} = \frac{\hat{\mathbf{P}}}{m}. \tag{2.200}$$

Druhý Ehrenfestův teorém

Druhý Ehrenfestův teorém se týká časového vývoje operátoru hybnosti. Budeme postupovat podobně jako v předchozím případě:

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{P}}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{H}}\right] = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\hat{\mathbf{P}}, \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{X}})\right] =$$

$$= \frac{1}{2m\mathrm{i}\hbar}\left[\,\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{P}}^2\,\right] + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\,\hat{\mathbf{P}},\ V(\hat{\mathbf{X}})\right] =$$

$$= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\,\hat{\mathbf{P}},\ V(\hat{\mathbf{X}})\right].$$

Hodnotu posledního komutátoru určíme takto: Nejprve nalezneme komutátor operátoru hybnosti s libovolnou mocninou operátoru souřadnice (indukcí) a výsledek budeme člen po členu aplikovat na operátor potenciálu rozvinutý do mocninného Taylorova rozvoje:

$$\left[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}\right] = -\left[\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{P}}\right] = -\mathrm{i}\hbar\,\hat{\mathbf{1}},$$

$$\left[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}^2\right] = \hat{\mathbf{X}}\left[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}\right] + \left[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}\right]\hat{\mathbf{X}} = -\mathrm{i}\hbar 2\,\hat{\mathbf{X}}$$

$$\vdots$$

$$\left[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}^n\right] = -\mathrm{i}\hbar n\,\hat{\mathbf{X}}^{n-1},$$

$$\left[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}^{n+1}\right] = \hat{\mathbf{X}}\left[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}^n\right] + \left[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}\right]\hat{\mathbf{X}}^n = -\mathrm{i}\hbar(n+1)\,\hat{\mathbf{X}}^n,$$

$$\left[\hat{\mathbf{P}}, V(\hat{\mathbf{X}})\right] = -\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial V}{\partial \hat{\mathbf{X}}}.$$

Základním předpokladem těchto úvah je samozřejmě rozvinutelnost potenciální energie do Taylorovy řady. Po dosazení za vypočtený komutátor druhý Ehrenfestův teorém vychází:

$$\blacktriangleright \qquad \frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{P}}}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial V}{\partial \hat{\mathbf{X}}}, \tag{2.201}$$

což je vlastně kvantovou analogií Newtonových pohybových rovnic (záporně vzatý gradient potenciální energie je působící sílou).

Viriálový teorém

Viriálový teorém je velmi užitečný nejen v kvantové teorii, ale i ve statistické fyzice. Určuje střední hodnotu kinetické energie obsažené v systému z tvaru energie potenciální. Určeme nejprve maticové elementy komutátoru dynamické proměnné A s Hamiltonovým operátorem v energetické reprezentaci:

$$< n\,|\,[\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{H}}]\,|\,m > =$$

$$= < n\,|\,\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{H}} - \hat{\mathbf{H}}\hat{\mathbf{A}}\,|\,m > =$$

$$= (E_m - E_n) < n\,|\,\hat{\mathbf{A}}\,|\,m > =$$

$$= (E_m - E_n)\,A_{nm}\,.$$

Pro $n = m$ máme

$$< n\,|\,[\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{H}}]\,|\,n > = 0\,.$$

Za operátor dynamické proměnné A budeme nyní volit součin souřadnice a hybnosti:

$$< n | [\hat{\mathbf{X}}\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{H}}] | n > = 0 ,$$

$$< n | [\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{H}}]\hat{\mathbf{P}} | n > + < n | \hat{\mathbf{X}}[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{H}}] | n > = 0 ,$$

$$< n | \frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{X}}}{\mathrm{d}t} \hat{\mathbf{P}} | n > + < n | \hat{\mathbf{X}} \frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{P}}}{\mathrm{d}t} | n > = 0 .$$

Za časový vývoj souřadnice a hybnosti dosadíme z Ehrenfestových teorémů:

$$< n | \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} | n > = < n | \frac{1}{2} \hat{\mathbf{X}} \frac{\partial V}{\partial \hat{\mathbf{X}}} | n > .$$

Ve třech dimenzích je výsledek součtem příspěvků v jednotlivých osách. Na levé straně stojí střední hodnota kinetické energie systému, napravo tzv. *operátor viriálu*:

► $$< n | \hat{\mathbf{T}} | n > = < n | \hat{\mathscr{V}} | n > ; \qquad \hat{\mathscr{V}} \equiv \frac{1}{2} \hat{\mathbf{X}}_k \frac{\partial V}{\partial \hat{\mathbf{X}}_k} . \tag{2.202}$$

Pro jednorozměrný harmonický oscilátor má operátor viriálu snadnou interpretaci – je přímo roven potenciální energii:

$$V(\hat{\mathbf{X}}) = \frac{1}{2} k \hat{\mathbf{X}}^2 \qquad \Rightarrow \qquad \hat{\mathscr{V}} = \frac{1}{2} \hat{\mathbf{X}} \frac{\partial V}{\partial \hat{\mathbf{X}}} = \frac{1}{2} k \hat{\mathbf{X}}^2 .$$

Střední hodnoty kinetické a potenciální energie jsou si proto v každém stavu rovny.

Poznámka: Již v roce 1933 upozornil Fritz Zwicky, že v kupě galaxií ve Vlasech Bereniky je pohyb galaxií větší, než by odpovídalo viriálovému teorému pro gravitační potenciální energii. Řešením je existence další neviditelné (temné) hmoty v této kupě. V roce 1968 byl podobný problém zjištěn Verou Rubinovou i pro oběžné rychlosti hvězd v periferních oblastech samotných galaxií. Řešením je existence haló z temné hmoty v okolí galaxie. Viriálový teorém může být proto velmi užitečný i pro makroskopické nekvantové systémy. Svítící (registrované) hmoty v galaxiích je jen asi 1 %. V roce 2000 se pomocí Hubblova dalekohledu ukázalo, že až 50 procent hmoty Galaxie může být soustředěno ve velmi starých a málo svítících bílých trpaslících, kteří doposud nebyli pozorovatelní. Patřili pravděpodobně k první generaci hvězd před cca 12 miliardami let a vyplňují celé haló Galaxie. Obdobně tomu bude i u ostatních galaxií. K řešení problému temné hmoty bílí trpaslíci zdaleka nestačí. S největší pravděpodobností jde o neznámou formu hmoty nebaryonové povahy, která se hledá v mnoha podzemních laboratořích světa. Příkladem může být italská laboratoř pod horou Gran Sasso a její experiment DAMA/Libra, jiným experimentem je CoGeNT v dole Soudan ve Spojených státech. Z měření sondy Planck plyne, že ve vesmíru je 27 % temné hmoty (z celkového množství hmoty a energie). Údaj je z roku 2015.

2.7 Relativistická kvantová teorie, spin

2.7.1 Prostorová rotace a Lorentzova transformace

Lorentzova transformace popisuje přechod mezi dvěma inerciálními souřadnicovými soustavami, které se vůči sobě pohybují rovnoměrně přímočaře. Je základem speciální relativity Alberta Einsteina a detaily odvození čtenář nalezne například v překrásné učebnici [20]. Lorentzova transformace je unitární transformací a z matematického hlediska patří do skupiny rotací. Proto se nejprve seznámíme s obyčejnou rotací v třírozměrném prostoru.

Prostorová rotace

Pootočíme-li souřadnicovým systémem kolem osy z o úhel φ, lze transformaci jednoduše zapsat jako

$$\begin{aligned} t' &= t\,, \\ x' &= x\cos\varphi + y\sin\varphi\,, \\ y' &= -x\sin\varphi + y\cos\varphi\,, \\ z' &= z\,. \end{aligned} \tag{2.203}$$

Časovou souřadnici budeme dávat na nultou pozici, při prostorové rotaci se čas nemění. Celou transformaci popíšeme pomocí rotační matice $\mathbf{R}_z$, Podobně můžeme popsat rotace kolem ostatních souřadnicových os (stačí cyklicky zaměnit $x \to y \to z \to x$):

$$\mathbf{R}_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos\varphi & \sin\varphi \\ 0 & 0 & -\sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{R}_y = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\varphi & 0 & -\sin\varphi \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \sin\varphi & 0 & \cos\varphi \end{pmatrix},$$

► (2.204)

$$\mathbf{R}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ 0 & -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Rotace patří mezi unitární transformace. Připomeňme si, že unitární operátory zachovávají skalární součin, proto platí

► $\mathbf{U}^\dagger\mathbf{U} = \mathbf{1} \;\Rightarrow\; \det\mathbf{U}^\dagger \det\mathbf{U} = 1 \;\Rightarrow\; \left(\det\mathbf{U}\right)^* \left(\det\mathbf{U}\right) \;\Rightarrow\; |\det\mathbf{U}|^2 = 1\,.$ (2.205)

Pro reálné matice je determinant všech unitárních transformací roven buď +1 (*rotace*), nebo –1 (*zrcadlení*). Snadno se přesvědčíme, že determinant všech tří rotačních matic je roven +1. S rotační symetrií se pojí zachování veličiny, kterou nazýváme *moment hybnosti*. Tato veličina je danou symetrií definována (viz teorém Noetherové, kap. 1.2.1).

Lorentzova transformace

Velmi příbuznou transformací k rotacím je Lorentzova transformace popisující přechod mezi dvěma vzájemně se rovnoměrně pohybujícími inerciálními souřadnicovými systémy, předpokládejme, že v ose x (odvození viz například [20], [6]):

$$t' = \frac{t - vx/c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}},$$

$$x' = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \tag{2.206}$$

$$y' = y,$$

$$z' = z.$$

Tuto známou transformaci lze zapsat podstatně elegantněji v maticové podobě. Zavedeme-li relativistické proměnné $x_0 \equiv ct$, $x_1 \equiv x$; $x_2 \equiv y$; $x_3 \equiv z$ a relativistické koeficienty

$$\beta \equiv \frac{v}{c}; \qquad \gamma \equiv \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}, \tag{2.207}$$

budou matice Lorentzovy transformace (v ostatních osách matice získáme cyklickou záměnou) mít tvar

$$\mathbf{\Lambda}_x = \begin{pmatrix} \gamma & -\gamma\beta & 0 & 0 \\ -\gamma\beta & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{\Lambda}_y = \begin{pmatrix} \gamma & 0 & -\gamma\beta & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -\gamma\beta & 0 & \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{\Lambda}_z = \begin{pmatrix} \gamma & 0 & 0 & -\gamma\beta \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\gamma\beta & 0 & 0 & \gamma \end{pmatrix}. \tag{2.208}$$

Determinant transformačních matic je roven

$$\det \mathbf{\Lambda} = \gamma^2 - \gamma^2\beta^2 = \gamma^2(1-\beta^2) = 1 \tag{2.209}$$

a jde tedy opět o rotace, tentokrát v rovině dané časovou a jednou prostorovou osou. Charakter rotací lépe vynikne, zapíšeme-li Lorentzovy matice pomocí substituce

$$\begin{aligned} \gamma &= \operatorname{ch} u \\ \gamma\beta &= \operatorname{sh} u \end{aligned} \tag{2.210}$$

kde veličina u se nazývá *rapidita* a je definována vztahem

$$u \equiv \operatorname{argth} \frac{v}{c}. \tag{2.211}$$

Lorentzova transformace získá za pomoci rapidity ještě přehlednější tvar

$$\mathbf{\Lambda}_x = \begin{pmatrix} \mathrm{ch}\,u & -\mathrm{sh}\,u & 0 & 0 \\ -\mathrm{sh}\,u & \mathrm{ch}\,u & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{\Lambda}_y = \begin{pmatrix} \mathrm{ch}\,u & 0 & -\mathrm{sh}\,u & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -\mathrm{sh}\,u & 0 & \mathrm{ch}\,u & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

►

$$\mathbf{\Lambda}_z = \begin{pmatrix} \mathrm{ch}\,u & 0 & 0 & -\mathrm{sh}\,u \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\mathrm{sh}\,u & 0 & 0 & \mathrm{ch}\,u \end{pmatrix}.$$

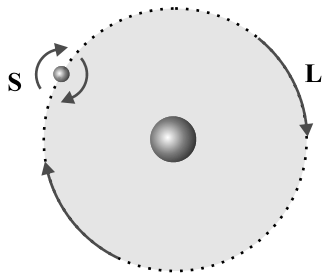
Povšimněte si, že jednotkový determinant všech tří matic je nyní patrný na první pohled ($\mathrm{ch}^2\,u - \mathrm{sh}^2\,u = 1$). S Lorentzovou symetrií (experiment dopadne stejně ve dvou inerciálních soustavách, které se navzájem pohybují rovnoměrně přímočaře) se pojí existence nové zachovávající se veličiny, která se nazývá *spin*.

2.7.2 Spin

V minulé kapitole jsme viděli, že podobnou úlohu, jakou má prostorová rotace, má i Lorentzova transformace. Jde také o rotaci, ale v rovině dané časovou a jednou prostorovou souřadnicí o imaginární úhel nazývaný rapidita. Rotační symetrie odpovídá symetrii systému vzhledem k pootočení, Lorentzova symetrie odpovídá stejnému chování systému v různých, navzájem se rovnoměrně pohybujících inerciálních souřadnicových soustavách. S oběma symetriemi se pojí odpovídající zákony zachování:

rotační symetrie	→	moment hybnosti **L**
Lorentzova symetrie	→	spin **S**

Spin má velmi podobné vlastnosti jako moment hybnosti, lze si ho však jen velmi těžko představit. Značně nepřesné, ale přesto ilustrativní, je představit si částici obíhající kolem centra a současně rotující kolem vlastní osy. V této klasické představě odpovídá momentu hybnosti orbitální rotace a spinu vlastní rotace.



Obr. 86: Nepřesná představa spinu jako rotace kolem osy a momentu hybnosti jako oběhu kolem centra.

Skutečné částice ani neobíhají kolem centra, ani nerotují kolem vlastní osy. Jejich celkový rotační stav je dán dvěma veličinami – momentem hybnosti (orbitálním momen-

tem) a spinem (vnitřním momentem). Obě veličiny se mohou skládat, potom hovoříme o spinorbitální interakci, neboli *LS* interakci či *LS* vazbě. Operátor spinu má stejné komutační relace jako moment hybnosti (2.25), (2.27)

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{S}}_1, \hat{\mathbf{S}}_2] &= \mathrm{i}\,\hbar\,\hat{\mathbf{S}}_3 \quad + \quad \text{cyklické záměny}, \\ [\hat{\mathbf{S}}^2, \hat{\mathbf{S}}_3] &= 0\,. \end{aligned} \tag{2.212}$$

Pro spin zavádíme dvě kvantová čísla (stejně jako u momentu hybnosti): 1) spinové číslo neboli spin s určující velikost a 2) magnetické spinové číslo m_s určující projekci spinu do třetí osy. Pro spin lze pomocí posuvných operátorů odvodit stejně jako pro moment hybnosti vztahy (2.149)

$$\begin{aligned} |S| &= \sqrt{s(s+1)}\;\hbar\,, \qquad & s &= 0, 1/2,\ 1,\ 3/2, \ldots; \\ S_3 &= m_\mathrm{s}\hbar\,, & m_\mathrm{s} &= -s, -s+1, \ldots, s\,. \end{aligned} \tag{2.213}$$

Tentokrát se ale realizují i poločíselné hodnoty, které jsme pro komutační strukturu (2.212) respektive (2.25) odvodili dříve. Hodnota spinu s je pro elementární částice neměnnou charakteristikou, stejně tak jako hodnota elektrického náboje Q nebo klidové hmotnosti m_0.

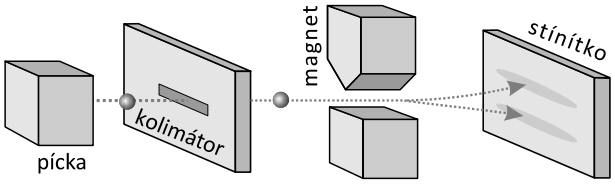
Spin některých částic	
leptony (elektron, tauon, mion, neutrina)	1/2
kvarky (d, u, s, c, b, t)	1/2
skalární mezony (piony π, kaony K)	0
vektorové mezony (róony ρ, kaony K)	1
hadrony (neutron, proton, Λ hyperon)	1/2
hadrony (Δ, Ω)	3/2
polní bosony (γ, $W^{\pm}$, Z^0, gluony)	1
gravitony	2

Přítomnost spinu zvyšuje stupeň degenerace energetických stavů. Například elektron v atomárním obalu, který má energetický stav určený hlavním kvantovým číslem, již nemá stupeň degenerace n^2, ale $2n^2$. Elektron má totiž spin 1/2 a jeho stavy jsou určeny čtveřicí čísel n, l, m, m_s. Projekce spinu m_s může nabývat dvou hodnot $\pm 1/2$ a počet stavů se zdvojnásobuje.

Částice s nenulovým spinem vykazují magnetický moment, aniž by měly orbitální moment hybnosti. Magnetické vlastnosti částic proto nemusejí souviset jen se skutečným rotačním pohybem částic, ale i s „vlastním momentem“ – spinem. V přítomnosti nehomogenního magnetického pole reagují částice na toto pole. Stavy, které původně odpovídaly jediné energii, se štěpí na multiplety blízkých energetických podhladin. Stupeň degenerace se snižuje, stavy s různým m a m_s mají různou energii. Hovoříme o tzv. sejmutí degenerace v přítomnosti magnetického pole.

Spin byl poprvé pozorován ve Sternově-Gerlachově experimentu v roce 1922. Atomy stříbra odpařující se z pícky byly kolimovány do svazku procházejícího nehomogenním magnetickým polem. Na tyto elementární magnetické momenty v nehomogen-

ním poli působí síla $\mathbf{F} = -\mu\nabla B$ (viz například odvození v navazující učebnici [1]). Magnetický moment jednotlivých stavů je různý, a proto je různá i výsledná působící síla a energie daného stavu. Kdyby neexistoval spin, nebude se stav $l = 0$ štěpit vůbec ($m = 0$), stav $l = 1$ se bude štěpit na tři různé podstavy ($m = 0, \pm 1$) a na stínítku se vytvoří jedna nebo tři stříbrné skvrny (i ve vyšších stavech l půjde vždy o lichý počet skvrn). Na stínítku však byly pozorovány dvě stříbrné skvrny, což svědčí o elektronu s orbitálním stavem $l = 0$ a spinovým stavem $s = 1/2$ (magnetické vlastnosti jsou určeny *dvěma* projekcemi $m_s = \pm 1/2$). Sudý počet projekcí znamená poločíselné řešení komutačních relací (2.212) respektive (2.25). Hypotézu o existenci vlastního momentu elektronu, který má podobné vlastnosti jako orbitální moment, podali ještě před teoretickým objasněním spinu Ralph Kronig, George Uhlenbeck a Samuel Goudsmit v roce 1925. Spin jako důsledek Lorentzovy symetrie teoreticky objasnil Paul Dirac v roce 1927.



Obr. 87: Schéma Sternova-Gerlachova experimentu.

Izospin

V polovině 20. století bylo objevováno velké množství elementárních částic. Při výzkumu jejich vlastností se ukázalo, že některé částice se chovají při silné interakci téměř shodně a tvoří jakousi příbuzenskou skupinu neboli multiplet. Příkladem může být dublet (dvojice) neutron a proton nebo kvadruplet (čtveřice) Δ částic. Podobných vlastností neutronu a protonu při silné interakci si povšimnul Heisenberg již v roce 1932 a napadlo ho, že by bylo možné tyto částice chápat jako dva různé kvantové stavy jedné jediné částice, nukleonu. Pojmenování *izospin* navrhnul Eugene Wigner v roce 1937, šlo o zkratku ze slov izotopický spin. Věc fungovala jako u spinu. Neutron a proton jsou dvě částice, takže jejich izospin $I = ½$ a částice se liší třetí projekcí izospinu I_3, která může nabývat hodnot +½ (proton) nebo −½ (neutron).

Zavedení izospinu bylo předzvěstí objevu vnitřní struktury nejenom neutronu a protonu, ale i částic v ostatních multipletech. Ukázalo se, že jsou složeny z kvarků „d“ a „u“, jenž se při silné interakci chovají velmi podobně. Proto vznikají multiplety, jejichž částice mají obdobné vnitřní složení. Tak, jako je pro částici se spinem s počet možných projekcí $2s+1$, má multiplet s izospinem I celkem $2I+1$ členů, tj. multiplet s N členy má izospin

$$I = \frac{N-1}{2}. \tag{2.214}$$

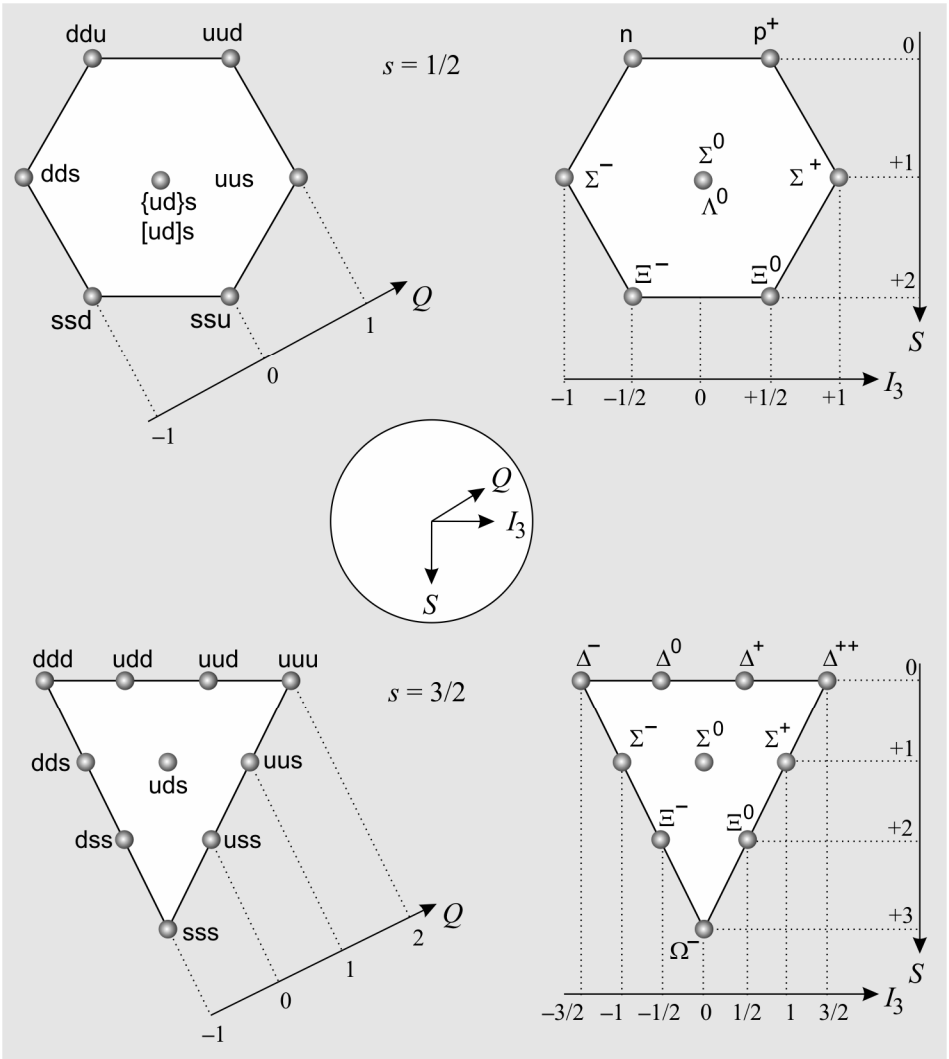
Třetí komponenta je potom dána vnitřní strukturou částice, konkrétně počtem kvarků „d“ a „u“. každý kvark „u“ přispěje k projekci izospinu hodnotou +½ a každý kvark „d“ hodnotou −½, antikvarky samozřejmě opačnou hodnotou:

► $$I_3 = ½N_u - ½N_d - ½N_{\bar{u}} + ½N_{\bar{d}} \tag{2.215}$$

Velmi užitečná je tzv. *Gell-Mannova–Nishijimova formule*, kterou lze snadno odvodit z posledního vztahu, pokud známe náboje jednotlivých kvarků:

► $$I_3 = Q - \tfrac{1}{2}Y\,, \tag{2.216}$$

kde Y je tzv. hypernáboj (průměrný elektrický náboj multipletu). Nejlépe je vše patrné z následujícího obrázku.



Obr. 88: Ukázka vzniku multipletů u baryonů (částic složených ze tří kvarků). V dolní části mají všechny tři kvarky stejně orientovaný spin, tedy výsledný spin částic je 3/2. V horní části jsou baryony s výsledným spinem 1/2 (jeden kvark má orientaci spinu opačnou než zbývající dva). Nalevo je kvarková struktura částic, napravo názvy jednotlivých částic. Na diagramech šikmo-vpravo vzhůru roste elektrický náboj, směrem dolů roste počet podivných kvarků (podivnost S) a doprava roste projekce izospinu v multipletu. Všechny částice multipletu jsou vždy na vodorovné příčce pomyslného žebříčku. Na schématech tak postupně shora jdou: dublet nukleonů (neutron a proton), triplet Σ (sigma) se spinem 1/2, dublet Ξ (ksí) se spinem 1/2, kvadruplet Δ (delta), triplet Σ se spinem 3/2, dublet Ξ se spinem 3/2 a singletní částice Ω (omega). Zkuste si najít projekce izospinu jednotlivých částic multipletu podle vztahů (2.215) nebo (2.216).

2.7.3 Kleinova-Gordonova rovnice

Schrödingerova rovnice není relativistická, a proto nemůže správně popsat spin. Při jejím odvození jsme používali nerelativistický tvar Hamiltonovy funkce. Výsledkem byla Schrödingerova časová rovnice (2.182), která má v *x* reprezentaci tvar

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)\psi=0\,.$$

V rovnici se nachází první časová derivace a druhé prostorové derivace, čas a prostor nejsou rovnoprávné, rovnice zjevně není relativistická. Relativistickou konstrukci lze vytvořit jak ve druhých (Kleinova-Gordonova rovnice), tak v prvních (Diracova rovnice) derivacích. V této kapitole se budeme zabývat konstrukcí správné rovnice ve druhých derivacích.

Kleinova-Gordonova rovnice

Rovnici pro vlnovou funkci částice ve druhých derivacích poprvé odvodili Oskar Klein a Walter Gordon. Předpokládejme, že hledáme lineární rovnici, která limitně při malých rychlostech přejde ve Schrödingerovu rovnici. U lineárních rovnic platí princip superpozice a obecné řešení lze vždy složit z rovinných vln

$$\psi_k(x)=a(k)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}[k\cdot x]}=a(k)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}[k^\alpha x_\alpha]}=a(\omega,\mathbf{k})\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}[\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\omega t]}\,. \tag{2.217}$$

Třírozměrné vektory jsou označeny tučně. Složky vlnového vektoru k^α musí být nutně závislé, neboť i parciální vlny (2.217) musí splňovat hledanou rovnici. Taková závislost se nazývá disperzní relace a můžeme ji zapsat v implicitním tvaru

$$\phi(\omega,\mathbf{k})=0\,. \tag{2.218}$$

V některých případech je možné nalézt explicitní závislost $\omega=\omega(\mathbf{k})$. Obecná vlnová funkce bude superpozicí

$$\psi(x)=\int a(k)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}[k\cdot x]}\,\delta(\phi)\,\mathrm{d}^4k=\int a(\omega,\mathbf{k})\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}[\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\omega(\mathbf{k})t]}\,\mathrm{d}^3\mathbf{k}\,. \tag{2.219}$$

Diracova distribuce zajišťuje automatické splnění disperzní relace (2.218). Parciální (rovinné) vlny lze snadno derivovat:

$$\partial^\alpha\psi_k(x)=\mathrm{i}\,k^\alpha\psi_k(x) \tag{2.220}$$

a parciálním derivacím odpovídají algebraické výrazy

$$\partial^\alpha\quad\leftrightarrow\quad\mathrm{i}\,k^\alpha \tag{2.221}$$

S využitím duality (2.4) máme

$$\hbar\partial^\alpha\quad\leftrightarrow\quad\mathrm{i}\,p^\alpha\,. \tag{2.222}$$

Nejpřirozenějším přechodem od komutujícího k nekomutujícímu popisu je tedy zavedení operátorů na $\mathcal{L}^2$ předpisem

$$\begin{aligned}\hat{p}^\alpha&\equiv-\mathrm{i}\hbar\partial^\alpha\,;\\ \hat{x}^\alpha&\equiv x^\alpha\,.\end{aligned}\qquad. \tag{2.223}$$

Snadno dopočteme, že takto zavedené operátory splňují komutační relace, které jsou ve shodě s principem korespondence mezi Poissonovými závorkami a komutátory

$$\begin{aligned}\left[\hat{p}^{\alpha},\hat{p}^{\alpha}\right]&=\left[\hat{x}^{\alpha},\hat{x}^{\alpha}\right]=0\,,\\ \left[\hat{x}^{\alpha},\hat{p}^{\beta}\right]&=\mathrm{i}\,\hbar\,g^{\alpha\beta}\,.\end{aligned}\tag{2.224}$$

V (3+1) dimenzionálním formalizmu lze první ze vztahů (2.223) zapsat jako

$$\begin{aligned}\hat{E}&\equiv+\mathrm{i}\,\hbar\,\partial/\partial t\,,\\ \hat{\mathbf{p}}&\equiv-\mathrm{i}\,\hbar\,\partial/\partial\mathbf{x}\,.\end{aligned}\tag{2.225}$$

Odlišné znaménko u časové proměnné souvisí s relativistickými transformačními vlastnostmi čtyřvektorů. Druhou relaci jsme již používali v *x* reprezentaci operátoru hybnosti, viz (2.48). Najděme nyní velikost čtyřhybnosti

$$p^{\alpha}\equiv\begin{pmatrix}E/c\\ \mathbf{p}\end{pmatrix}\qquad\Rightarrow\qquad p_{\alpha}p^{\alpha}=-\frac{E^2}{c^2}+\mathbf{p}^2.\tag{2.226}$$

Tato hodnota musí být ve všech souřadnicových soustavách stejná a můžeme ji určit v klidové soustavě částice, kde je $E = m_0c^2$, $\mathbf{p} = 0$:

$$p_{\alpha}p^{\alpha}=-m_0^2c^2\,.\tag{2.227}$$

V (3+1) formalizmu jde o známou Pythagorovu větu pro energii

$$E^2=\mathbf{p}^2c^2+m_0^2c^4.$$

Tento vztah je správným relativistickým vztahem pro energii volné částice, a proto se o něho musí opírat odvození relativistické varianty Schrödingerovy rovnice. Přepišme proto (2.227) do operátorové podoby:

$$\left(\hat{p}_{\alpha}\hat{p}^{\alpha}+m_0^2c^2\right)\psi=0\,;\qquad\hat{p}^{\alpha}\equiv-\mathrm{i}\,\hbar\partial^{\alpha}\,.\tag{2.228}$$

Rovnice (2.228) je Kleinova-Gordonova rovnice pro volnou částici. Po dosazení za operátory získáme jiný často používaný tvar Kleinovy-Gordonovy rovnice

► $$\left(\Box-\kappa^2\right)\psi=0\,;\qquad\kappa\equiv\frac{m_0c}{\hbar}\,.\tag{2.229}$$

Kleinova-Gordonova rovnice je relativistickou analogií Schrödingerovy rovnice pro volnou částici. Při malých rychlostech limitně přechází v nerelativistickou Schrödingerovu rovnici. Jde o lineární rovnici a každé její „rozumné“ řešení je možné zapsat pomocí Fourierovy transformace jako superpozici rovinných vln. Konstanta κ je v *normální soustavě* jednotek ($c = 1$, $\hbar = 1$) rovna klidové hmotnosti částice.

Nerelativistická limita

Kleinovu Gordonovu rovnici (2.228) můžeme v operátorovém tvaru zapsat jako

$$\hat{E}^2=\hat{\mathbf{p}}^2c^2+m_0^2c^4\hat{\mathbf{1}}\,.\tag{2.230}$$

Obě strany formálně odmocníme. Odmocninu chápeme jako funkci operátoru ve smyslu (E.14) nebo (E.47):

$$\hat{E} = \pm\sqrt{\hat{\mathbf{p}}^2c^2 + m_0^2c^4\hat{\mathbf{1}}} = m_0c^2\sqrt{\hat{\mathbf{1}} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{m_0^2c^2}} \approx$$

$$\approx m_0c^2\left(\hat{\mathbf{1}} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0^2c^2} + \cdots\right) \quad \Rightarrow$$

$$\hat{E} \approx m_0c^2\hat{\mathbf{1}} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0}.$$

Záporné znaménko před odmocninou jsme zatím vynechali jako nefyzikální a budeme se jím zabývat až v kapitole věnované Diracově rovnici. První člen můžeme chápat jako konstantní/nulovou potenciální energii (posunutím o konstantu se potenciální energie nezmění) a druhý je běžná kinetická energie částice. Po dosazení za operátory z (2.225) získáme časovou Schrödingerovu rovnici (2.182) s nulovou, resp. konstantní potenciální energií. Pro malé rychlosti (hybnosti) Kleinova-Gordonova rovnice přechází ve Schrödingerovu rovnici.

Pravděpodobnostní interpretace

Hustota ρ a tok pravděpodobnosti **j** výskytu částice by měly splňovat rovnici kontinuity (zákon zachování pravděpodobnosti výskytu částice) ve tvaru

$$\partial_\alpha j^\alpha = 0\,; \qquad j^\alpha \equiv \begin{pmatrix} \rho c \\ \mathbf{j} \end{pmatrix}. \tag{2.231}$$

Ukažme, že takový zákon zachování je v Kleinově-Gordonově rovnici obsažen. Nalezněme kombinaci ψ^*(2.229)–ψ(2.229)*:

$$\psi^*\left(\Box - \kappa^2\right)\psi \; - \; \psi\left(\Box - \kappa^2\right)\psi^* = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\psi^*\Box\psi \; - \; \psi\Box\psi^* = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\psi^*\partial_\alpha\partial^\alpha\psi - \psi\partial_\alpha\partial^\alpha\psi^* = 0\,.$$

Nyní v obou výrazech využijeme identitu $f\partial_\alpha g = \partial_\alpha(fg) - (\partial_\alpha f)g$:

$$\partial_\alpha\left(\psi^*\partial^\alpha\psi\right) - \left(\partial_\alpha\psi^*\right)\left(\partial^\alpha\psi\right) - \partial_\alpha\left(\psi\partial^\alpha\psi^*\right) + \left(\partial_\alpha\psi\right)\left(\partial^\alpha\psi^*\right) = 0\,.$$

Pokud v posledním členu výrazu zvýšíme první index a snížíme druhý, vyruší se s druhým členem a dostaneme:

$$\partial_\alpha\left(\psi^*\partial^\alpha\psi\right) - \partial_\alpha\left(\psi\partial^\alpha\psi^*\right) = 0 \quad \Rightarrow$$

► $$\partial_\alpha j^\alpha = 0\,; \qquad j^\alpha \equiv \psi^*\partial^\alpha\psi - \psi\partial^\alpha\psi^*\,. \tag{2.232}$$

Čtyřvektor j^α reprezentuje nenormovanou pravděpodobnost výskytu částice. Hustota pravděpodobnosti j^0 (v SI j^0/c) není bohužel pozitivně definitní a Kleinova-Gordonova rovnice připouští i záporné hustoty pravděpodobnosti. Řešením tohoto problému (vyústí v existenci antičástic) se budeme zabývat v kapitole věnované Diracově rovnici.

Disperzní relace

Po dosazení rovinné vlny (2.217) do Kleinovy-Gordonovy rovnice získáme disperzní relaci

$$\omega^2 = c^2k^2 + c^2\kappa^2 \qquad \Rightarrow \qquad \omega = \pm\sqrt{c^2k^2 + c^2\kappa^2}\,. \tag{2.233}$$

Záporné řešení (odpovídá záporné energii $\hbar\omega$) budeme opět považovat za nefyzikální. Standardním postupem určíme fázovou a grupovou rychlost:

$$v_\mathrm{f} = \frac{\omega}{k} = c\sqrt{1+\frac{\kappa^2}{k^2}} = c\sqrt{1+\frac{\kappa^2\lambda^2}{4\pi^2}}\,,$$

$$v_\mathrm{g} = \frac{\partial\omega}{\partial k} = \frac{c}{\sqrt{1+\dfrac{\kappa^2}{k^2}}} = \frac{c}{\sqrt{1+\dfrac{\kappa^2\lambda^2}{4\pi^2}}}\,.$$

Na první pohled je zřejmé, že grupová rychlost je vždy podsvětelná. Z Hamiltonových rovnic mechaniky

$$v_\mathrm{g} = \frac{\partial\omega}{\partial k} = \frac{\partial\hbar\omega}{\partial\hbar k} = \frac{\partial H}{\partial p} = \dot{x}$$

plyne, že grupová rychlost vlnového balíku je analogem mechanické rychlosti pohybující se částice. Oproti tomu fázová rychlost je vždy nadsvětelná a nemá význam přenosu informace. Mezi oběma rychlostmi je jednoduchý vztah $v_\mathrm{f}v_\mathrm{g} = c^2$. Obě rychlosti závisí na vlnové délce parciální vlny, tj. dochází k disperzi.

Kleinova-Gordonova rovnice pro nabitou částici v elektromagnetickém poli

V přítomnosti elektromagnetického pole se v Hamiltonově funkci (1.50) vyskytovala kanonická (zobecněná) hybnost v kombinaci $\mathbf{p} - Q\mathbf{A}$. Obdobně tomu musí být i v Kleinově-Gordonově rovnici (2.228), která má pro nabitou částici v elektromagnetickém poli tvar

$$\left[\left(\hat{p}_\alpha - QA_\alpha\right)\left(\hat{p}^\alpha - QA^\alpha\right) + m_0^2c_0^2\right]\psi = 0\,; \qquad \hat{p}^\alpha \equiv -\mathrm{i}\hbar\partial^\alpha\,. \tag{2.234}$$

Po dosazení za operátor hybnosti a roznásobení všech členů máme

$$-\hbar^2\Box\psi + Q^2A_\alpha A^\alpha\psi + m_0^2c^2\psi + \mathrm{i}\hbar Q\partial_\alpha A^\alpha\psi + 2\mathrm{i}\hbar QA^\alpha\partial_\alpha\psi = 0\,. \tag{2.235}$$

Využijeme-li kalibrační podmínku (1.253), tj. položíme-li $\partial_\alpha A^\alpha = 0$, získáme výslednou rovnici

► $$\left[\Box - \kappa^2 - \frac{Q^2}{\hbar^2}A_\alpha A^\alpha - 2\mathrm{i}\frac{Q}{\hbar}A^\alpha\partial_\alpha\right]\psi = 0\,; \qquad \kappa \equiv \frac{m_0c}{\hbar} \tag{2.236}$$

pro popis nabité částice v elektromagnetickém poli.

Vodíkový atom

Naznačme nyní, jak by se postupovalo při hledání spektra vodíkového atomu z Kleinovy-Gordonovy rovnice. Elektron s nábojem $Q = -e$ je v poli jádra, které lze vyjádřit vztahy

$$A^0 = \frac{\phi}{c} = +\frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0 rc}, \qquad \mathbf{A} = 0. \tag{2.237}$$

Kleinova-Gordonova rovnice získá tvar

$$\left[\nabla^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \kappa^2 + \left(\frac{e\phi}{\hbar c}\right)^2 + 2\mathrm{i}\frac{e\phi}{\hbar c}\frac{\partial}{c\partial t}\right]\psi(t,r,\theta,\varphi) = 0.$$

Laplaceův operátor rozložíme na radiální a úhlovou část stejně jako v nerelativistickém případě (2.153). Budeme hledat stacionární řešení, tj. časovou část vlnové funkce budeme předpokládat ve tvaru $\exp(-\mathrm{i}\omega t) = \exp(-\mathrm{i}Et/\hbar)$, prostorovou část zapíšeme jako součin radiální a úhlové části, kterou již známe z dřívějška, viz (2.162):

$$\left[\nabla_r^2 - \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{\hbar^2 r^2} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \kappa^2 + \frac{Z^2\alpha^2}{r^2} + 2\mathrm{i}\frac{Z\alpha}{r}\frac{\partial}{c\partial t}\right]\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et} R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) = 0,$$

kde jsme označili

$$\alpha \equiv \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c} \tag{2.238}$$

tzv. konstantu jemné struktury. Po provedení časových derivací získáme rovnici

$$\left[\nabla_r^2 - \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{\hbar^2 r^2} + \frac{E^2 - m_0^2c^4}{\hbar^2c^2} + \left(\frac{Z\alpha}{r}\right)^2 + 2\frac{Z\alpha}{r}\frac{E}{\hbar c}\right]R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) = 0.$$

Nyní zapůsobíme operátorem $\hat{\mathbf{L}}^2$ na úhlovou část vlnové funkce podle vztahu (2.148) a vyjádříme radiální část Laplaceova operátoru

$$\left[\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} - \frac{l(l+1) - Z^2\alpha^2}{r^2} + 2\frac{Z\alpha}{r}\frac{E}{\hbar c} + \frac{E^2 - m_0^2c^4}{\hbar^2c^2}\right]R(r) = 0.$$

Jde o obyčejnou diferenciální rovnici, která se řeší standardními postupy (asymptotické chování, rozvoj do řady, oříznutí). Výsledkem jsou tzv. Laguerrovy polynomy a energetické spektrum

► $$E_{nl} = m_0c^2 - m_0c^2\left[\frac{Z^2\alpha^2}{2n^2} + \frac{Z^4\alpha^4}{(2l+1)n^4}\left(n - \frac{3}{8}(2l+1)\right) + \mathcal{O}\left((Z\alpha)^6\right)\right]. \tag{2.239}$$

Hlavní kvantové číslo je definováno stejně jako v nerelativistickém případě, druhý člen v hranaté závorce reprezentuje první relativistickou korekci a současně sejmutí degenerace spektrálních čar, viz kapitola 2.7.2.

Problémy

Kleinova-Gordonova rovnice má tři základní problémy:

1. Druhé časové derivace znamenají zadání počáteční podmínky nejen na vlnovou funkci (reprezentuje stav systému), ale i na první časovou derivaci vlnové funkce, což je fyzikálně jen obtížně interpretovatelné.
2. Hustota pravděpodobnosti není pozitivně definitní.
3. Kleinova-Gordonova rovnice poskytuje i záporné energetické stavy.

2.7.4 Diracova rovnice

Správnou relativistickou kvantovou rovnici pro nabitou částici, ve které jsou obsaženy jen první derivace, odvodil Paul Adrien Maurice Dirac (1902–1984) v roce 1928. Ukázalo se, že jde o mnohem vhodnější rovnici pro elektron, než je Kleinova-Gordonova rovnice. Tím, že rovnice je jen v prvních derivacích, postačí zadat počáteční hodnotu vlnové funkce a automaticky odpadá nutnost zadávat první derivaci vlnové funkce. U Diracovy rovnice je hustota pravděpodobnosti pozitivně definitní a tak odpadá i druhý základní problém Kleinovy-Gordonovy rovnice. Problém záporných energetických stavů nicméně přetrvává a Dirac tyto stavy interpretoval jako stavy příslušející antičástici k elektronu – pozitronu. Ten byl objeven až v roce 1932 Carlem Andersonem.

Diracova rovnice

Hledejme rovnici, která má stejný tvar jako Schrödingerova rovnice, ale Hamiltonův operátor je lineární funkcí prostorových derivací:

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} &= \hat{H}\psi\,; \\ \hat{H} &\equiv a^1\partial_1 + a^2\partial_2 + a^3\partial_3 + b\,. \end{aligned} \tag{2.240}$$

Z rozměrových důvodů budeme namísto koeficientů a^k a b hledat koeficienty α^k a β, které jsou bezrozměrné:

$$\hat{H} \equiv -\mathrm{i}\hbar c\left(\alpha^1\partial_1 + \alpha^2\partial_2 + \alpha^3\partial_3\right) + \beta m_0 c^2\,. \tag{2.241}$$

Na koeficienty máme dvě základní podmínky:

1. Kvadrát Hamiltonovy funkce musí dát pravou stranu (2.230), tj.

$$\hat{H}^2 = \hat{\mathbf{p}}^2c^2 + m_0^2c^4\hat{\mathbf{1}}\,; \tag{2.242}$$

   tím bude každé řešení Diracovy rovnice řešením Kleinovy-Gordonovy rovnice (nikoli naopak, druhé derivace některá řešení přidají).
2. Nová rovnice musí být relativisticky kovariantní (tj. její tvar se nesmí změnit po provedení Lorentzovy transformace souřadnic a polí).

Za chvíli uvidíme, že tyto podmínky nesplňují žádné číselné koeficienty a hledaná čísla α^k a β musí být matice. Vyjděme z podmínky (2.242), do které dosadíme hamiltonián (2.241) a za operátor hybnosti z (2.225):

$$\hat{H}^2 = \hat{\mathbf{p}}^2 c^2 + m_0^2 c^4 \hat{\mathbf{1}};$$

$$\left(-\mathrm{i}\hbar c\alpha^k \partial_k + \beta m_0 c^2\right)\left(-\mathrm{i}\hbar c\alpha^l \partial_l + \beta m_0 c^2\right) = \hat{\mathbf{p}}^2 c^2 + m_0^2 c^4 \hat{\mathbf{1}};$$

$$-\hbar^2 c^2 \alpha^k \alpha^l \partial_k \partial_l - \mathrm{i}\hbar c m_0 c^2 \left(\alpha^k \beta + \beta \alpha^k\right)\partial_k + \beta^2 m_0^2 c^4 = -\hbar^2 c^2 \nabla^2 + m_0^2 c^4 \hat{\mathbf{1}}$$

Porovnáním členů na levé a pravé straně máme koeficienty:

$$\begin{aligned} \alpha^k \alpha^l \partial_k \partial_l &= \nabla^2 , \\ \alpha^k \beta + \beta \alpha^k &= 0 , \\ \beta^2 &= \hat{\mathbf{1}} . \end{aligned} \tag{2.243}$$

První relaci upravíme snadno na tvar

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2}\left(\alpha^k \alpha^l + \alpha^l \alpha^k\right)\partial_k \partial_l = \nabla^2 \quad \Rightarrow \\ &\alpha^k \alpha^l + \alpha^l \alpha^k = \begin{cases} 0 & \text{pro } k \neq l , \\ 2 & \text{pro } k = l . \end{cases} \end{aligned} \tag{2.244}$$

Požadavky (2.243), resp. (2.244) nesplňují žádná reálná ani komplexní čísla. Budeme proto hledat soustavu čtyř matic, jejichž zajímavé vlastnosti nejprve přehledně sepíšeme a vzápětí dokážeme

1. Matice α^k a β antikomutují (každá s každou):

$$\left\{\alpha^k, \alpha^l\right\} = \left\{\alpha^k, \beta\right\} = 0 ; \quad k \neq l . \tag{2.245}$$

2. Kvadráty matic α^k a β dají jednotkovou matici:

$$\left(\alpha^1\right)^2 = \left(\alpha^2\right)^2 = \left(\alpha^3\right)^2 = \left(\beta\right)^2 = \hat{\mathbf{1}} . \tag{2.246}$$

3. Matice α^k a β jsou hermitovské:

$$\left(\alpha^k\right)^\dagger = \alpha^k , \qquad \beta^\dagger = \beta . \tag{2.247}$$

4. Vlastní čísla matic α^k a β mohou nabývat jen hodnot +1 a –1.

5. Stopa matic α^k a β je nulová.

6. Matice α^k a β jsou nezávislé.

Dokažme nyní jednotlivá tvrzení

Ad 1. Antikomutační relace matic α^k a β plynou okamžitě z relací (2.243) a (2.244). Poznamenejme, že antikomutátor dvou objektů je definován jako $\{A, B\} \equiv AB+BA$.

Ad 2. Tvrzení opět plyne okamžitě z relací (2.243) a (2.244). Je zřejmé, že druhé mocniny všech Diracových matic dají jednotkovou matici.

Ad 3. Hermitovost matic α^k a β plyne z požadavku na hermitovost operátoru energie (2.241). Diracovy matice jsou tedy hermitovské.

Ad 4. Z podmínky (2.246) plyne, že vlastní čísla matic α^k a β leží na jednotkové kružnici v komplexní rovině, tj. $|\lambda| = 1$. Hermitovské matice ale mají reálná vlastní čísla, tedy připadají v úvahu pouze hodnoty $\lambda = \pm 1$.

Ad 5. Stopou matice nazýváme součet diagonálních členů

$$\mathrm{Tr}(\mathbf{A}) = A^k{}_k \,. \tag{2.248}$$

Tr je zkratkou z anglického *trace*. Stopa matice se nezmění při cyklické záměně matic:

$$\mathrm{Tr}(\mathbf{A}_1\mathbf{A}_2\cdots\mathbf{A}_N) = \mathrm{Tr}(\mathbf{A}_2\cdots\mathbf{A}_N\mathbf{A}_1)\,, \tag{2.249}$$

tj. první matici můžeme odstěhovat na poslední místo v součinu (nebo poslední na první). Nyní již snadno dokážeme, že stopa hledaných matic je nulová:

$$\mathrm{Tr}\left(\alpha^k\right) = \mathrm{Tr}\left(\beta^2\alpha^k\right) = \mathrm{Tr}\left(\beta\beta\alpha^k\right) =$$
$$\mathrm{Tr}\left(\beta\alpha^k\beta\right) = -\mathrm{Tr}\left(\beta\beta\alpha^k\right) = -\mathrm{Tr}\left(\alpha^k\right).$$

Nejprve jsme přidali β^2, což je ale jednotková matice. Poté jsme jednu matici β odstěhovali na konec za pomoci cyklické záměny a vrátili ji zpět na původní pozici s využitím antikomutativnosti matic α^k a β. Přečteme-li si začátek a konec, máme

$$\mathrm{Tr}\left(\alpha^k\right) = -\mathrm{Tr}\left(\alpha^k\right) \quad\Rightarrow\quad 2\,\mathrm{Tr}\left(\alpha^k\right) = 0 \quad\Rightarrow$$
$$\mathrm{Tr}\left(\alpha^k\right) = 0\,.$$

Obdobně můžeme postupovat u matice β:

$$\mathrm{Tr}\left(\beta\right) = \mathrm{Tr}\left((\alpha^k)^2\,\beta\right) = \mathrm{Tr}\left(\alpha^k\beta\alpha^k\right) = -\mathrm{Tr}\left(\alpha^k\alpha^k\beta\right) = -\mathrm{Tr}\left(\beta\right) \quad\Rightarrow$$
$$\mathrm{Tr}\left(\beta\right) = 0\,.$$

Ad 6. Předpokládejme závislost matic, tj. například matici β bude možné vyjádřit jako lineární kombinaci ostatních:

$$\beta = \sum c_k \alpha^k \,.$$

Vynásobme relaci zleva maticí β:

$$\mathbf{1} = \sum c_k \beta\alpha^k \quad\Rightarrow$$
$$\mathrm{Tr}(\mathbf{1}) = \sum c_k\,\mathrm{Tr}(\beta\alpha^k) = \frac{1}{2}\sum c_k\,\mathrm{Tr}(\beta\alpha^k + \alpha^k\beta) = \frac{1}{2}\sum c_k\,\mathrm{Tr}(0) = 0\,.$$

Jde o spor, neboť stopa jednotkové matice nalevo je nenulová. Matice tedy musí být nezávislé. Tím jsou všechna tvrzení (1 až 6) dokázána.

■

Stopa matic je invariantem, tj. ve všech bázích/souřadnicových soustavách je stejná. Pokud u hermitovské matice za bázi zvolíme její vlastní vektory, bude matice diagonální a na diagonále budou její vlastní čísla. Stopa matice je proto součtem vlastních čísel matice. V našem případě jsou vlastní čísla +1 nebo −1, stopa matice je nulová, a proto musí mít hledané matice sudou dimenzi (aby součet čísel +1 a −1 mohl dát nulu).

Řešení pro $N = 2$

V kapitole věnované momentu hybnosti jsme odvodili tzv. spinorovou reprezentaci momentu hybnosti (2.150). Matice spinu bez příslušných koeficientů se nazývají Pauliho matice:

► $$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & +1 \\ +1 & 0 \end{pmatrix}; \qquad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ +\mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}; \qquad \sigma^3 = \begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{2.250}$$

Pauliho matice mají námi hledané vlastnosti. Jsou hermitovské, antikomutují mezi sebou, jejich kvadráty jsou jednotkové matice, vlastní čísla jsou +1 a −1, součet členů na diagonále je nulový. Jejich jedinou nevýhodou je, že jsou jen tři. My hledáme soustavu čtyř nezávislých antikomutujících matic. Ve dvou dimenzích taková soustava ale neexistuje. Další nezávislou maticí k Pauliho maticím je jednotková matice, ale ta s nimi komutuje, nikoli antikomutuje. Navíc u ní není součet diagonálních členů nulový.

Řešení pro $N = 4$

Ve čtyřech dimenzích existuje celkem 16 nezávislých matic a skutečně z nich lze vybrat 4 antikomutující matice požadovaných vlastností. Jde o nejmenší počet dimenzí, ve kterých lze vyřešit Diracovu úlohu. Existuje více způsobů, jak vybrat hledanou soustavu antikomutujících matic. Dirac je blokově skládal z Pauliho matic a nalezl řešení

► $$\beta = \sigma^3 \otimes \mathbf{1} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{-1} \end{pmatrix}; \qquad \alpha^k = \sigma^1 \otimes \sigma^k = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \sigma^k \\ \sigma^k & \mathbf{0} \end{pmatrix}. \tag{2.251}$$

Každý prvek matice znamená blok 2×2. Výsledné Diracovy matice tedy jsou:

► $$\beta = \begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad \alpha^1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & +1 \\ 0 & 0 & +1 & 0 \\ 0 & +1 & 0 & 0 \\ +1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix};$$
$$\alpha^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & 0 & +\mathrm{i} & 0 \\ 0 & -\mathrm{i} & 0 & 0 \\ +\mathrm{i} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \alpha^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ +1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{2.252}$$

Ověřte si, že všechny matice jsou hermitovské, mají vlastní čísla +1 a −1, součet prvků na diagonále je 0, v kvadrátu dají jednotkovou matici a každá matice antikomutuje s každou. Diracova rovnice pro volnou částici má nyní jednoduchý tvar:

► $$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\mathrm{i}\hbar c \alpha^k \partial_k + m_0 c^2 \beta \right) \psi; \qquad \psi = \begin{pmatrix} \psi_1(t, \mathbf{x}) \\ \psi_2(t, \mathbf{x}) \\ \psi_3(t, \mathbf{x}) \\ \psi_4(t, \mathbf{x}) \end{pmatrix}. \tag{2.253}$$

Koeficienty rovnice jsou matice 4×4, vlnovou funkci proto tvoří čtveřice funkcí (nejde o čtyřvektor!). Jiná volba čtveřice Diracových matic by vedla na tatáž fyzikální řešení.

Operátor rychlosti, záporné energie

Určeme operátor rychlosti částice jako operátor časového vývoje polohy podle principu korespondence (2.179):

$$\hat{v}^k = \frac{\mathrm{d}x^k}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[x^k, \hat{H}\right] = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[x^k, -\mathrm{i}\hbar c\alpha^l\partial_l + m_0c^2\beta\right] =$$
$$= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[x^k, -\mathrm{i}\hbar c\alpha^l\partial_l\right] = \frac{c}{\mathrm{i}\hbar}\alpha^l\left[x^k, -\mathrm{i}\hbar\partial_l\right] = \frac{c}{\mathrm{i}\hbar}\alpha^l\left[x^k, p_l\right] =$$
$$= \frac{c}{\mathrm{i}\hbar}\alpha^l\,\mathrm{i}\hbar\delta^k{}_l = c\alpha^k\ .$$

Matice α^k tak mají (až na konstantu c) význam operátoru rychlosti:

$$\hat{v}^k = c\alpha^k\ . \tag{2.254}$$

Formálně lze zapsat všechny tři relace dohromady

$$\hat{\mathbf{v}} = c\hat{\boldsymbol{\alpha}}\ . \tag{2.255}$$

Za pomoci operátorů rychlosti a hybnosti získá Diracova rovnice (2.253) jednoduchý tvar:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(\hat{\mathbf{v}}\cdot\hat{\mathbf{p}} + m_0c^2\beta\right)\psi\ ;$$
$$\hat{\mathbf{v}} \equiv c\hat{\boldsymbol{\alpha}}\ , \qquad \hat{\mathbf{p}} \equiv -\mathrm{i}\hbar\vec{\nabla}\ . \tag{2.256}$$

Řešme nyní Diracovu rovnici pro částici v klidu, tj. s nulovým operátorem rychlosti

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix} = m_0c^2\begin{pmatrix}+\psi_1\\ +\psi_2\\ -\psi_3\\ -\psi_4\end{pmatrix}.$$

Řešení je:

$$\psi_1(t,\mathbf{x}) = A_1(\mathbf{x})\exp\left[-\mathrm{i}\frac{m_0c^2}{\hbar}t\right],$$
$$\psi_2(t,\mathbf{x}) = A_2(\mathbf{x})\exp\left[-\mathrm{i}\frac{m_0c^2}{\hbar}t\right],$$
$$\psi_3(t,\mathbf{x}) = A_3(\mathbf{x})\exp\left[+\mathrm{i}\frac{m_0c^2}{\hbar}t\right],$$
$$\psi_4(t,\mathbf{x}) = A_4(\mathbf{x})\exp\left[+\mathrm{i}\frac{m_0c^2}{\hbar}t\right].$$

Porovnáme-li řešení s časovou částí rovinné vlny $\exp[-\mathrm{i}\omega t] = \exp[-\mathrm{i}(E/\hbar)t]$, je zřejmé, že první dvě řešení odpovídají kladné energii $E = m_0c^2$ a druhá dvě záporné energii $E = -m_0c^2$. Problém záporných energetických stavů tak Diracova rovnice nevyřešila.

Ukázalo se, že Diracova rovnice popisuje chování částic se spinem 1/2 (například elektron). Čtveřice ψ se nazývá *bispinor*. Má speciální transformační vlastnosti. Horní dvě komponenty bispinoru popisují stavy *částice* s projekcí spinu +1/2 a −1/2 a mají kladnou energii. Dolní dvě komponenty mají zápornou energii a Dirac je interpretoval jako stavy *antičástice* s projekcí spinu +1/2 a −1/2. Diracova rovnice je v jistém smyslu „odmocněním" Kleinovy-Gordonovy rovnice postavené na vztahu $E^2 = p^2c^2 + m_0^2c^4$. Proto stavy se zápornou energií nejsou překvapením. Elegantní však bylo Diracovo vysvětlení: Všechny záporné stavy jsou zaplněny (Diracovo „moře elektronů" se zápornou energií, viz kapitola 2.7.5) se chová jako „díra", kterou Dirac interpretoval jako antičástici s kladnou energií. Tuto analýzu provedl Dirac v roce 1928 a teoreticky z ní předpověděl existenci pozitronu ještě před jeho experimentálním objevem v roce 1932 (Carl Anderson).

Pravděpodobnostní interpretace

Při odvození rovnice kontinuity pro pravděpodobnost budeme postupovat stejně jako u Kleinovy-Gordonovy rovnice, jen namísto komplexního sdružení budeme využívat hermitovské sdružení jednotlivých matic i základního bispinoru, který tvoří vlnovou funkci. Hermitovsky sdružený bispinor má tvar

$$\psi^\dagger = \begin{pmatrix} \psi_1^* & \psi_2^* & \psi_3^* & \psi_4^* \end{pmatrix}. \tag{2.257}$$

Nalezněme nyní kombinaci $\psi^\dagger$(2.253) – ψ (2.253)†:

$$\psi^\dagger \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} + \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi^\dagger}{\partial t}\psi = \psi^\dagger\left(-\mathrm{i}\hbar c\alpha^k\partial_k + m_0c^2\beta\right)\psi - \left(\mathrm{i}\hbar c\left(\alpha^k\partial_k\psi\right)^\dagger + m_0c^2\left(\beta\psi\right)^\dagger\right)\psi,$$

$$\psi^\dagger \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} + \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi^\dagger}{\partial t}\psi = -\mathrm{i}\hbar c\psi^\dagger\alpha^k\partial_k\psi + m_0c^2\psi^\dagger\beta\psi - \mathrm{i}\hbar c\left(\partial_k\psi^\dagger\right)\alpha^k\psi - m_0c^2\psi^\dagger\beta\psi,$$

$$\psi^\dagger\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\partial\psi^\dagger}{\partial t}\psi = -c\psi^\dagger\alpha^k\partial_k\psi - c\left(\partial_k\psi^\dagger\right)\alpha^k\psi,$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi^\dagger\psi\right) = -\partial_k\left(\psi^\dagger c\alpha^k\psi\right),$$

$$\frac{\partial}{\partial ct}\left(c\psi^\dagger\psi\right) + \partial_k\left(\psi^\dagger c\alpha^k\psi\right) = 0.$$

Získali jsme tak rovnici kontinuity ve tvaru

► $$\partial_\mu j^\mu = 0; \qquad j^0 = c\psi^\dagger\psi, \qquad \vec{\mathbf{j}} = \psi^\dagger\,\hat{\vec{\mathbf{v}}}\,\psi, \qquad \hat{\vec{\mathbf{v}}} = c\hat{\vec{\boldsymbol{\alpha}}}. \tag{2.258}$$

Hustota pravděpodobnosti je dána vztahem

$$\rho_\mathrm{P} = j^0/c = \psi^\dagger\psi = \psi_1^*\psi_1 + \psi_2^*\psi_2 + \psi_3^*\psi_3 + \psi_4^*\psi_4 \geq 0 \tag{2.259}$$

a je tedy pozitivně definitní. Tok pravděpodobnosti je zobecněním vztahu pro klasický tok (hustota × rychlost), rychlost nahrazuje operátor rychlosti. Výsledný tok pravděpodobnosti je ale obyčejným vektorem, neboť každá z jeho komponent je součinem řádkové, čtvercové a sloupcové matice, tj. dá obyčejné číslo.

Diracova rovnice pro nabitou částici v elektromagnetickém poli

Zobecnění z volné částice na částici v poli provedeme stejně jako u Kleinovy-Gordonovy rovnice, tj. nahradíme

$$\hat{p}^{\alpha} \to \hat{p}^{\alpha} - QA^{\alpha} . \tag{2.260}$$

V (3+1) symbolice máme

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial ct} &\to \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial ct} - Q\frac{\phi}{c}; \\ -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} &\to -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} - Q\mathbf{A} . \end{aligned} \tag{2.261}$$

Diracova rovnice (2.256) získá nyní tvar

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} - Q\phi\psi = \left[\hat{\vec{\mathbf{v}}}\cdot\left(\hat{\mathbf{p}} - Q\mathbf{A}\right) + m_0c^2\beta\right]\psi ,$$

neboli

► $$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[\hat{\vec{\mathbf{v}}}\cdot\hat{\mathbf{p}} + m_0c^2\beta\right]\psi + \left[Q\phi - Q\mathbf{A}\cdot\hat{\vec{\mathbf{v}}}\right]\psi . \tag{2.262}$$

Oproti volné částici přibyl napravo interakční hamiltonián podle vztahu

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} &= \hat{H}_0\psi + \hat{H}_{\mathrm{I}}\psi ; \\ \hat{H}_0 \equiv \hat{\vec{\mathbf{v}}}\cdot\hat{\mathbf{p}} + m_0c^2\beta , &\qquad \hat{H}_{\mathrm{I}} \equiv Q\phi - Q\mathbf{A}\cdot\hat{\vec{\mathbf{v}}} . \end{aligned} \tag{2.263}$$

I v tomto případě jde jen o přímé zobecnění interakčního členu známého z Lagrangeovy funkce v klasické mechanice.

Kovariantní tvar Diracovy rovnice

Přenásobme Diracovu rovnici (2.253) zleva maticí β a poté převeďme všechny členy na levou stranu rovnosti:

$$\mathrm{i}\hbar\beta\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(-\mathrm{i}\hbar c\beta\alpha^k\partial_k + m_0c^2\right)\psi \quad \Rightarrow$$

$$\left(\mathrm{i}\hbar\beta\frac{\partial\psi}{\partial ct} + \mathrm{i}\hbar\beta\alpha^k\partial_k - m_0c\right)\psi = 0 .$$

Získali jsme tak nejznámější tvar Diracovy rovnice

$$\left(\mathrm{i}\hbar\gamma^{\mu}\partial_{\mu} - m_0c\right)\psi = 0 ;$$

► $$\begin{aligned} \gamma^0 &\equiv \beta , \\ \gamma^k &\equiv \beta\alpha^k , \end{aligned} \tag{2.264}$$

ve které jsou koeficienty derivací tzv. gama matice

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad \gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix};$$

► (2.265)

$$\gamma^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & 0 & \mathrm{i} & 0 \\ 0 & \mathrm{i} & 0 & 0 \\ -\mathrm{i} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix};$$

Mezi původními maticemi a maticemi gama existují jednoduché vztahy:

$$\begin{aligned} \gamma^0 &= \beta\,, \\ \gamma^k &= \beta\alpha^k\,, \\ \alpha^k &= \beta\gamma^k\,. \end{aligned} \tag{2.266}$$

První dva definují Diracovy matice, třetí vztah plyne z druhého po vynásobení maticí β zleva. Pro prostorovou část obou sad matic tak platí jednoduché pravidlo: násobením maticí β zleva dostaneme odpovídající matici z druhé sady. Matice gama opět antikomutují, nejsou již ale hermitovské a kvadráty prostorových matic nedají jednotkovou matici, ale minus jednotkovou matici:

$$\left(\gamma^1\right)^2 = \gamma^1\gamma^1 = \beta\alpha^1\beta\alpha^1 = -\alpha^1\beta\beta\alpha^1 = -\alpha^1\alpha^1 = -\mathbf{1}\,.$$

Obdobně bychom postupovali u ostatních matic, platí tedy

$$\left(\gamma^k\right)^2 = -\mathbf{1}\,; \qquad k = 1,2,3\,. \tag{2.267}$$

Zaveďme nyní dvě užitečné a často používané operace. První z nich je tzv. Diracovo sdružení:

► $$\overline{\mathbf{A}} \equiv \mathbf{A}^\dagger\gamma^0\,. \tag{2.268}$$

Jde o hermitovské sdružení doplněné násobením maticí γ^0 zprava. Druhou operací je Feynmanovo zúžení (*Feynman slash*):

► $$\not{K} \equiv \gamma^\alpha K_\alpha\,. \tag{2.269}$$

Za pomoci těchto operací lze elegantně zapsat všechny složky čtyřtoku pravděpodobnosti (2.258)

$$\begin{aligned} j^0 &= c\psi^\dagger\psi = c\psi^\dagger\gamma^0\gamma^0\psi = c\,\overline{\psi}\gamma^0\psi\,, \\ j^k &= \psi^\dagger\, c\alpha^k\psi = \psi^\dagger\, c\gamma^0\gamma^k\psi = c\,\overline{\psi}\gamma^k\psi\,. \end{aligned}$$

Jednotně tedy můžeme psát

► $$\partial_\mu j^\mu = 0\,; \qquad j^\mu \equiv c\,\overline{\psi}\gamma^\mu\psi\,. \tag{2.270}$$

Diracovu rovnici (2.264) lze přepsat do „úsporného“ tvaru

$$\left(\gamma^{\mu}\hat{p}_{\mu}+m_0c\right)\psi=0\,,\quad\text{neboli}\tag{2.271}$$

$$\left(\hat{\not{p}}+m_0c\right)\psi=0\,.\tag{2.272}$$

Pro nabitou částici v elektromagnetickém poli bude mít Diracova rovnice nyní velmi jednoduchý tvar

► $$\left(\hat{\not{p}}-Q\not{\mathbb{A}}+m_0c\right)\psi=0\,.\tag{2.273}$$

Spin se stal automatickou součástí relativistických rovnic kvantové teorie. Rovnice Kleinova-Gordonova se nakonec ukázala vhodnou rovnicí pro skalární částice (se spinem 0), rovnice Diracova pro částice se spinem ½ (elektrony, neutrina, kvarky). Právě na ní je postavena dnešní kvantová elektrodynamika.

◖ Příklad 42:

$$\left\{\gamma^{\alpha},\gamma^{\beta}\right\}=\begin{cases}0\,; & \alpha\neq\beta\\ +2; & \alpha=\beta=0\\ -2; & \alpha=\beta=1,2,3\end{cases}\quad\Rightarrow\quad\left\{\gamma^{\alpha},\gamma^{\beta}\right\}=-2g^{\alpha\beta}.\tag{2.274}$$

Kvadrát matic α a β je roven jednotkové matici. U matic γ tomu tak není, $(\gamma^0)^2 = 1$, ale $(\gamma^k)^2 = -1$ pro $k = 1, 2, 3$. Je to přirozené, v Minkowského metrice se prostorová část chová vždy jinak než časová část. Ve vztahu (2.274) je výsledek na pravé straně vždy násoben jednotkovou maticí, tu ale nebývá zvykem psát.

◗

◖ Příklad 43:

$$\not{K}\not{K}\equiv\gamma^{\alpha}K_{\alpha}\gamma^{\beta}K_{\beta}=\gamma^{\alpha}\gamma^{\beta}K_{\alpha}K_{\beta}=$$
$$=\frac{1}{2}\left\{\gamma^{\alpha},\gamma^{\beta}\right\}K_{\alpha}K_{\beta}=-g^{\alpha\beta}K_{\alpha}K_{\beta}=K_0^2-\mathbf{K}^2.$$

◗

◖ Příklad 44:

$$\not{\partial}\not{\partial}\equiv\gamma^{\alpha}\partial_{\alpha}\gamma^{\beta}\partial_{\beta}=\gamma^{\alpha}\gamma^{\beta}\partial_{\alpha}\partial_{\beta}=$$
$$=\frac{1}{2}\left\{\gamma^{\alpha},\gamma^{\beta}\right\}\partial_{\alpha}\partial_{\beta}=-g^{\alpha\beta}\partial_{\alpha}\partial_{\beta}=-\Box.$$

◗

◖ Příklad 45:

$$\not{p}\equiv\gamma^{\alpha}p_{\alpha}=\gamma^0p_0+\gamma^kp_k=\begin{pmatrix}\mathbf{1}&\mathbf{0}\\ \mathbf{0}&-\mathbf{1}\end{pmatrix}\frac{E}{c}+\begin{pmatrix}\mathbf{0}&\sigma^k\\ -\sigma^k&\mathbf{0}\end{pmatrix}p_k=\begin{pmatrix}(E/c)\mathbf{1}&p_k\sigma^k\\ -p_k\sigma^k&-(E/c)\mathbf{1}\end{pmatrix}.$$

◗

◖ Příklad 46:

Dokažme, že platí relace (užitečná při výpočtu sdružených matic $\gamma^{\mu\dagger}$)

$$\gamma^{\mu\,\dagger} = \gamma^0 \gamma^\mu \gamma^0 . \tag{2.275}$$

Relaci (2.275) zleva a zprava vynásobíme γ^0 a dokážeme platnost vztahu $\gamma^0\gamma^{\mu\dagger}\gamma^0 = \gamma^\mu$: Sdruženou matici $\gamma^{\mu\dagger}$ rozepíšeme z (2.266) za pomoci sady hermitovských matic α a β:

$$\gamma^0 \gamma^{0\,\dagger} \gamma^0 = \gamma^0 \beta \gamma^0 = \gamma^0 \gamma^0 \gamma^0 = \gamma^0 ;$$

$$\gamma^0 \gamma^{k\,\dagger} \gamma^0 = \gamma^0 \left(\gamma^0 \alpha^k \right)^\dagger \gamma^0 = \gamma^0 \alpha^k \gamma^0 \gamma^0 = \gamma^0 \alpha^k = \gamma^k .$$

◗

Matice C

Existuje řada dalších zajímavých matic, které lze odvodit ze základní sady matic γ^μ. Zaveďme nejprve **C** matici, která bude užitečná při nábojovém sdružení (přechodu od částic k antičásticím a také při výpočtu transponovaných matic $\gamma^{\mu\mathrm{T}}$:

$$\mathbf{C} \equiv \mathrm{i}\,\gamma^2 \gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & +1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ +1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{2.276}$$

Matice má prvky jen na vedlejší diagonále, a to střídající se hodnoty +1 a –1. Stopa matice je nulová. Na první pohled je zřejmé, že pro **C** platí zajímavá vlastnost:

$$\mathbf{C}^{\mathrm{T}} = \mathbf{C}^\dagger = \mathbf{C}^{-1} = -\mathbf{C} . \tag{2.277}$$

Chceme-li tedy najít inverzní matici, transponovanou či hermitovsky sdruženou, stačí jen změnit znaménko matice (vyměnit pořadí +1 a −1 na vedlejší diagonále). Pokud potřebujeme nalézt transponovanou matici $\gamma^{\mu\mathrm{T}}$, lze k tomu využít matice **C**:

$$\gamma^{\mu\,\mathrm{T}} = \mathbf{C}\gamma^\mu\mathbf{C} ; \qquad \text{resp.} \qquad \gamma^{\mu\,\mathrm{T}} = -\mathbf{C}^{-1}\gamma^\mu\mathbf{C} . \tag{2.278}$$

Tvrzení se dokáže pouhým převedením matic γ^μ na sadu matic α a β, které se po transpozici nezmění.

Matice γ^5

Další důležitou maticí, která má využití při popisu levopravé symetrie, je matice

$$\gamma^5 \equiv \mathrm{i}\,\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix}. \tag{2.279}$$

Tato matice je hermitovská, její kvadrát je roven jednotkové matici, je lineárně nezávislá na ostatních γ maticích a antikomutuje s nimi:

$$\gamma^{5\dagger} = \gamma^5 ,$$
$$\left(\gamma^5\right)^2 = \mathbf{1} , \tag{2.280}$$
$$\left\{\gamma^5, \gamma^\mu\right\} = 0 ; \quad \mu = 0,1,2,3 .$$

Matice Σ a báze Γ^k

Z matic γ^μ můžeme zkonstruovat ještě matice Σ, které jsou užitečné při definici báze na prostoru matic a při hledání transformačních vlastností antisymetrických tenzorů. Matice definujeme jako komutátory

$$\Sigma^{\mu\nu} \equiv \frac{i}{2}\left[\gamma^\mu, \gamma^\nu\right]. \tag{2.281}$$

Zřejmě platí

$$\Sigma^{\alpha\beta} = \begin{cases} 0 ; & \alpha = \beta , \\ -\Sigma^{\beta\alpha} ; & \alpha \neq \beta . \end{cases} \tag{2.282}$$

Je zjevné, že existuje celkem šest nezávislých matic $\Sigma^{\alpha\beta}$, například Σ^{01}, Σ^{02}, Σ^{03}, Σ^{12}, Σ^{13}, Σ^{23}. Ostatní prvky jsou buď nulové, nebo je lze dopočíst z antisymetrie. Zajímavou bází na prostoru matic 4×4 je následujících 16 matic:

$$\Gamma^k = \left\{\mathbf{1}, \gamma^5, \gamma^\mu, \gamma^5\gamma^\mu, \Sigma^{\mu\nu}\right\}. \tag{2.283}$$

Celkem snadno lze ukázat, že matice Γ^k jsou nezávislé. Protože jich je 16, tvoří bázi na prostoru matic 4×4. Jejich kvadrát je +1 nebo –1, vhodným vynásobením ±i by bylo možné docílit, aby kvadrát byl vždy roven jednotkové matici, je to však zbytečné. Stopa všech, s výjimkou jednotkové matice Γ^1, je nulová. Násobek libovolných dvou různých matic Γ^k je až na znaménko roven některé další matici Γ:

$$\begin{aligned} &1) \quad \Gamma^k \text{ jsou lineárně nezávislé,} \\ &2) \quad \left(\Gamma^k\right)^2 = \pm 1, \\ &3) \quad \mathrm{Tr}\left(\Gamma^k\right) = \begin{cases} 4 & k = 1; \\ 0 & k \neq 1, \end{cases} \\ &4) \quad \forall k,l;\ k \neq l\ \ \exists m \neq k,l: \qquad \Gamma^k \Gamma^l = \pm \Gamma^m . \end{aligned} \tag{2.284}$$

Z rovnice kontinuity (2.270) je zřejmé, že veličina $\bar{\psi}\gamma^\mu\psi$ je čtyřvektor. Obdobně lze pomocí členů báze Γ^k zkonstruovat i další charakteristicky se transformující veličiny:

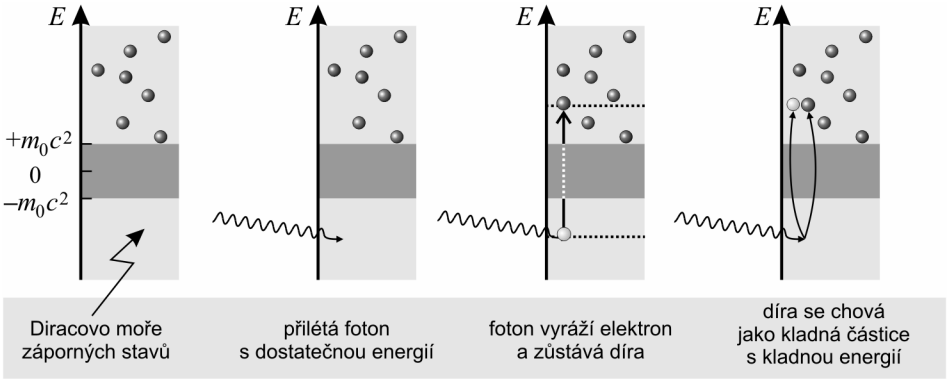
$$\begin{aligned} &\bar{\psi}\psi && \text{skalár,} \\ &\bar{\psi}\gamma^5\psi && \text{pseudoskalár,} \\ &\bar{\psi}\gamma^\mu\psi && \text{vektor,} \\ &\bar{\psi}\gamma^5\gamma^\mu\psi && \text{pseudovektor,} \\ &\bar{\psi}\Sigma^{\mu\nu}\psi && \text{antisymetrický tenzor.} \end{aligned} \tag{2.285}$$

2.7.5 Pozitron, C symetrie

Nejprve popíšeme úvahy, které vedly Paula Diraca k předpovědi existence pozitronu, a poté matematickou transformaci (nábojové sdružení), která převede Diracovu rovnici pro elektron na rovnici pro pozitron. Dirac předpověděl existenci pozitronu v roce 1928, objeven byl Carlem Andersonem v kosmickém záření v roce 1932.

Diracovo moře

Jak jsme viděli, z Diracovy rovnice vycházejí záporné energetické stavy. Záporné energie se ale v přírodě nevyskytují a tak Diraca napadlo, že tyto stavy jsou všechny zaplněny elektrony a žádný z nich není volný, proto je nepozorujeme. Vakuum je podle této představy tvořeno mořem elektronů v záporných energetických stavech, tzv. Diracovým mořem.



Obr. 89: Diracovo moře.

Představme si, že do tohoto moře vletí foton s energií větší než je dvojnásobek klidové energie elektronu.

$$E_\gamma > 2m_0c^2.$$

Potom může z Diracova moře vytrhnout elektron a převést ho do některého energetického stavu s kladnou energií. V záporném Diracově moři zůstane díra – prázdný energetický stav, který se vůči okolí jeví jako kladně nabitá oblast s kladnou energií (hmotností). Dirac tuto díru v roce 1928 interpretoval jako kladně nabitou částici, která má jinak shodné vlastnosti s elektronem, a nazval ji pozitron. Navenek se tedy zdá, jakoby se původní foton rozpadl na elektron-pozitronový pár. V roce 1929 Dirac tento koncept rozšířil na všechny částice a zavedl pojem antičástice – objektu, který má opačné hodnoty všech kvantových nábojů oproti původní částici. Bylo to v době, kdy ještě nebyl objeven ani neutron.

Pohyb volného elektronu by měl být Diracovým mořem ovlivněn. Elektron interaguje s blízkými elektrony v záporných stavech, odtlačuje je od sebe a z dálky vypadá, jako by měl menší náboj, než skutečně má. Z větší vzdálenosti proto nevidíme skutečný náboj elektronu, ale náboj odstíněný Diracovým mořem. Čím více se přibližujeme k letícímu elektronu, tím více vnímáme jeho skutečný, holý náboj.

Nábojové sdružení

Diracova rovnice pro elektron ve vnějším poli má tvar (2.273)

$$\left(\hat{p} - Q\,\mathbb{A} + m_0 c\right)\psi = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\left(-i\hbar\gamma^\mu \partial_\mu - Q\,\gamma^\mu A_\mu + m_0 c\right)\psi = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\left(i\hbar\gamma^\mu \partial_\mu + Q\,\gamma^\mu A_\mu - m_0 c\right)\psi = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\left(i\hbar\gamma^\mu \partial_\mu - e\,\gamma^\mu A_\mu - m_0 c\right)\psi = 0\,. \tag{2.286}$$

Rovnice pro pozitron by měla mít tvar

$$\left(i\hbar\gamma^\mu \partial_\mu + e\,\gamma^\mu A_\mu - m_0 c\right)\psi_{\mathrm{C}} = 0\,, \tag{2.287}$$

kde ψ_{C} je vlnová funkce pozitronového řešení. Diracovu rovnici nejprve hermitovsky sdružíme a poté ji transponujeme. Po těchto dvou operacích přejde rovnice pro elektron v rovnici pro pozitron. Operace hermitovského sdružení a transpozice splňují vlastnost (E.18), viz dodatek E:

$$\left(\mathbf{AB}\right)^\dagger = \mathbf{B}^\dagger \mathbf{A}^\dagger\,; \qquad \left(\mathbf{AB}\right)^{\mathrm{T}} = \mathbf{B}^{\mathrm{T}} \mathbf{A}^{\mathrm{T}}. \tag{2.288}$$

Proveďme tedy Hermitovo sdružení Diracovy rovnice pro elektron (2.286):

$$\psi^\dagger \left(i\hbar\gamma^\mu \underset{\leftarrow}{\partial_\mu} - e\,\gamma^\mu A_\mu - m_0 c \right)^\dagger = 0\,.$$

Derivace nyní působí samozřejmě vlevo, tj. na vlnovou funkci (v zápise je to naznačeno šipkou pod derivací). Hermitovo sdružení nyní aplikujme na jednotlivé členy v závorce

$$\psi^\dagger \left(-\mathrm{i}\,\hbar \underset{\leftarrow}{\partial_\mu}\, \gamma^{\mu\dagger} - e\,A_\mu \gamma^{\mu\dagger} - m_0 c \right) = 0$$

a sdružené matice gama vyjádříme ze vztahu (2.275)

$$\psi^\dagger \left(-\mathrm{i}\,\hbar \underset{\leftarrow}{\partial_\mu}\, \gamma^0\gamma^\mu\gamma^0 - e\,A_\mu \gamma^0\gamma^\mu\gamma^0 - m_0 c \right) = 0\,.$$

Rovnici vynásobíme zprava maticí γ^0:

$$\psi^\dagger \gamma^0 \left(-\mathrm{i}\,\hbar \underset{\leftarrow}{\partial_\mu}\, \gamma^\mu - e\,A_\mu \gamma^\mu - m_0 c \right) = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\bar{\psi} \left(-\mathrm{i}\,\hbar \underset{\leftarrow}{\partial_\mu}\, \gamma^\mu - e\,A_\mu \gamma^\mu - m_0 c \right) = 0\,.$$

Po operaci hermitovského sdružení se změnilo znaménko prvého členu, vlnová funkce je nalevo a má tvar diracovsky sdruženého bispinoru. Nyní vrátíme vlnovou funkci doprava za pomoci operace transpozice

$$\left(-\mathrm{i}\hbar\partial_\mu\gamma^\mu - e A_\mu\gamma^\mu - m_0 c\right)^{\mathrm{T}} (\bar{\psi})^{\mathrm{T}} = 0\,.$$

Provedeme transpozice všech členů v závorce

$$\left(-\mathrm{i}\hbar\gamma^{\mu\mathrm{T}}\partial_\mu - e\gamma^{\mu\mathrm{T}} A_\mu - m_0 c\right)(\bar{\psi})^{\mathrm{T}} = 0$$

a transponované matice gama vyjádříme ze vztahu (2.278)

$$\left(-\mathrm{i}\hbar\mathbf{C}\gamma^\mu\mathbf{C}\partial_\mu - e\mathbf{C}\gamma^\mu\mathbf{C}A_\mu - m_0 c\mathbf{1}\right)(\bar{\psi})^{\mathrm{T}} = 0\,.$$

Celou rovnici vynásobíme maticí $\mathbf{C}^{-1}$ zleva

$$\left(-\mathrm{i}\hbar\gamma^\mu\mathbf{C}\partial_\mu - e\gamma^\mu\mathbf{C}A_\mu - m_0 c\mathbf{C}^{-1}\right)(\bar{\psi})^{\mathrm{T}} = 0$$

a využijeme relace (2.277) pro inverzní matici $\mathbf{C}^{-1} = -\mathbf{C}$:

$$\left(-\mathrm{i}\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - e\gamma^\mu A_\mu + m_0 c\right)\mathbf{C}(\bar{\psi})^{\mathrm{T}} = 0\,.$$

Transpozice tedy změnila znaménko posledního členu rovnice a výsledek je

$$\begin{gathered}\left(\mathrm{i}\hbar\gamma^\mu\partial_\mu + e\gamma^\mu A_\mu - m_0 c\right)\psi_{\mathrm{C}} = 0\,;\\ \psi_{\mathrm{C}} \equiv \mathbf{C}(\bar{\psi})^{\mathrm{T}}\,.\end{gathered} \tag{2.289}$$

Získali jsme hledanou rovnici pro pozitron, který má opačný náboj a nezměněnou hmotnost. Pokud známe v dané situaci řešení ψ pro elektron, bude ve stejné situaci odpovídajícím řešením pro pozitron vlnová funkce $\psi_{\mathrm{C}} = \mathbf{C}(\bar{\psi})^{\mathrm{T}}$.

Řešení pro pozitron tedy není novým řešením, je obsaženo v řešení pro elektron. Provedeme-li nábojové sdružení neboli C transformaci

$$\begin{gathered}A_\mu \to -A_\mu\,;\\ \psi \to \mathbf{C}(\bar{\psi})^{\mathrm{T}}\,,\end{gathered} \tag{2.290}$$

Diracova rovnice nezmění svůj tvar (takovou vlastnost nazýváme kovariancí). V původní Diracově rovnici odpovídají dvě řešení s kladnou energií elektronu s projekcí spinu +½ a −½ (proto je řešení zdvojené) a řešení se zápornou energií pozitronu s projekcí spinu +½ a −½. Dvě dvojice spojené do čtveřice vlnových funkcí se nazývají *bispinor*, viz str. 210. Po provedení transformace (2.290) mají pozitronová řešení naopak kladnou energii a elektronová zápornou, takže se na situaci můžeme dívat obráceně a elektron interpretovat jako díru v moři pozitronů obsazujících záporné energetické stavy.

2.7.6 Elektron a jeho pole, U(1) symetrie

Nabité částice v přírodě generují elektromagnetická pole popsaná Maxwellovými rovnicemi (resp. kvantovou teorií elektromagnetického pole) a samy se v těchto polích pohybují ve shodě s Lorentzovou pohybovou rovnicí (resp. Diracovou rovnicí). V této kapitole se nejprve zaměříme na kompletní Lagrangeův popis soustavy pole + elektron a poté se budeme věnovat U(1) symetrii, ze které přímo plyne nutnost existence pole v okolí elektronu.

Lagrangeův popis

Celková hustota Lagrangeovy funkce pro interakci nabité částice a elektromagnetického pole má tvar

$$\mathscr{L} = \mathscr{L}_{\text{field}} + \mathscr{L}_{\text{int}} + \mathscr{L}_{\text{part}} . \tag{2.291}$$

Polní část známe z teoretické mechaniky, viz vztah (1.258)

$$\mathscr{L}_{\text{field}} = -\frac{1}{4\mu_0} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} ; \qquad F^{\mu\nu} \equiv \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu . \tag{2.292}$$

Také interakční část jsme poznali v teoretické mechanice. Pokud jsou částice popsány čtyřtokem j^μ a pole čtyřpotenciálem A^μ, je nejjednodušším skalárem kombinace $j^\mu A_\mu$:

$$\mathscr{L}_{\text{int}} = j^\mu A_\mu . \tag{2.293}$$

V klasické fyzice je tok náboje částic dán výrazem $j^\mu = (\rho_Q c, \mathbf{j})$, v kvantové teorii musí tok částic sledovat pravděpodobnost jejich výskytu a tak musí být úměrný toku pravděpodobnosti (2.270). V případě náboje bude koeficientem úměrnosti samotný náboj:

$$j^\mu = Q\, \bar{\psi} \gamma^\mu \psi . \tag{2.294}$$

Interakční člen tak získá tvar:

$$\mathscr{L}_{\text{int}} = j^\mu A_\mu = Q\, \bar{\psi} \gamma^\mu \psi A_\mu . \tag{2.295}$$

Zbývá nám tedy najít hustotu Lagrangeovy funkce pro samotné částice (elektrony), ze které plyne Diracova rovnice. Velmi jednoduchým skalárem sestaveným přímo za pomoci Diracovy rovnice je výraz

$$\mathscr{L}_{\text{part}} = \bar{\psi} \left(\mathrm{i} \hbar \gamma^\mu \partial_\mu - m_0 c \right) \psi . \tag{2.296}$$

Pokud budeme interpretovat pole $\bar{\psi}, \psi$ jako nezávislá, je hustota Lagrangeovy funkce

$$\mathscr{L}_{\text{part}} = \mathscr{L}_{\text{part}} (\psi, \partial_\alpha \psi, \bar{\psi})$$

a příslušné Lagrangeovy rovnice dají

$$\partial_\alpha \frac{\partial \mathscr{L}_{\text{part}}}{\partial (\partial_\alpha \bar{\psi})} - \frac{\partial \mathscr{L}_{\text{part}}}{\partial \bar{\psi}} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \left(\mathrm{i} \hbar \gamma^\mu \underset{\rightarrow}{\partial_\mu} - m_0 c \right) \psi = 0 ;$$

$$\partial_\alpha \frac{\partial \mathscr{L}_{\text{part}}}{\partial (\partial_\alpha \psi)} - \frac{\partial \mathscr{L}_{\text{part}}}{\partial \psi} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \bar{\psi} \left(\mathrm{i} \hbar \gamma^\mu \underset{\leftarrow}{\partial_\mu} + m_0 c \right) = 0 .$$

První rovnice je Diracova rovnice pro nabitou částici, druhá rovnice je v tuto chvíli jen pomocnou rovnicí pro diracovsky sdružené pole. Povšimněte si, že hmotový člen změnil znaménko. U Feynmanových diagramů to odpovídá přítoku hmoty (či odtoku hmoty) do (z) daného vrcholu. U derivací je v obou případech naznačen směr jejich působení. Nyní již můžeme zapsat kompletní hustotu Lagrangeovy funkce pro částici a elektromagnetické pole:

$$\mathscr{L} = -\frac{1}{4\mu_0} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \; + \; j^\mu A_\mu \; + \; \bar{\psi}\left(\mathrm{i}\hbar\gamma^\mu \partial_\mu - m_0 c\right)\psi \; ;$$

► $$F^{\mu\nu} \equiv \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu \; ; \qquad (2.297)$$

$$j^\mu \equiv Q\,\bar{\psi}\gamma^\mu\psi \; .$$

Poznámka 1: První člen odpovídá volnému poli, druhý interakci pole s částicí a třetí volné částici.

Poznámka 2: Lagrangeova funkce je funkcí polí $A_\mu, \psi, \bar{\psi}$ a jejich derivací. Lagrangeovy rovnice pro pole A_μ dají Maxwellovy rovnice, Lagrangeovy rovnice pro pole $\bar{\psi}$ dají Diracovu rovnici.

Poznámka 3: Pokud ponecháme jen první člen, získáme z hustoty Lagrangeovy funkce Maxwellovy rovnice ve vakuu. Pokud ponecháme jen poslední člen, dostaneme Diracovu rovnici volné částice. První a druhý člen dají Maxwellovy rovnice se zdrojovými členy (pole interaguje s částicemi), druhý a třetí člen dají Diracovu rovnici pro částici v přítomnosti elektromagnetického pole (částice interaguje s polem).

Poznámka 4: Interakční člen (druhý) spolu s částicovým členem (třetím) lze sloučit do podoby, která vede na Diracovu rovnici s elektromagnetickým polem:

$$\mathscr{L}_{\mathrm{Dir}} = \bar{\psi}\left(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu + Q\,\gamma^\mu A_\mu - m_0 c\right)\psi \qquad (2.298)$$

U(1) symetrie

Hustota Lagrangeovy funkce Diracovy rovnice a čtyřtok reprezentující tok náboje

► $$\mathscr{L}_{\mathrm{Dir}} = \bar{\psi}\left(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu + Q\,\gamma^\mu A_\mu - m_0 c\right)\psi \; ;$$

$$j^\mu = Q\bar{\psi}\gamma^\mu\psi$$

se nezmění při transformaci

$$\begin{aligned} \psi &\rightarrow \psi' = \psi\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha} \; , \\ \bar{\psi} &\rightarrow \bar{\psi}' = \bar{\psi}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha} \; , \\ A^\mu &\rightarrow A'^\mu = A^\mu \; . \end{aligned} \qquad (2.299)$$

Touto transformací není změněn ani tenzor pole $F^{\mu\nu}$, a tím ani hustota Lagrangeovy funkce $\mathscr{L}_{\mathrm{field}}$ elektromagnetického pole. Celá teorie reprezentovaná lagranžiánem (2.297) je kovariantní vzhledem k transformaci (2.299). Transformace představuje otočení vlnové funkce v každém bodě časoprostoru o stejný úhel α. Jde o unitární operaci (nemění skalární součin) s jedním parametrem (úhlem α), proto se tato transformace označuje U(1). Představuje tzv. *vnitřní symetrii* teoretického popisu interakce pole-částice. Důsledkem této symetrie je existence elektrického náboje, který se zachovává. U(1) symetrie v jiných teoriích (lagranžiánech) vede na existenci obdobných kvantových nábojů, jako je elektrický, které se v daných procesech zachovávají.

$U(1)_{loc}$ symetrie

Prozkoumejme nyní, jak by se změnil lagranžián volné částice, pokud bychom připustili, aby úhel α potočení vlnové funkce byl v každém bodě časoprostoru jiný. Představte si nekonečnou prostorovou mříž, v jejíchž bodech budou stejné míčky. U(1) symetrie v našem modelu odpovídá tomu, že otočíme všechny míčky kolem jejich středu naráz o stejný úhel. Po této transformaci bude mříž vypadat stejně jako před ní. Nyní si představme, že budeme otáčet v různých časech různé míčky o různé úhly. Výsledek? Prostorová mříž bude vypadat stále stejně jako před začátkem otáčení. A právě takovou symetrii nazýváme $U(1)_{loc}$ symetrií:

►
$$\begin{aligned} \psi &\rightarrow \psi'(x) = \psi(x)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(x)}\,, \\ \bar{\psi} &\rightarrow \bar{\psi}'(x) = \bar{\psi}(x)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha(x)}\,. \end{aligned}$$

Proměnná x symbolizuje celou událost $x = (t, \mathbf{x})$, tedy čtyřvektor. Tato transformace opět nezmění čtyřtok (2.294). Jak se ale změní Lagrangeova funkce volné částice? Dosaďme čárkované veličiny do Lagrangeovy funkce (2.296) a proveďme derivace vlnové a exponenciální funkce:

$$\begin{aligned} \mathscr{L}'_{\mathrm{part}} &= \bar{\psi}'\left(i\hbar\gamma^{\mu}\partial_{\mu} - m_0 c\right)\psi' = \bar{\psi}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha(x)}\left(i\hbar\gamma^{\mu}\partial_{\mu} - m_0 c\right)\psi\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(x)} = \\ &= \bar{\psi}\left(i\hbar\gamma^{\mu}\partial_{\mu} - \hbar\gamma^{\mu}\alpha_{,\mu} - m_0 c\right)\psi \neq \mathscr{L}_{\mathrm{part}}\,. \end{aligned}$$

Hustota Lagrangeovy funkce po transformaci změnila svůj tvar. Přibyl člen $\hbar\gamma^{\mu}\alpha_{,\mu}$ s derivacemi úhlu pootočení, který kopíruje polní člen v hustotě Lagrangeovy funkce nabité částice v přítomnosti pole (2.298). Výsledek je velmi zajímavý. Pokud bychom trvali na tom, aby hustota Lagrangeovy funkce pro volnou částici splňovala symetrii $U(1)_{loc}$, musíme do teorie přidat elektromagnetické pole. Požadavek, aby byla Diracova rovnice kovariantní vzhledem k $U(1)_{loc}$ symetrii, vede na požadavek existence elektromagnetického pole v okolí částice! Samo elektromagnetické pole se při transformaci změní tak, aby kompenzovalo nově vzniklý člen $\hbar\gamma^{\mu}\alpha_{,\mu}$. Uvažujme tedy transformaci

$$\begin{aligned} \psi &\rightarrow \psi' = \psi(x)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(x)}\,, \\ \bar{\psi} &\rightarrow \bar{\psi}' = \bar{\psi}(x)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha(x)}\,, \\ A^{\mu} &\rightarrow A'^{\mu} = A^{\mu}(x) + \delta A^{\mu}(x) \end{aligned}$$

a opět provedeme výpočet čárkovaného lagranžiánu, tentokráte s elektromagnetickým polem:

$$\begin{aligned} \mathscr{L}'_{\mathrm{part}} &= \bar{\psi}'\left(i\hbar\gamma^{\mu}\partial_{\mu} + Q\gamma^{\mu}A'_{\mu} - m_0 c\right)\psi' = \\ &= \bar{\psi}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha(x)}\left(i\hbar\gamma^{\mu}\partial_{\mu} + Q\gamma^{\mu}(A_{\mu} + \delta A_{\mu}) - m_0 c\right)\psi\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(x)} = \\ &= \bar{\psi}\left(i\hbar\gamma^{\mu}\partial_{\mu} + Q\gamma^{\mu}A_{\mu} + \gamma^{\mu}(-\hbar\alpha_{,\mu} + Q\,\delta A_{\mu}) - m_0 c\right)\psi\,. \end{aligned}$$

Hustota Lagrangeovy funkce se nezmění, pokud bude vnitřní kulatá závorka nulová, tj.

$$\delta A_{\mu} = \frac{\hbar}{Q}\alpha_{,\mu}\,.$$

Tím jsme získali návod pro správnou transformaci elektromagnetického pole. Celková transformace $U(1)_{loc}$ bude tedy mít tvar:

$$\begin{aligned} \psi &\rightarrow \psi' = \psi(x)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(x)}\,, \\ \bar{\psi} &\rightarrow \bar{\psi}' = \bar{\psi}(x)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha(x)}\,, \\ A^{\mu} &\rightarrow A'^{\mu} = A^{\mu}(x) + \frac{\hbar}{Q}\partial^{\mu}\alpha\,. \end{aligned} \tag{2.300}$$

Jak jsme ukázali, nezmění se při této transformaci součet $\mathscr{L}_{int} + \mathscr{L}_{Dir}$. Snadno ověříme, že transformace $U(1)_{loc}$ nemá vliv ani na tenzor elektromagnetického pole a tím na polní část lagranžiánu $\mathscr{L}_{field}$. Tok pravděpodobnosti (2.270) transformace také neovlivní. Celá teorie je tak kovariantní vzhledem k $U(1)_{loc}$ transformaci. O kvantové teorii elektromagnetického pole se proto většinou hovoří jako o $U(1)_{loc}$ teorii. Symetrie $U(1)_{loc}$ zajišťuje provázanost nabité částice (elektronu) a elektromagnetického pole.

Pokud budeme aplikovat Kleinovu-Gordonovu, resp. Diracovu rovnici na soustavu částic, zjistíme, že statistické chování více částic je u každé z rovnic odlišné. Kleinova-Gordonova rovnice je vhodnou rovnicí pro částice se spinem 0, které nesplňují Pauliho vylučovací princip. Diracova rovnice je naopak vhodná pro částice se spinem ½, které Pauliho vylučovací princip splňují. Chováním soustavy stejných částic v kvantové teorii se budeme zabývat v následující kapitole.



2.8 Soustava stejných částic

Stejnými částicemi nazýváme dvě částice se shodnými parametry (hmotou, nábojem, spinem,…). Z hlediska teoretické mechaniky je trajektorie těchto částic dána Hamiltonovými rovnicemi a známe-li počáteční polohy a rychlosti částic, lze přesně predikovat budoucí polohy částic a v každém okamžiku říci, která částice je která.

V kvantové teorii můžeme předpovědět jen pravděpodobnost výskytu částice v nějakém místě a čase. Tato pravděpodobnost má maximum v místě klasické trajektorie, se vzdáleností od ní zpravidla exponenciálně ubývá a dosti daleko od klasické trajektorie je sice velmi malá, nikoli však nulová. Máme-li dvě stejné částice, nikdy si nemůžeme být jisti, která částice je která. Pravděpodobnost výskytu jedné částice v místě druhé je nenulová. Hovoříme o tom, že stejné částice jsou v kvantové teorii *nerozlišitelné*. Hamiltonův operátor se při záměně dvou stejných částic nezmění:

$$\hat{\mathbf{H}}_{12} = \hat{\mathbf{H}}_{21} . \tag{2.301}$$

2.8.1 Operátor výměny dvou částic

Pro jednoduchost budeme uvažovat jen dvě částice, u kterých sledujeme dynamickou proměnnou A (nejlépe celou úplnou množinu pozorovatelných). Stav, ve kterém má první částice hodnotu a_1 a druhá částice hodnotu a_2 označíme

$$|\psi> = |a_1, a_2> .$$

Opačnou situaci, kdy první částice má hodnotu a_2 a druhá a_1, označíme

$$|\varphi> = |a_2, a_1> .$$

Díky nerozlišitelnosti identických částic v kvantové mechanice musí být oba stavy závislé (vyjadřují ve skutečnosti jeden a tentýž kvantový stav), proto

$$|a_2, a_1> = \beta\,|a_1, a_2> . \tag{2.302}$$

Zaveďme nyní operátor vzájemné výměny částic vztahem

► $$\hat{\mathbf{P}}_{12}\,|a_2, a_1> \equiv |a_1, a_2> \tag{2.303}$$

a prozkoumejme jeho vlastnosti:

$$\begin{aligned} &(1)\quad \hat{\mathbf{P}}^2 = \hat{\mathbf{1}}, \\ &(2)\quad \lambda_{1,2} = \pm 1, \\ &(3)\quad \left[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{H}}\right] = 0 . \end{aligned} \tag{2.304}$$

Důkaz (1): Dvojnásobná záměna částic vede na původní konfiguraci.

Důkaz (2): Vlastními vektory jsou vektory $|\psi>$ a $|\varphi>$ definované výše:

$$\hat{\mathbf{P}}_{12}\,|a_1, a_2> \equiv |a_2, a_1> = \beta\,|a_1, a_2> . \tag{2.305}$$

Číslo β je vlastním číslem operátoru výměny. Proveďme nyní dvojnásobnou výměnu jednak pomocí prvního vztahu (2.304) a jednak podle (2.305):

$$P^2 \mid a_1 , a_2 > = \begin{cases} \mid a_1 , a_2 > \\ \beta^2 \mid a_1 , a_2 > \end{cases} \qquad \Rightarrow \qquad \beta^2 = 1 \qquad \Rightarrow \qquad \beta = \pm 1 .$$

Hodnota vlastních čísel operátoru výměny je zřejmá již z prvního vztahu (2.304). Jde o unitární a hermitovský operátor. Vlastní čísla musí ležet na jednotkové kružnici v komplexní rovině a současně být reálná. Jediné takové hodnoty jsou ± 1.

Důkaz (3): V důkazu využijeme časovou Schrödingerovu rovnici (2.182):

$$\hat{\mathbf{H}}_{12} \hat{\mathbf{P}}_{12} \mid a_1, a_2 > = \hat{\mathbf{H}}_{12} \mid a_2, a_1 > = \hat{\mathbf{H}}_{21} \mid a_2, a_1 > =$$

$$= \mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d} \mid a_2, a_1 >}{\mathrm{d}t} = \mathrm{i}\hbar \, \hat{\mathbf{P}}_{12} \frac{\mathrm{d} \mid a_1, a_2 >}{\mathrm{d}t} =$$

$$= \hat{\mathbf{P}}_{12} \, \mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d} \mid a_1, a_2 >}{\mathrm{d}t} = \hat{\mathbf{P}}_{12} \hat{\mathbf{H}}_{12} \mid a_1, a_2 > .$$

2.8.2 Bosony a fermiony, Pauliho princip

Z předchozího rozboru je zřejmé, že

$$\mid a_2, a_1 > = \hat{\mathbf{P}} \mid a_1, a_2 > = \pm \mid a_1, a_2 > . \tag{2.306}$$

Vlnová funkce dvou částic může být jen symetrická nebo antisymetrická. Neexistuje nic mezi tím. Částice mohou být vzhledem k záměně argumentů jen dvojího druhu: se symetrickými vlnovými funkcemi (*bosony*), nebo s antisymetrickými vlnovými funkcemi (*fermiony*). Tuto vlastnost nelze změnit ani časovým vývojem, protože operátor výměny částic podle třetího vztahu (2.304) komutuje s Hamiltonovým operátorem a jeho časový vývoj je proto nulový. Vznikne-li částice jako fermion či boson, zůstává takovou až do svého zániku.

Bosony

Bosony mají symetrickou vlnovou funkci

► $$\mid a_2, a_1 > = \mid a_1, a_2 > . \tag{2.307}$$

Budou li oba stavy stejné, tj. $a_1 = a_2 = a$, získáme relaci $|a, a> = |a, a>$, která je vždy splněna, a proto může existovat více bosonů ve stejném kvantovém stavu. Při nízkých teplotách mají bosony dokonce snahu kumulovat se v nejnižším možném energetickém stavu a vytvářet tzv. bosonový kondenzát. Ten je známý zejména v supratekutosti a supravodivosti. Statistika, které podléhá soustava bosonů, se nazývá Boseho-Einsteinova statistika a zabýváme se jí v kapitole Statistická fyzika. Z dalšího vývoje kvantové mechaniky se ukázalo, že bosony jsou vždy částice s celočíselným spinem (0, 1, 2,…) a pro tyto částice lze zavést kreační operátory splňující jednoduché komutační relace (viz následující kapitola). Nejtypičtějšími představiteli této rodiny jsou skalární ($s = 0$) a vektorové ($s = 1$) mezony, dále všechny intermediální částice (foton, $W^{\pm}$, Z^0 a gluony se spinem 0 a graviton se spinem 2).

Fermiony

Fermiony mají antisymetrickou vlnovou funkci

► $$|a_2, a_1> = -|a_1, a_2> . \tag{2.308}$$

Budou li oba stavy stejné, tj. $a_1 = a_2 = a$, získáme relaci $|a, a> = -|a, a>$, která není nikdy splněna, a proto nemůže existovat více fermionů ve stejném kvantovém stavu. Tomuto faktu se říká *Pauliho vylučovací princip*. Při nízkých teplotách obsazují fermiony postupně jednotlivé energetické hladiny, například v atomárním obalu může být na každé hladině jen tolik elektronů, kolik kvantových stavů tato hladina představuje (to je dáno stupněm degenerace). V atomárním obalu tedy nemohou existovat dva elektrony se stejnými kvantovými čísly n, l, m, m_s. Statistika, které podléhá soustava fermionů, se nazývá Fermiho-Diracova statistika a budeme se jí zabývat v kapitole Statistická fyzika. Fermiony jsou vždy částice s poločíselným spinem (1/2, 3/2,…) a pro tyto částice lze zavést kreační operátory splňující jednoduché antikomutační relace (viz následující kapitola). Nejtypičtějšími představiteli této rodiny částic jsou leptony (elektron, mion, tauon a neutrina se spinem 1/2), kvarky (d, u, s, c, b, t se spinem 1/2) a částice složené ze tří kvarků, neboli baryony (neutron, proton, Λ hyperon se spinem 1/2 a například Δ baryony se spinem 3/2).

	BOSONY	FERMIONY
spin	celočíselný	poločíselný
vlnová funkce	symetrická	antisymetrická
statistika	Boseho-Einsteinova	Fermiho-Diracova
Pauliho princip	nesplňují	splňují
kreační operátory	splňují komutační relace	splňují antikomutační relace

2.8.3 Druhé kvantování

Představme si, že máme N stejných částic, které obsazují stavy nějaké dynamické proměnné. N_1 částic je v prvním stavu (hodnota a_1), N_2 částic je ve druhém stavu (hodnota a_2), atd. Čísla N_k nazýváme obsazovací čísla stavu k. Součet všech obsazovacích čísel je roven počtu částic:

$$\sum_k N_k = N \ . \tag{2.309}$$

Pro bosony je $N_k = 0, 1, 2, 3, \ldots$ Pro fermiony je situace jednodušší. V daném stavu může být nejvýše jeden fermion, tj. $N_k = 0, 1$. Příslušný stav soustavy N stejných částic s danými obsazovacími čísly označíme

$$|\psi> = |N_1, N_2, \ldots, N_k, \ldots> . \tag{2.310}$$

Tomuto zápisu říkáme *reprezentace obsazovacích čísel* a příslušné stavy nazýváme *Fockovy stavy*. Dále se situace bude lišit pro bosony a pro fermiony.

Bosony

Zaveďme podobně jako u harmonického oscilátoru *kreační a anihilační operátory* do stavu k definičními vztahy (normovací konstanty ponecháme stejné jako u harmonického oscilátoru):

$$\begin{aligned} \hat{a}_k^\dagger \mid N_1, N_2, \ldots, N_k, \ldots > &\equiv \sqrt{N_k + 1} \mid N_1, N_2, \ldots, N_k + 1, \ldots > , \\ \hat{a}_k \mid N_1, N_2, \ldots, N_k, \ldots > &\equiv \sqrt{N_k} \mid N_1, N_2, \ldots, N_k - 1, \ldots > . \end{aligned} \tag{2.311}$$

Přímo z těchto definičních relací (pouhým zapůsobením na stavový vektor (2.310) snadno spočteme komutační relace kreačních a anihilačních operátorů:

$$\begin{aligned} [\hat{a}_k , \hat{a}_l] &= 0 , \\ [\hat{a}_k^\dagger , \hat{a}_l^\dagger] &= 0 , \\ [\hat{a}_k , \hat{a}_l^\dagger] &= \delta_{k\,l} . \end{aligned} \tag{2.312}$$

Zaveďme další operátor

$$\hat{N}_k \equiv \hat{a}_k^\dagger \, \hat{a}_k . \tag{2.313}$$

Operátor se nazývá (analogicky jako u harmonického oscilátoru) *operátor počtu částic* ve stavu k, protože zapůsobením na stavový vektor získáme počet částic ve stavu k:

$$\hat{a}_k^\dagger \, \hat{a}_k \mid N_1, N_2, \ldots, N_k, \ldots > = \sqrt{N_k} \;\; \hat{a}_k^\dagger \mid N_1, N_2, \ldots, N_k - 1, \ldots > =$$

$$\sqrt{N_k} \, \sqrt{N_k} \mid N_1, N_2, \ldots, N_k \;, \ldots > = N_k \mid N_1, N_2, \ldots, N_k \;, \ldots > .$$

Operátor celkového počtu částic potom je

$$\hat{N} \equiv \sum_k \hat{a}_k^\dagger \, \hat{a}_k \; . \tag{2.314}$$

Je-li úplná množina pozorovatelných spojitá, můžeme celý postup zopakovat pro spojité proměnné. Například v x reprezentaci lze zavést

$\hat{\psi}^\dagger(x)$	kreační operátor do polohy x,
$\hat{\psi}\,(x)$	anihilační operátor z polohy x.

Komutační relace budou obdobné, jen místo Kroneckerova symbolu vystupuje na pravé straně Diracova δ distribuce:

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}(x), \hat{\psi}(y)] &= 0 , \\ [\hat{\psi}^\dagger(x), \hat{\psi}^\dagger(y)] &= 0 , \\ [\hat{\psi}(x), \hat{\psi}^\dagger(y)] &= \delta(x - y) . \end{aligned} \tag{2.315}$$

Operátor hustoty počtu částic se zavádí vztahem

$$\hat{\mathcal{N}}_k \equiv \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}(x) , \tag{2.316}$$

operátor počtu částic vyskytujících se v intervalu $<a, b>$ je

$$\hat{N}(a,b) \equiv \int_a^b \hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x)\,\mathrm{d}x \tag{2.317}$$

a operátor celkového počtu částic je

$$\hat{N} \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x)\,\mathrm{d}x\,. \tag{2.318}$$

Obdobně by se postupovalo ve třech dimenzích. Celý přechod od fyziky jedné částice k fyzice mnoha stejných částic lze formálně provést nahrazením vlnové funkce kreačními a anihilačními operátory a nahrazením hustoty pravděpodobnosti operátorem hustoty počtu částic:

$$\begin{aligned} \psi(x) \quad &\rightarrow \quad \hat{\psi}(x)\,; \\ w(x) \equiv \psi^*(x)\,\psi(x) \quad &\rightarrow \quad \hat{\mathcal{N}}(x) \equiv \hat{\psi}^\dagger(x)\,\hat{\psi}(x)\,. \end{aligned} \tag{2.319}$$

Tomuto postupu se říká *druhé kvantování*, vlnové funkce popisující systém se stávají operátory a kvantová teorie přechází v *kvantovou teorii pole*, ve které jsou právě veličiny popisující klasická spojitá pole nahrazovány operátory. Druhý řádek přiřazení (2.319) má ještě jeden důležitý význam: u soustavy stejných částic vyjadřujeme pravděpodobnost děje operátorem hustoty počtu částic, tak jak to bývá u skutečných systémů (například svazku stejných částic v experimentu). U jedné částice můžeme hovořit o hustotě pravděpodobnosti jejího výskytu $\psi^*(x)\psi(x)$. Celková pravděpodobnost je rovna jedné, tak, jak to odpovídá normování stavového vektoru.

Fermiony

U fermionů probíhá druhé kvantování obdobně. Opět zavádíme kreační a anihilační operátory $\hat{b}_k^\dagger$, $\hat{b}_l$ do stavů k a l. Vzhledem k antisymetrii vlnových funkcí musí tyto operátory splňovat antikomutační relace:

$$|k,l> = -|l,k> \quad \Rightarrow$$

$$|k,l> + |l,k> = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_l^\dagger + \hat{b}_l^\dagger \hat{b}_k^\dagger = 0\,.$$

Antikomutátory značíme složenými závorkami a relace (2.312) platná pro bosony, získá pro fermiony tvar:

$$\begin{aligned} \{\hat{b}_k\,,\,\hat{b}_l\} &= 0\,, \\ \{\hat{b}_k^\dagger\,,\,\hat{b}_l^\dagger\} &= 0\,, \\ \{\hat{b}_k\,,\,\hat{b}_l^\dagger\} &= \delta_{k\,l}\,. \end{aligned} \tag{2.320}$$

►

Definice spojitých operátorů i operátoru hustoty počtu částic zůstávají shodné. U fermionů jsou všude nahrazeny relace komutační relacemi antikomutačními. V mnoha situacích se chování fermionů a bosonů liší pouze znaménkem (symetrie vlnové funkce; komutační a antikomutační relace; Boseho-Einsteinova a Fermiho-Diracova statistika).

2.8.4 Ukázka druhého kvantování pro Kleinovo-Gordonovo pole

Uvažujme nejjednodušší variantu reálného Kleinova-Gordonova pole pro volnou částici s Lagrangeovou funkcí

$$\mathscr{L} = \frac{1}{2}\left(\partial_\alpha \varphi\right)\left(\partial^\alpha \varphi\right) + \frac{1}{2}\kappa^2 \varphi^2 \tag{2.321}$$

a polní rovnicí

$$\left(\Box - \kappa^2\right)\varphi = 0\,. \tag{2.322}$$

Přejdeme-li k soustavě identických částic, změní se pole na operátor

$$\varphi \;\rightarrow\; \hat{\varphi} \tag{2.323}$$

s vlastnostmi

$$\begin{gathered}\left[\hat{\varphi}(x),\ \hat{\varphi}(y)\right] = \left[\hat{\varphi}^\dagger(x), \hat{\varphi}^\dagger(y)\right] = 0\,; \\ \left[\hat{\varphi}(x), \hat{\varphi}^\dagger(y)\right] = \delta(x-y)\,.\end{gathered} \tag{2.324}$$

Veličiny x a y reprezentují celou událost (čas a prostor). Rozviňme nyní polní operátor do rovinných vln (zvlášť označíme kladně frekvenční a zvlášť záporně frekvenční část):

$$\hat{\varphi}(x) = \int C(\mathbf{k})\left[\hat{a}^\dagger(\mathbf{k})\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\omega t)} + \hat{a}(\mathbf{k})\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\omega t)}\right]\mathrm{d}^3\mathbf{k}\,. \tag{2.325}$$

V uvedeném vztahu je časová část čtyřvektoru k^μ provázána s prostorovou částí přes disperzní relaci $\omega = \omega(\mathbf{k})$, takže integrace ve skutečnosti probíhá přes všechny čtyři složky. Konstanta $C(\mathbf{k})$ je normovací konstanta, která zajišťuje, aby koeficienty rozvoje (operátory $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$) splňovaly relace kreačních a anihilačních operátorů. Dosadíme-li rozvoj polního operátoru (2.325) do komutačních relací (2.324), získáme ihned (správná volba C zajistí koeficient 1 u delta funkce v druhé relaci)

$$\begin{gathered}\left[\hat{a}(\mathbf{k}),\ \hat{a}(\mathbf{k}')\right] = \left[\hat{a}^\dagger(\mathbf{k}),\ \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}')\right] = 0\,; \\ \left[\hat{a}(\mathbf{k}), \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}')\right] = \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\,.\end{gathered} \tag{2.326}$$

Dosadíme-li rozvoj polního operátoru (2.325) do definice Hamiltonovy funkce (1.227) a hybnosti (1.226), máme po elementárních úpravách

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2}\int E(\mathbf{k})\left(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}\right)\mathrm{d}^3\mathbf{k}\,; \\ \hat{\mathbf{P}} &= \frac{1}{2}\int \mathbf{p}(\mathbf{k})\left(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}\right)\mathrm{d}^3\mathbf{k}\,,\end{aligned} \tag{2.327}$$

kde jsme označili

$$\begin{gathered}\mathbf{p}(\mathbf{k}) = \hbar\mathbf{k}\,; \\ E(k) = \hbar\omega(k) = \hbar\sqrt{c^2k^2 + c^2\kappa^2} = \sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4}\,.\end{gathered} \tag{2.328}$$

Vztah $\omega(k)$ je dán disperzní relací (2.233). S využitím komutačních relací (2.326) získáme přímo dosazením relace

$$\begin{aligned}\left[\hat{H}, \hat{a}(\mathbf{k})\right] &= -E(k)\hat{a}(\mathbf{k}) ;\\ \left[\hat{H}, \hat{a}^{\dagger}(\mathbf{k})\right] &= +E(k)\hat{a}^{\dagger}(\mathbf{k}) ;\\ \left[\hat{\mathbf{P}}, \hat{a}(\mathbf{k})\right] &= -\mathbf{p}(\mathbf{k})\hat{a}(\mathbf{k}) ;\\ \left[\hat{\mathbf{P}}, \hat{a}^{\dagger}(\mathbf{k})\right] &= +\mathbf{p}(\mathbf{k})\hat{a}^{\dagger}(\mathbf{k}) .\end{aligned} \tag{2.329}$$

Z těchto relací je zjevný význam operátorů $\hat{a}$, $\hat{a}^{\dagger}$: pole φ je kvantováno a operátor $\hat{a}^{\dagger}$ kreuje kvantum pole s energií $E(k)$ a hybností $\mathbf{p}(\mathbf{k})$, operátor $\hat{a}$ stejné kvantum anihiluje. Toto kvantum můžeme interpretovat jako boson s nulovým spinem (pole má jedinou vlnovou funkci odpovídající jediné projekci spinu). Kleinova-Gordonova rovnice získává po druhém kvantování názornou interpretaci. Jde o pole, které můžeme chápat jako soustavu excitací – bosonů s nulovým spinem.

Komplexní pole

Pokud by Kleinovo–Gordonovo pole bylo komplexní, tj.

$$\hat{\varphi} = \hat{\varphi}_1 + \mathrm{i}\,\hat{\varphi}_2 ; \qquad \hat{\varphi}^{\dagger} = \hat{\varphi}_1 - \mathrm{i}\,\hat{\varphi}_2 ,$$

lze ukázat, že excitace takového pole odpovídají dvěma druhům skalárních bosonů (se spinem 0), které jsou sobě navzájem antičásticemi.

Normální uspořádání operátorů

Ve vztazích pro energii a hybnost (2.327) se skrývá jeden problém. Pokud bychom hledali střední hodnotu energie a hybnosti ve vakuovém stavu, dostaneme nekonečné hodnoty. Za to může první člen, ve kterém je kreační operátor napravo a na vakuový stav dá nenulovou hodnotu:

$$\langle 0|\hat{H}|0\rangle = \frac{1}{2}\int E(\mathbf{k})\left\{\langle 0|\hat{a}\hat{a}^{\dagger}|0\rangle + \langle 0|\hat{a}^{\dagger}\hat{a}|0\rangle\right\}\mathrm{d}^3\mathbf{k} =$$

$$= \frac{1}{2}\int E(\mathbf{k})\langle 0|\hat{a}\hat{a}^{\dagger}|0\rangle\mathrm{d}^3\mathbf{k} \sim \int E(\mathbf{k})\langle 0|0\rangle d^3\mathbf{k} \sim \int E(\mathbf{k})\,\mathrm{d}^3\mathbf{k} \;\to\; \infty .$$

Tento problém je důsledkem principu korespondence, který neřeší správné pořadí operátorů, které jsou v součinu. Máme-li dvě dynamické proměnné A a B, můžeme součinu AB v kvantové teorii přiřadit dvě možná pořadí operátorů:

$$AB \quad \to \quad \begin{cases}\hat{A}\hat{B} ,\\ \hat{B}\hat{A} .\end{cases} \tag{2.330}$$

Jen jedno pořadí bude ovšem odpovídat dějům v přírodě. Toto pořadí není dáno principem korespondence, ale musíme ho vybrat tak, aby výsledky byly v souladu s pozorováním. Správné pořadí operátorů se nazývá *normální uspořádání* a označujeme ho dvojtečkou, tedy

► $$:\hat{A}\hat{B}:$$

Tento zápis znamená, že pořadí operátorů mezi dvojtečkami není určeno jednoznačně a musíme ho volit ve shodě s experimentem. Použít lze například následující postup:

1. Operátory vyjádříme za pomoci příslušných kreačních a anihilačních operátorů (bosonové splňují komutační relace a fermionové antikomutační relace).
2. V součinech budeme anihilační operátory přesouvat doprava podle následujících pravidel:
   - pokud vedle sebe jsou dva bosonové operátory, přesuneme anihilační operátor doprava,
   - pokud vedle sebe je jeden bosonový a jeden fermionový operátor, přesuneme anihilační operátor doprava,
   - pokud vedle sebe jsou dva fermionové operátory, přesuneme anihilační operátor doprava a *zaměníme znaménko* daného členu.

Příklad 47:

Nalezněte správné pořadí operátorů v hamiltoniánu Kleinova-Gordonova pole:

$$\hat{H} = :\frac{1}{2}\int E(\mathbf{k})\left(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}\right)\mathrm{d}^3\mathbf{k}: = \frac{1}{2}\int E(\mathbf{k}):\left(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}\right):\mathrm{d}^3\mathbf{k} =$$
$$= \frac{1}{2}\int E(\mathbf{k})\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}\right)\mathrm{d}^3\mathbf{k} = \int E(\mathbf{k})\,\hat{a}^\dagger\hat{a}\,\mathrm{d}^3\mathbf{k} =$$
$$= \int E(\mathbf{k})\,\hat{\mathcal{N}}(\mathbf{k})\,\mathrm{d}^3\mathbf{k}.$$

Střední hodnota hamiltoniánu ve vakuovém stavu již nediverguje, navíc je struktura Hamiltonova operátoru zcela zřejmá, $\hat{\mathcal{N}}(\mathbf{k})$ je operátor hustoty počtu částic s vlnovým vektorem **k**. Obdobně upravíme i vztah (2.327) pro hybnost. Správné relace tedy jsou:

$$\hat{H} = \int E(\mathbf{k})\,\hat{a}^\dagger\hat{a}\,\mathrm{d}^3\mathbf{k}\,;$$
$$\hat{\mathbf{P}} = \int \mathbf{p}(\mathbf{k})\,\hat{a}^\dagger\hat{a}\,\mathrm{d}^3\mathbf{k}\,. \tag{2.331}$$

Příklad 48:

Určete správné pořadí operátorů ve výrazu (*a* jsou bosonové operátory, *b* fermionové)

$$\hat{A} = :\frac{1}{2}\left(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{b}\hat{b}^\dagger + \hat{b}^\dagger\hat{b} + \hat{a}\hat{b}^\dagger - \hat{b}^\dagger\hat{a}\right):$$

Aplikací výše uvedených pravidel získáme snadno výsledek

$$\hat{A} = \frac{1}{2}\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{b}^\dagger\hat{b} + \hat{b}^\dagger\hat{b} + \hat{b}^\dagger\hat{a} - \hat{b}^\dagger\hat{a}\right) = \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{b}^\dagger\hat{b} = \hat{N}_a + \hat{N}_b\,.$$

2.9 Kvantová teorie a skryté parametry

Kvantová teorie s sebou přináší řadu nezvyklých a na první pohled nepochopitelných jevů. Člověk se intuitivně brání tomu, co si nedokáže představit, proto má kvantová teorie řadu odpůrců, kterým vadí především pravděpodobnostní výsledek měření, superpozice stavů a nelokálnost kvantové teorie. Už v dobách vzniku kvantové mechaniky se rozeběhla diskuze mezi dvěma skupinami. Vůdčí osobnostní první skupiny byl Niels Bohr, který zastával názor, že kvantová teorie je taková, jaká je. Musíme se smířit s tím, že ne všechny matematické objekty používané k popisu reality jsou představitelné a že součástí měření je i měřicí přístroj, který ze superpozice stavů vybere jeden jediný stav. Vlnová funkce, která byla před měřením superpozicí více stavů, popisuje po aktu měření jeden jediný stav. Této změně říkáme *kolaps vlnové funkce*. Další měření poskytnou už stále stejnou hodnotu (tedy pokud jsme objekt měřením zcela nezničili). Kolaps vlnové funkce je nelineárním jevem (lineární superpozice stavů byla měřením zjevně narušena) a tato nelinearita nějak souvisí se samotným aktem měření. Princip superpozice stavů nutně vede k nelokálnosti kvantové teorie, například v dvouštěrbinovém experimentu prochází elektron současně první i druhou štěrbinou, v Machově-Zehnderově interferometru se foton vyskytuje současně v obou jeho ramenech. Není lokalizovanou částicí, nicméně při aktu měření jde o nedělitelný objekt a měřicí přístroj ho zaznamená vždy jen na jednom jediném místě.

Druhou skupinu asi nejvíce reprezentoval Albert Einstein, který se s výše zmíněnými vlastnostmi kvantové teorie nesmířil a předpokládal, že kvantová teorie není úplná. Náhodnost výsledku při měření by mohla souviset s tím, že systém má nějaké další, tzv. *skryté parametry*, díky jejichž neznalosti dochází k zdánlivě náhodnému výsledku aktu měření. Jak uvidíme dále, existence skrytých parametrů by mohla vysvětlit i nelokální chování kvantové teorie.

Mezi oběma směry nakonec rozhodly experimenty, které v 80. letech dvacátého století jednoznačně vyvrátily teorii skrytých parametrů a ukázaly, že kvantovou teorii musíme přijmout i s jejími „podivnostmi“.

2.9.1 Akt měření a dekoherence

V kapitole 2.6.4 věnované dvouštěrbinovému experimentu jsme se zmínili o tom, že měření prováděná za účelem rozhodnout, kterou štěrbinou částice letěla, vždy naruší interferenční obrazec. Jde o zcela základní vlastnost kvantové teorie, měření není třeba ani provádět – postačí principiální možnost takového měření a interferenční obrazec vymizí. Pojďme si tuto vlastnost demonstrovat na Machově-Zehnderově interferometru. Je jasné, že pokud do jednoho z ramen dáme detekční přístroj, konstruktivní a destruktivní interference zodpovědná za to, že všechny fotony dopadají pouze do detektoru D1, vymizí.

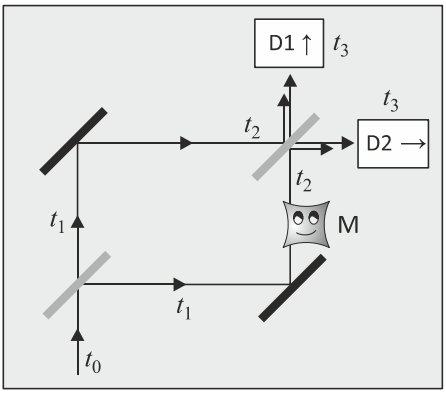
Představme si, že v jednom z ramen není celý detekční přístroj, ale pouze mikroskopický objekt M (například atom), jenž sice s fotonem interaguje, ale nezničí ho, a foton pokračuje dále v letu. Taková nedemoliční měření lze skutečně provést. Serge Haroche z francouzského ENS (*École Normale Supérieure*) za ně dostal Nobelovu cenu

za fyziku pro rok 2012 [34]. Z pohledu člověka nejde o skutečné měření, neboť se jako pozorovatelé nikdy nedozvíme výsledek interakce fotonu s objektem M.

Při interakci fotonu s objektem M dojde k provázání jejich stavů. Oba podsystémy (foton a objekt M) se stanou jediným systémem, jehož Hilbertův prostor bude direktním součinem $\mathcal{H} = \mathcal{H}_\gamma \otimes \mathcal{H}_M$ Hilbertových prostorů obou podsystémů (jde o obdobu rozkladu dvourozměrného prostoru reálných dvojic na dvě kartézské osy). Stav obou objektů budeme v Diracově symbolice zapisovat jako

$$|\psi\rangle = |\gamma\rangle|\mathrm{M}\rangle, \tag{2.332}$$

kde první část popisuje foton γ a druhá mikroskopický objekt M. Hovoříme o *provázání* (*propletení) stavů*, anglicky *entanglement*.



Obr. 90: Machův-Zehnderův interferometr s kvantovým objektem M v jednom z ramen. Základní varianta experimentu je na obrázku 84 na straně 190.

Předpokládejme, že dokud objekt M s fotonem neinteraguje, je popsán stavem $|M_0> = |0>$ a po interakci se jeho stav změní na hodnotu $|M_1> = |1>$. Nyní budeme postupovat stejně jako při popisu stavů fotonu v jednotlivých časech v kapitole 2.6.4 na straně 190:

$$\begin{aligned}
|\psi(t_0)\rangle &= |\uparrow\rangle|\,0\,\rangle;\\
|\psi(t_1)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle|\,0\,\rangle + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}|\rightarrow\rangle|\,0\,\rangle;\\
|\psi(t_2)\rangle &= \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}|\rightarrow\rangle|\,0\,\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle|\,1\,\rangle;\\
|\psi(t_3)\rangle &= \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}|\rightarrow\rangle + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle\right]|\,0\,\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}|\rightarrow\rangle\right]|\,1\,\rangle.
\end{aligned} \tag{2.333}$$

Výsledný stav tedy bude

$$|\psi(t_3)\rangle = \frac{\mathrm{i}}{2}|\rightarrow\rangle|\,0\,\rangle - \frac{\mathrm{i}}{2}|\rightarrow\rangle|\,1\,\rangle - \frac{1}{2}|\uparrow\rangle|\,0\,\rangle - \frac{1}{2}|\uparrow\rangle|\,1\,\rangle. \tag{2.334}$$

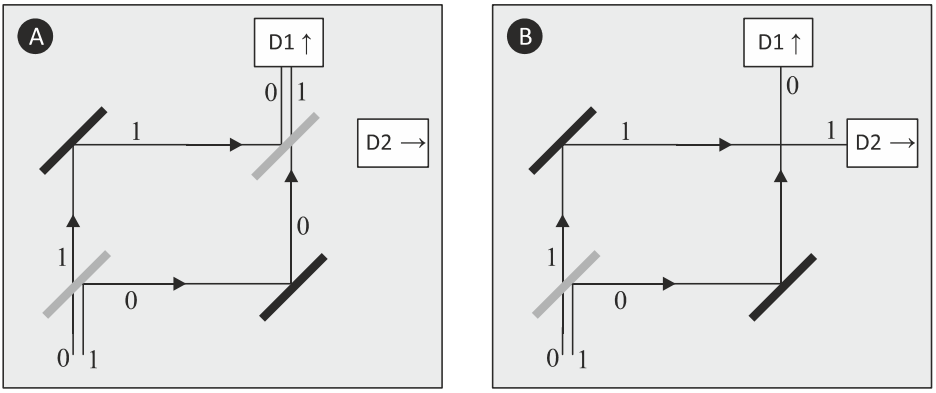
Z uvedeného výrazu je zřejmé, že se koeficienty u vodorovně se pohybujícího fotonu $|\rightarrow>$ nevyruší a fotony budou dopadat do obou detektorů. Došlo k tzv. *dekoherenci*, tj. vymizení interferenčního jevu díky přítomnosti objektu M v interferometru. Jakákoli možnost interakce popisovaného objektu s okolním prostředím vede k provázání stavů s okolím a ke kvantové dekoherenci.

2.9.2 Skryté parametry

Část fyziků kritizovala nelokálnost kvantové teorie a náhodnost výsledků. Po určitou dobu se zdálo, že by problémy bylo možné vyřešit zavedením tzv. skrytých parametrů, jejichž hodnoty neznáme, a proto dostáváme při měření zdánlivě náhodné výsledky. Ukažme si tuto konstrukci na Machově-Zehnderově interferometru. Předpokládejme, že fotony putující oběma rameny mají nějakou další neznámou vlastnost, která popisuje jejich chování při interakci se zrcadly. Popišme tuto vlastnost parametrem p, který zavedeme tak, aby platilo:

1. parametr p může nabývat pouze dvou hodnot 0 a 1;
2. při interakci s normálním zrcadlem se hodnota p nezmění;
3. při interakci s polopropustným zrcadlem (odrazu i průchodu) se hodnota p změní;
4. foton s $p = 0$ polopropustným zrcadlem prochází, foton s $p = 1$ se odrazí.

Takto zavedený parametr p snadno vysvětlí veškeré chování fotonů v Machově-Zehnderově interferometru, jak je patrné z následujícího obrázku. Nalevo je situace se dvěma polopropustnými zrcadly (interferometrické uspořádání), napravo druhé polopropustné zrcadlo chybí. Do interferometru vchází dva fotony, jeden se skrytým parametrem $p = 0$ a druhý se skrytým parametrem $p = 1$. V interferometrickém uspořádání skončí oba fotony v detektoru D1, v uspořádání s jediným polopropustným zrcadlem dorazí každý z fotonů do jiného detektoru. Pokud do přístroje bude dopadat proud fotonů, jejichž skrytý parametr bude mít zcela náhodnou hodnotu, získáme výsledky shodné s kvantovým popisem, a to aniž bychom použili superpozici stavů a nelokální chování fotonu v interferometru. Tato konstrukce vypadá velmi slibně a nadějně, ale jak ukážeme v kapitole 2.9.4, je představa skrytých parametrů v rozporu s jinými experimenty. Teorie skrytých parametrů byla definitivně vyvrácena v 80. letech 20. století.



Obr. 91: Machův-Zehnderův interferometr se skrytými parametry fotonů.

2.9.3 EPR paradox

Odpor části fyziků k rodící se kvantové teorii vyústil v roce 1935 k formulaci myšlenkového experimentu [31], který měl demonstrovat neúplnost kvantové teorie a ukázat, že kvantová teorie je vnitřně sporná a bude muset být nahrazena lepší teorií mikrosvěta. U zrodu tohoto myšlenkového experimentu stáli Albert Einstein (1879–1955), rusko-americký fyzik Boris Podolsky (1896–1966) a americko-izraelský fyzik Nathan Rosen (1909–1995). Podle počátečních jmen autorů se hovoří o tzv. *EPR paradoxu*.

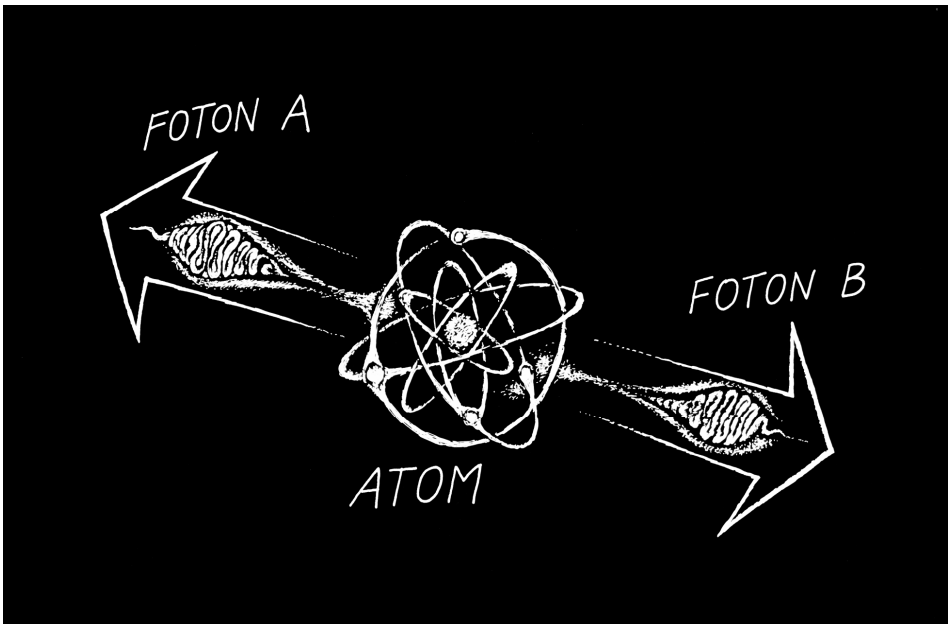
Dnes se nejčastěji používá formulace Davida Bohma, která pochází z roku 1951 [18], [19], [30]. Představme si částici s celkovým momentem hybnosti 0, která se rozpadne na dvě od sebe letící částice A a B, z nichž každá má spin ½. Orbitální moment obou částic je nulový (letí od sebe), a proto zákon zachování celkového momentu hybnosti vede na podmínku, že pokud naměříme u jedné z částic projekci spinu do libovolné osy ½, musí mít druhá částice projekci do téže osy −½ a naopak. Obě částice jsou popsány provázaným stavem

$$|\psi\rangle = \alpha\,|{+½}\rangle_{\mathrm{A}}\,|{-½}\rangle_{\mathrm{B}} + \beta\,|{-½}\rangle_{\mathrm{A}}\,|{+½}\rangle_{\mathrm{B}}\,, \tag{2.335}$$

který zohledňuje obě dvě možnosti: buď má částice A spin ½ a částice B má spin –½, nebo platí opačná varianta.

Zdánlivý paradox vznikne tím, že provedením měření projekce spinu na jedné částici se okamžitě dozvíme projekci spinu u druhé částice, ať je jakkoli daleko. Na první pohled to vypadá, jakoby se informace šířila okamžitě, což odporuje principu kauzality (příčinnosti) ze speciální relativity. Na vině je opět tolik diskutované nelokální chování částic. Při měření na jedné částici zkolabuje vlnová funkce v celém prostoru, a to se projeví při následujícím měření na druhé částici. Odpůrci kvantové teorie tvrdí, že obě částice mají nějaký skrytý parametr, který už dopředu, tedy při vzniku obou částic, rozhodl, jak dopadne měření projekce spinu kdykoli v budoucnosti. Zastánci kodaňské interpretace naopak tvrdí, že měření u libovolné z částic může dopadnout libovolným způsobem a teprve v okamžiku měření dojde k jedné ze dvou možných voleb. Přitom vlnová funkce zkolabuje v celém prostoru a následné měření u zbývající částice dá doplňkový výsledek. Ani v tomto případě nejde o porušení kauzality, provedením měření na jedné částici se ke druhé částici nepřenáší žádná hmota ani energie a oba pozorovatelé při kontrole svých výsledků musí tak jako tak použít podsvětelnou komunikaci, která zajistí kauzalitu obou měření. Abychom ukázali, že druhá interpretace je správná, bude výhodné problém přeformulovat za pomoci polarizace dvou fotonů.

Polarizací fotonu nazýváme rovinu kmitů elektrického pole. Ta se obecně může stáčet, nebo být fixní – pak hovoříme o rovinné polarizaci. Fotony, jakožto kvanta příčného elektromagnetického vlnění, mohou mít dvě nezávislé, navzájem kolmé rovinné polarizace. Skutečný stav fotonu je potom lineární kombinací obou polarizačních stavů v dané bázi. Měření polarizace fotonu lze uskutečnit například pomocí hranolu z islandského vápence, který je dvojlomný, a světelný paprsek se v něm proto dělí na řádný a mimořádný. Fotony putující ve směrech řádného a mimořádného paprsku mají navzájem kolmou polarizaci. Jinými slovy: islandský vápenec může fungovat jako registrační přístroj. Zvolme osy souřadnicové soustavy (bázi) tak, že se foton pohybuje ve směru osy z; pokud pokračuje po dráze řádného paprsku, má polarizaci ve směru osy x, pokud se vydá po dráze mimořádného paprsku, má polarizaci ve směru osy y.



Obr. 92: EPR paradox.

Uvažujme nyní zjednodušený experiment: předpokládejme, že atom má celkový moment hybnosti nulový a po jeho excitaci ho opustí dva fotony, jejichž polarizace je korelována, v našem případě budeme dokonce předpokládat, že fotony mají přesně opačnou polarizaci. Pokud na jednom fotonu naměříme v nějaké bázi „vodorovnou" polarizaci (ve směru osy x), bude polarizace druhého fotonu „svislá" (ve směru osy y) a naopak. Je jasné, že jde o stejnou formulaci jako dříve, jen je projekce spinu nahrazena polarizací fotonu (ta ale nakonec stejně závisí na projekci spinu fotonu do směru jeho pohybu). Předpokládejme, že provázaný stav obou fotonů má tvar

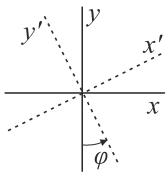
► $$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|x\rangle_{\mathrm{A}}\,|y\rangle_{\mathrm{B}} - \frac{1}{\sqrt{2}}|y\rangle_{\mathrm{A}}\,|x\rangle_{\mathrm{B}}\,. \qquad (2.336)$$

První člen vyjadřuje, že v naší bázi má foton A polarizaci $|\,x>$ a foton B polarizaci $|\,y>$, druhý člen popisuje situaci opačnou. Výsledkem měření tedy mohou být jen dvě možnosti:

1. A má polarizaci $|\,x>$, B má polarizaci $|\,y>$;
2. A má polarizaci $|\,y>$, B má polarizaci $|\,x>$.

Normovací koeficienty superpozice stavů jsou voleny tak, aby obě možnosti měly stejnou pravděpodobnost (ta je kvadrátem koeficientu, tj. 1/2 v obou případech) a aby součet obou pravděpodobností dal 1. Minus u druhého výrazu není pro naše úvahy podstatné, jen vyjadřuje okolnost, že kdybychom do obou argumentů dosadili stejnou polarizaci, dostaneme nulovou vlnovou funkci, tj. takový výsledek měření není možný. Výsledek měření není dopředu dán, je zcela náhodný. Jakmile ale provedeme měření na jednom fotonu, stav zkolabuje do jedné z obou možností a měření na druhém fotonu dá už jen doplňkový výsledek, ať je tento foton fyzicky lokalizován kdekoli. Je to důsled-

kem provázanosti obou stavů. Povšimněte si, že provázaný stav není možné žádným způsobem přepsat jako součin dvou výrazů tak, aby první výraz závisel jen na parametrech fotonu A a druhý jen na parametrech fotonu B. To je pro provázané stavy charakteristické.



Obr. 93: Měření polarizace fotonu v pootočené bázi.

Jak by dopadl výsledek našeho měření, pokud bychom zvolili jinou bázi (pootočenou oproti původní o úhel φ), tedy měřicí hranol islandského vápence by byl jinak orientovaný? Předpokládejme klasickou rotační transformaci, tj.

$$\begin{aligned} |x\rangle &= \cos\varphi\,|x'\rangle - \sin\varphi\,|y'\rangle\,, \\ |y\rangle &= \sin\varphi\,|x'\rangle + \cos\varphi\,|y'\rangle\,, \end{aligned} \tag{2.337}$$

a dosaďme ji do provázaného stavu (2.336):

$$\begin{aligned} |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(\cos\varphi\,|x'\rangle_{\mathrm{A}} - \sin\varphi\,|y'\rangle_{\mathrm{A}}\big)\big(\sin\varphi\,|x'\rangle_{\mathrm{B}} + \cos\varphi\,|y'\rangle_{\mathrm{B}}\big) - \\ - \frac{1}{\sqrt{2}}\big(\sin\varphi\,|x'\rangle_{\mathrm{A}} + \cos\varphi\,|y'\rangle_{\mathrm{A}}\big)\big(\cos\varphi\,|x'\rangle_{\mathrm{B}} - \sin\varphi\,|y'\rangle_{\mathrm{B}}\big)\,. \end{aligned}$$

Po pronásobení všech výrazů dostaneme

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,|x'\rangle_{\mathrm{A}}\,|y'\rangle_{\mathrm{B}} - \frac{1}{\sqrt{2}}\,|y'\rangle_{\mathrm{A}}\,|x'\rangle_{\mathrm{B}}\,. \tag{2.338}$$

Výsledek je nesmírně zajímavý. V čárkované bázi se tvar stavového vektoru vůbec nezměnil – výrazy (2.336) a (2.338) popisující stav v obou bázích jsou shodné. Je tedy jedno, jak budeme mít při měření pootočený měřicí hranol, výsledek měření polarizace bude mít při jakémkoli natočení hranolu padesátiprocentní pravděpodobnost, že naměříme foton A s „vodorovnou“ polarizací a foton B se „svislou“ polarizací, a padesátiprocentní pravděpodobnost, že měření dopadne opačně.

2.9.4 Bellovy nerovnosti

V roce 1964 irský fyzik *John Stewart Bell* (1928–1990) ukázal, že statistické vlastnosti měření polarizace fotonu budou v případě teorie se skrytými parametry jiné než při standardní kvantové interpretaci, o kterou se opíráme v tomto textu. Zaveďme veličinu P, která bude mít hodnotu +1, pokud byla naměřena v dané bázi „vodorovná“ polarizace (ve směru x) a –1, pokud byla naměřena „svislá“ polarizace (ve směru osy y):

$$P = \begin{cases} +1: & \text{„vodorovná“ polarizace,} \\ -1: & \text{„svislá“ polarizace.} \end{cases} \tag{2.339}$$

Předpokládejme, že měření na fotonu A a na fotonu B budou probíhat s různě natočenými hranoly. Jejich orientace vůči laboratorní soustavě bude dána úhly α a β. Pokud bude foton A polarizován ve směru úhlu α, bude výsledek měření polarizace $P_A = +1$, pokud bude polarizován kolmo na tento směr, bude $P_A = -1$. Stejně tak u fotonu B dopadne měření buď tak, že $P_B = +1$ (polarizace je ve směru úhlu β), nebo $P_B = -1$ (polarizace je kolmá na směr daný úhlem β). Situaci ještě zkomplikujme tak, že u každého z fotonů budeme mít k dispozici dva měřicí hranoly. U fotonu A budou hranoly orientované pod úhly α, α', u fotonu B pod úhly β, β'. Vždy provedeme měření oběma hranoly, které máme k dispozici – nejprve jedním, a poté druhým. Předpokládejme nyní, že budeme mnohokrát opakovat měření polarizace obou fotonů oběma hranoly (tedy vždy provedeme čtyři měření). Sestavme si z každé čtveřice měření veličinu

$$\Gamma \equiv P_A(\alpha)P_B(\beta) + P_A(\alpha)P_B(\beta') + P_A(\alpha')P_B(\beta) - P_A(\alpha')P_B(\beta') . \qquad (2.340)$$

Veličina Γ má z matematického hlediska jednu velmi zajímavou vlastnost: jde o funkci čtyř proměnných $P_A(\alpha)$, $P_A(\alpha')$, $P_B(\beta)$, $P_B(\beta')$, které mohou v principu nabývat jen hodnot +1 nebo −1. Funkce Γ je ale zkonstruována tak, aby po dosazení jakékoli kombinaci vstupů (i nefyzikální) vždy vyšla hodnota +2 nebo −2, jiná možnost není. Vyzkoušejte si to.

O měřeních si budeme vést podrobné záznamy a nakonec budeme počítat průměrné hodnoty naměřených veličin. Pokud platí teorie skrytých parametrů, je výsledek měření předem dán hodnotou skrytého parametru a zcela zde chybí prvek náhodnosti. Náhodnost je zdánlivá a není dána kvantovou teorií, ale neznalostí hodnoty skrytého parametru. Při mnoha opakovaných měřeních budeme dostávat jako výsledek výpočtu Γ posloupnost složenou z hodnot +2 a −2, například +2, +2, +2, −2, −2, +2… Střední hodnotu budeme počítat jako aritmetický průměr, což nutně povede na nerovnost

$$-2 \le \langle \Gamma \rangle \le 2 , \qquad (2.341)$$

kterou za pomoci definice Γ přepíšeme do tvaru

► $$-2 \le \langle P_A P_B \rangle + \langle P_A P'_B \rangle + \langle P'_A P_B \rangle - \langle P'_A P'_B \rangle \le 2 . \qquad (2.342)$$

Jde o Bellovu nerovnost, kterou musí splňovat střední hodnoty opakovaných měření, pokud existují skryté parametry a výsledky měření jsou předem dány.

Kvantová teorie dá ale jiný výsledek výpočtu střední hodnoty. Předpokládejme, že na provázaném stavu (2.336)

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|x\rangle_A |y\rangle_B - \frac{1}{\sqrt{2}}|y\rangle_A |x\rangle_B$$

provedeme měření na fotonu A pomocí hranolu, který je orientovaný pod úhlem α a na fotonu B hranolem orientovaným pod úhlem β. Do stavu proto dosadíme příslušné transformace:

$$\begin{aligned}
|x\rangle_A &= \cos\alpha\,|x'\rangle_A - \sin\alpha\,|y'\rangle_A , \\
|y\rangle_A &= \sin\alpha\,|x'\rangle_A + \cos\alpha\,|y'\rangle_A , \\
|x\rangle_B &= \cos\beta\,|x'\rangle_B - \sin\beta\,|y'\rangle_B , \\
|y\rangle_B &= \sin\beta\,|x'\rangle_B + \cos\beta\,|y'\rangle_B ,
\end{aligned} \qquad (2.343)$$

a dostaneme

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} -\sin(\alpha-\beta)\,|x'\rangle_A\,|x'\rangle_B + \cos(\alpha-\beta)\,|x'\rangle_A\,|y'\rangle_B - \\ -\cos(\alpha-\beta)\,|y'\rangle_A\,|x'\rangle_B - \sin(\alpha-\beta\,|y'\rangle_A\,|y'\rangle_B \end{bmatrix}. \qquad (2.344)$$

Pravděpodobnosti jednotlivých výsledků jsou dány druhými mocninami koeficientů, tj.

polarizace fotonu P_A	polarizace fotonu P_B	pravděpodobnost w_{AB}
+	+	½ $\sin^2(\alpha-\beta)$
+	−	½ $\cos^2(\alpha-\beta)$
−	+	½ $\cos^2(\alpha-\beta)$
−	−	½ $\sin^2(\alpha-\beta)$

Symbol „+“ jsme použili pro „vodorovnou“ polarizaci a symbol „−“ pro „svislou“. Možná vás zarazí, že pravděpodobnost nalezení obou fotonů se stejnou polarizací je nenulová. To je ale dáno tím, že měřicí hranoly nejsou stejně orientované a ve skutečnosti jde o projekce do jiných bazí (os). Dosadíte-li $\alpha = \beta$, vyjdou pravděpodobnosti shodné polarizace obou fotonů nulové. Vypočtěme nyní střední hodnotu $<P_A P_B>$. Za pomoci tabulky uděláme vážený průměr všech možných výsledků:

$$\langle P_A P_B \rangle = \sum P_A P_B w_{AB} = w_{++} - w_{+-} - w_{-+} + w_{--} \qquad \Rightarrow$$

$$\langle P_A P_B \rangle = \sin^2(\alpha-\beta) - \cos^2(\alpha-\beta) \qquad \Rightarrow$$

$$\langle P_A P_B \rangle = -\cos(2\alpha - 2\beta)\,. \qquad (2.345)$$

Při kvantovém výpočtu tedy pro střední hodnotu námi zavedené veličiny Γ bude platit

$$\langle \Gamma \rangle = \langle P_A P_B \rangle + \langle P_A P'_B \rangle + \langle P'_A P_B \rangle - \langle P'_A P'_B \rangle \qquad \Rightarrow$$

► $$\langle \Gamma \rangle = -\cos(2\alpha - 2\beta) - \cos(2\alpha - 2\beta') - \cos(2\alpha' - 2\beta) + \cos(2\alpha' - 2\beta')\,. \qquad (2.346)$$

Pro různé situace tento výsledek zjevně porušuje Bellovy nerovnosti, dosaďme například $\alpha = 0°$, $\alpha' = 45°$, $\beta = 112{,}5°$, $\beta' = 67{,}5°$. Pro tento případ je $< \Gamma > = 2\sqrt{2}$, což je ve zjevném rozporu s Bellovými nerovnostmi. Testováním Bellových nerovností je možné vyloučit existenci skrytých parametrů v kvantové teorii.

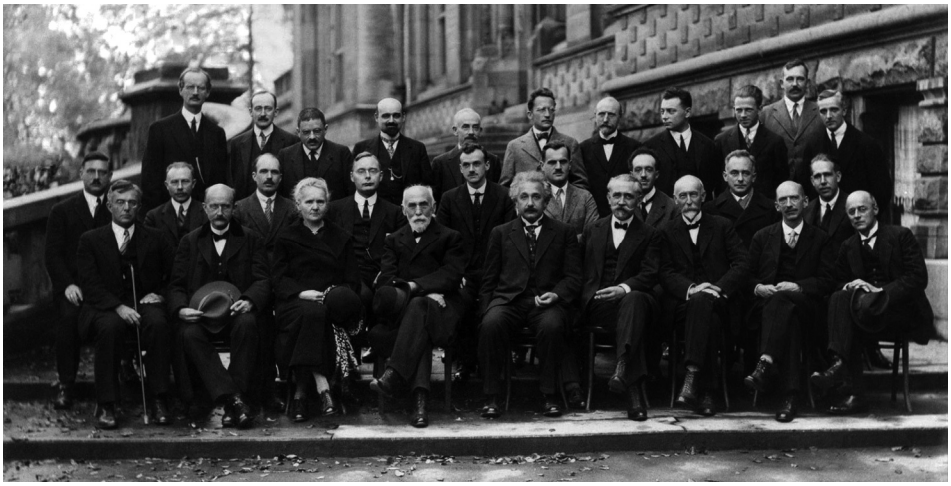
První experimenty, které vedly na porušení Bellových nerovností, byly uskutečněny už v roce 1972, nicméně fyzikální komunita je nepovažovala za průkazné. Přesvědčivý důkaz neplatnosti Bellových nerovností a tedy nemožnosti existence skrytých parametrů v kvantové teorii podala až skupina Alaina Aspecta ve francouzském Orsay v experimentech prováděných v letech 1976 až 1983. V těchto experimentech excitovali za pomoci laserových impulzů atomy vápníku. Excitovaný elektron se vracel na původní hladinu přes mezistav, při prvním přechodu vyzářil foton s vlnovou délkou 551,3 nm, při druhém foton s vlnovou délkou 422,7 nm. Jak excitovaný, tak původní stav měly celkový moment hybnosti nulový, zatímco mezistav měl celkový moment hybnosti nenulový, což vedlo k určité vazbě mezi polarizacemi obou vyslaných fotonů. Situace

nebyla tak jednoduchá jako v našem ukázkovém příkladu, kdy polarizace byly navzájem opačné, ale princip experimentů byl stejný. Ukázalo se, že Bellovy nerovnosti neplatí a náhodné výsledky experimentů nejsou důsledkem skrytých parametrů, ale základní vlastností přírody samotné.

2.9.5 A co dál?

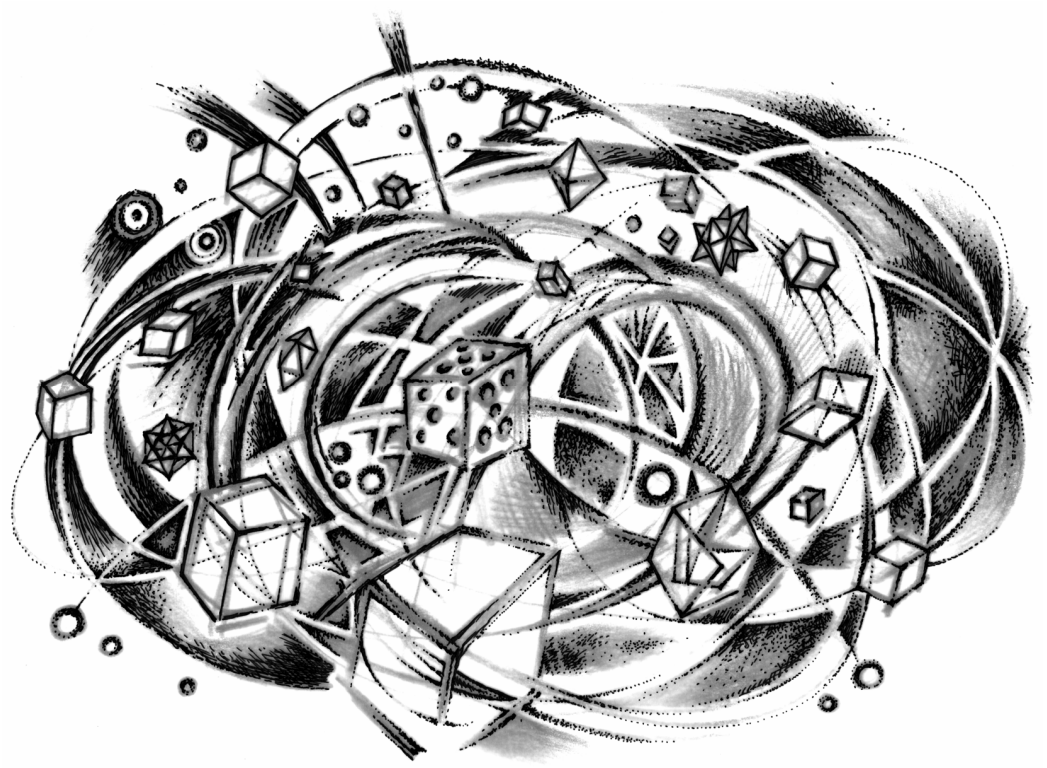
Náš přehled kvantové teorie na tomto místě končí. Šlo o výběr základních principů a jevů, na kterých může hloubavý čtenář dále stavět. Kvantová teorie je jednou z nejúspěšnějších teorií vybudovaných lidstvem. Standardní model elementárních částic a sil se stal přesným kvantovým popisem dějů podléhajících elektromagnetické, silné a slabé interakci. Kvantová elektrodynamika odstartovala elektronickou revoluci, s jejímiž výsledky se setkáváme na každém kroku. V posledních desetiletích zasahuje kvantová teorie čím dál tím častěji také do našich představ o ukládání a zpracování informací. Kvantové šifrování se stalo komerční záležitostí, kvantová teleportace je ve stádiu úspěšných experimentů a kvantové počítače jsou jasně formulovanou úlohou, která čeká na dostatečné technologické zázemí. Bez kvantové teorie se neobejde ani poznávání vesmíru. Látka v bílých trpaslících a v neutronových hvězdách se řídí kvantovými zákony, a v počátcích velkého třesku, za extrémních hustot a teplot byly kvantové vlastnosti mikrosvěta hlavním faktorem ovlivňujícím další vývoj vesmíru.

Základy kvantové teorie probrané v této kapitole a některé modelové výpočty by snad měly čtenáři umožnit další studium specializovaných odvětví, která jsou za hranicemi možností této učebnice. S kvantovými procesy ovlivňujícími chování velkého počtu částic se ještě setkáme v příští kapitole věnované statistické fyzice.



Obr. 94. Zakladatelé kvantové teorie na konferenci v Solvay (1927). První řada: I. Langmuir, M. Planck, M. Curie, H. Lorentz, A. Einstein, P. Lanagevin, C. Guye, C. Wilson, O. W. Richardson. Druhá řada: P. Debye, M. Knudsen, W. Bragg, H. Kramers, P. Dirac, A. Compton, L. Broglie, M. Born, N. Bohr. Třetí řada: A. Piccard, E. Henriot, P. Ehrenfest, E. Herzen, T. Donder, E. Schrödinger, E. Verschaffelt, W. Pauli, W. Heisenberg, R. H. Fowler, L. Brillouin

3. Statistická fyzika



3.1 Vybrané partie z termodynamiky

Chceme-li popisovat chování velkého souboru mnoha stejných systémů (klasickým příkladem je plyn složený z mnoha stejných molekul), můžeme v podstatě použít jen čtyři přístupy:

1) chování prohlásíme za „boží zázrak“ a dále nezkoumáme.
2) na základě výsledků jednoduchých experimentů se snažíme nalézt zákony, kterými se soubor řídí. Například zjistíme, že v uzavřené nádobě roste tlak s rostoucí teplotou či rostoucím počtem částic a naopak tlak plynu klesá, budeme-li zvětšovat rozměry nádoby. Kombinací těchto vztahů můžeme nalézt stavovou rovnici. Vždy však musíme mít na mysli, že jde o odvození na základě experimentů, bez zkoumání podstaty jevů samotných a ne vždy budeme zcela rozumět, kdy odvozené zákony přesně platí. Tímto přístupem se zabývá *termodynamika* a nazývá se popisný, odvozený ze zkušenosti, neboli *fenomenologický*.
3) pokusíme se vypočítat trajektorii každé částečky tvořící soubor ze základních zákonů, například z Hamiltonových rovnic. Tento postup musí nutně selhat u souborů mnoha částic, kde je takový popis nad naše možnosti. Můžeme ale použít různé numerické metody, nepopisovat všechny systémy ze souboru a podobně.
4) zákony popisující chování souboru jako celku se pokoušíme odvodit teoreticky ze znalosti chování jednotlivých členů systému statistickými metodami. Získané výsledky mají pravděpodobnostní charakter, ale u souborů mnoha částic to vůbec není na závadu, spíše naopak. Tímto přístupem se zabývá *statistická fyzika*.

Soubor systémů popisovaný metodami statistické fyziky může být velmi rozmanitý. Může jít o jednoduchý monoatomární plyn, o neutronovou hvězdu složenou z neutronů či o feromagnetikum složené z mnoha elementárních magnetků (spinů). Systémy popisovaného souboru mohou být jak klasické, tak kvantové. Již v kvantové teorii jsme se zmínili o mimořádné důležitosti harmonického oscilátoru, a proto i v této části budeme věnovat pozornost souboru kvantových harmonických oscilátorů.

Samozřejmě si odvodíme jednoduché zákony ideálního plynu, stavovou rovnici, ze statistického hlediska se seznámíme s pojmem entropie. Stejně tak ale budeme studovat kvantové systémy fermionů a bosonů nebo mnoha elementárních kvantových rotátorů (například rotujících molekul). Statistická fyzika je mimořádně krásná a elegantní partie fyziky, s jejímiž počátky jsou spjata jména takových velikánů, jako byli například Ludwig Boltzmann či Josiah Gibbs nebo v kvantové statistice Enrico Fermi, Paul Dirac, Satyendra Bose a Albert Einstein.

Než se ale pustíme do vlastní konstrukce statistické fyziky, musíme se seznámit s některými základními pojmy z termodynamiky. Tato část není v žádném případě nějakým systematickým výkladem termodynamiky. Jde jen o přehled některých pojmů z tohoto oboru, které budou potřeba k porovnání výsledků termodynamiky a statistické fyziky. V termodynamice budeme hovořit o popisované *soustavě*. Ve statistické fyzice pak budeme důsledně rozlišovat *systém* (jedna popisovaná entita) a *soubor* (velké množství těchto entit).

Ke studiu této části byste z matematiky měli znát Pfaffovy diferenciální formy. Jejich základy naleznete v dodatku F.

3.1.1 První a druhá věta termodynamická

První věta termodynamická není nic jiného než zákon zachování energie soustavy: *Vnitřní energie soustavy se může zvýšit dodaným teplem nebo přidáním dalších částic a snížit soustavou vykonanou prací.*

$$\mathrm{d}U = \mathrm{d}Q - \mathrm{d}A + \mathrm{d}U_N \,. \tag{3.1}$$

Sama vnitřní energie soustavy je úplným diferenciálem. Členy na pravé straně ale úplnými diferenciály nejsou. Plyne to z mnoha experimentů. Dodané teplo $\int \mathrm{d}Q$ je různé po různých cestách ve fázovém prostoru (p, V, T), a závisí tak na cestě. Podobně je to i s dalšími členy na pravé straně. Podívejme se na jednotlivé členy podrobněji:

Práce vykonaná soustavou (dA)

Práce vykonaná soustavou může být nejrůznější povahy: mechanické, elektrické, magnetické, polarizační, elastické, atd. a výsledný výraz je součtem mnoha členů. Prozatím se ale spokojíme jen s výrazem pro mechanickou práci, elektrické a magnetické členy budeme diskutovat později.

$$\mathrm{d}A = F\,\mathrm{d}l + \cdots = pS\,\mathrm{d}l + \cdots = p\,\mathrm{d}V + \cdots \tag{3.2}$$

Vnitřní energie spojená se změnou počtu částic (dU_N)

Přicházejí-li do soustavy další částice z vnějšku, roste vnitřní energie soustavy úměrně přírůstku částic:

$$\mathrm{d}U_N = \mu\,\mathrm{d}N \,. \tag{3.3}$$

Koeficient úměrnosti μ se nazývá chemický potenciál soustavy a závisí na typu látky, ze které se soustava skládá. Z matematického hlediska o žádný skutečný potenciál nejde a název má jen historický původ. Obsahuje-li soustava více druhů částic, je přírůstek vnitřní energie spojený se změnou počtu částic dán součtem podobných členů přes všechny druhy částic (používáme sumační konvenci):

$$\mathrm{d}U_N = \mu_k\,\mathrm{d}N_k \,. \tag{3.4}$$

Tepelná energie (dQ)

Teplo je jedním z ústředních pojmů termodynamiky a je proto obzvláště nepříjemnou záležitostí, že není ve tvaru úplného diferenciálu. Naštěstí lze ukázat, že vždy existuje integrační faktor, který teplo převede na diferenciální formu ve tvaru úplného diferenciálu. To je obsahem *druhé věty termodynamické*, která se vyskytuje v mnoha podobách. Pro nás bude nejdůležitější tvar: *Diferenciál tepla má integrační faktor. Je jím převrácená hodnota absolutní teploty. Nově vzniklou úplnou diferenciální formu nazýváme entropie a označujeme ji* dS:

$$\mathrm{d}S \equiv \frac{1}{T}\,\mathrm{d}Q \,. \tag{3.5}$$

- Existují i jiné formulace druhé věty termodynamické, které mají hluboký význam pro termodynamiku, například: *Neexistuje perpetum mobile druhého druhu (stroj trvale a cyklicky konající práci ochlazováním teplotní lázně)*. To, jak spolu obě formulace souvisí, může čtenář nalézt v každé učebnici termodynamiky.
- Ke správnému integračnímu faktoru lze dojít například rozborem Carnotova cyklu, kde se ukazuje, že integrace dQ *závisí* na cestě integrace, ale integrace veličiny dQ/T je *nezávislá* na cestě, a je proto úplným diferenciálem.
- To, že převrácená hodnota teploty je správným integračním faktorem diferenciálu tepla, lze také ukázat porovnáním derivací „křížem" u diferenciálu entropie.
- V termodynamice rovnovážných dějů má entropie význam diferenciálu tepla, který je integračním faktorem opraven na úplný diferenciál. Pro entropii platí všechny tvrzení věty o pěti ekvivalencích: integrál z entropie nezávisí na cestě, integrál po uzavřené křivce (cyklický děj) je nulový, atd. Proto vždy dáváme přednost entropii a místo diferenciálu tepla píšeme:

► $$\mathrm{d}Q = T\,\mathrm{d}S\,. \tag{3.6}$$

Po vyjádření všech veličin na pravé straně první věty termodynamické (3.1) získáme tvar, který budeme používat:

► $$\mathrm{d}U = T\,\mathrm{d}S - p\,\mathrm{d}V + \mu_k\,\mathrm{d}N_k\,. \tag{3.7}$$

V posledním členu používáme sumační konvenci, sčítá se přes všechny druhy částic, jejichž počet se může měnit (například v plazmatu elektrony, neutrální částice a ionty).

3.1.2 Termodynamické potenciály

V minulé kapitole jsme se seznámili se dvěma veličinami, které tvoří diferenciální formy ve tvaru úplného diferenciálu. Jde o vnitřní energii a entropii. Existuje však postup, kterým můžeme vytvářet celou řadu dalších, velmi užitečných úplných diferenciálních forem. Nyní zmíníme o entalpii, volné energii, Gibbsově potenciálu a grandkanonickém potenciálu. Význam těchto veličin je pro statistickou fyziku velmi důležitý.

Entalpie *H*

Pravou stranu diferenciálu vnitřní energie (3.7) „zúplníme" v členu $p\,\mathrm{d}V$. Zapíšeme ho jako $\mathrm{d}(pV) - V\mathrm{d}p$ a první člen převedeme na levou stranu. Tak získáme novou veličinu ve tvaru úplného diferenciálu, tzv. entalpii:

$$\mathrm{d}U = T\,\mathrm{d}S - p\,\mathrm{d}V + \mu_k\,\mathrm{d}N_k\,,$$

$$\mathrm{d}U = T\,\mathrm{d}S - \mathrm{d}(pV) + V\,\mathrm{d}p + \mu_k\,\mathrm{d}N_k\,,$$

$$\mathrm{d}(U + pV) = T\,\mathrm{d}S + V\,\mathrm{d}p + \mu_k\,\mathrm{d}N_k\,.$$

Pro nově zavedenou veličinu můžeme napsat celou řadu relací. Známe její definici (nalevo v závorce) a také známe její první diferenciál (pravá strana rovnosti). Z tvaru prvního diferenciálu poznáme, na kterých veličinách entalpie závisí. Navíc víme, že jde o úplný diferenciál, tj. parciální derivace entalpie dají koeficienty diferenciální formy na pravé straně:

$$H \equiv U + pV\,,$$

$$\mathrm{d}H = T\,\mathrm{d}S + V\,\mathrm{d}p + \mu_k\,\mathrm{d}N_k\,,$$

$$H = H(S, p, N_k)\,, \tag{3.8}$$

$$T = \left(\frac{\partial H}{\partial S}\right)_{p,N_k}, \qquad V = \left(\frac{\partial H}{\partial p}\right)_{S,N_k}, \qquad \mu_k = \left(\frac{\partial H}{\partial N_k}\right)_{S,p,N_{i\neq k}}.$$

Ze znalosti entalpie můžeme určit teplotu, objem a chemické potenciály soustavy. Z první relace (3.8) můžeme také určit za pomoci entalpie vnitřní energii soustavy:

$$U = H - pV = H - p\left(\frac{\partial H}{\partial p}\right). \tag{3.9}$$

Tato rovnice se nazývá *Gibbsova-Helmholtzova rovnice prvního druhu*. Z vnitřní energie pak můžeme počítat tepelné kapacity soustavy i další veličiny.

Poznámka 1: Indexy u parciálních derivací znamenají, že příslušné veličiny jsou při derivování konstantní, zkrátka si jich nevšímáme tak, jak jsme běžně zvyklí. V termodynamice, kde děje závisí na cestě, bývá zvykem tuto cestu explicitně vyznačovat. V našem textu budeme automaticky rozumět, že veličiny, podle kterých se derivace neprovádí, jsou konstantní, a indexy nadále nebudeme psát.

Poznámka 2: Písmeno H znamená velké řecké éta (souvisí se slovem *enthalpy*).

Volná energie *F*

Budeme postupovat obdobně jako u entalpie, jen nyní ve výrazu (3.7) pro vnitřní energii zúplníme člen $T\,\mathrm{d}S$:

$$\mathrm{d}U = T\,\mathrm{d}S - p\,\mathrm{d}V + \mu_k\,\mathrm{d}N_k\,,$$

$$\mathrm{d}(U - TS) = -S\,\mathrm{d}T - p\,\mathrm{d}V + \mu_k\,\mathrm{d}N_k\,.$$

Opět tak získáváme novou diferenciální formu ve tvaru úplného diferenciálu, kterou nazýváme *volná energie*. Stejně jako u entalpie můžeme kromě definice ihned napsat celou řadu relací:

$$F \equiv U - TS\,,$$

$$\mathrm{d}F = -S\,\mathrm{d}T - p\,\mathrm{d}V + \mu_k\,\mathrm{d}N_k\,,$$

► $$F = F(T, V, N_k)\,, \tag{3.10}$$

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right), \qquad p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right), \qquad \mu_k = \left(\frac{\partial F}{\partial N_k}\right).$$

Právě volná energie má ve statistické fyzice mimořádný význam. Uvidíme totiž, že tuto veličinu na základě statistických úvah budeme schopni zjistit. Volná energie je funkcí snadno představitelných veličin: teploty, objemu soustavy a počtu částic různých druhů.

Poznáme-li tuto funkci, snadno pouhým derivováním určíme entropii soustavy, jejíž intuitivní pochopení často naráží na problémy. Derivováním volné energie podle objemu zjistíme tlak v soustavě, tedy stavovou rovnici, a derivováním podle počtu částic můžeme určit chemické potenciály soustavy. Co více si přát? Snad ještě vnitřní energii, ale ani to není problém. Z definice volné energie $F = U - TS$ určíme $U = F + TS$ a dosadíme již vypočtenou hodnotu entropie:

$$U = F - T\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right). \tag{3.11}$$

Jde o tzv. *Gibbsovu-Helmholtzovu rovnici druhého druhu*, jež je východiskem k mnoha dalším odvozeným veličinám, které se počítají z vnitřní energie.

◖ **Příklad 49:** Dokažte, že Gibbsovu-Helmholtzovu rovnici (3.11) lze zapsat v jednoduchém tvaru $U = \partial(\beta F)/\partial\beta$, kde $\beta \equiv 1/T$. ◗

Gibbsův potenciál *G*

Naprosto stejným postupem jako v předchozích případech zúplníme diferenciál vnitřní energie v obou členech $p\,\mathrm{d}V$ a $T\,\mathrm{d}S$. Výsledkem je nová veličina, Gibbsův potenciál, pro který zřejmě platí:

$$G \equiv U - TS + pV,$$

$$\mathrm{d}G = -S\,\mathrm{d}T + V\,\mathrm{d}p + \mu_k\,\mathrm{d}N_k,$$

$$G = G(T, p, N_k), \tag{3.12}$$

$$S = -\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right), \qquad V = \left(\frac{\partial G}{\partial p}\right), \qquad \mu_k = \left(\frac{\partial G}{\partial N_k}\right).$$

Gibbsův potenciál má velký význam pro chemii a termodynamiku, my ho ve statistické fyzice nevyužijeme. Kulaté závorky znamenají, že veškeré ostatní veličiny (kromě té, podle které se derivuje) jsou drženy konstantní, indexy již nevypisujeme.

Grandkanonický potenciál Ω

Posledním z potenciálů, který pro nás bude mít velký význam, je grandkanonický potenciál. Diferenciál vnitřní energie zúplníme v členech $T\,\mathrm{d}S$ a $\mu\,\mathrm{d}N$. Výsledek je:

$$\Omega \equiv U - TS - \mu_k N_k,$$

$$\mathrm{d}\Omega = -S\,\mathrm{d}T - p\,\mathrm{d}V - N_k\,\mathrm{d}\mu_k,$$

$$\Omega = \Omega(T, V, \mu_k), \tag{3.13}$$

$$S = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial T}\right), \qquad p = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial V}\right), \qquad N_k = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu_k}\right).$$

Ve statistické fyzice souborů s proměnným počtem částic budeme schopni, alespoň teoreticky, určit právě grandkanonický potenciál. Z něho pak již snadno nalezneme

entropii soustavy, tlak (stavovou rovnici) a počty jednotlivých částic. Z definice grand-kanonického potenciálu potom vypočteme vnitřní energii:

$$U = \Omega + TS + \mu_k N_k = \Omega - T\left(\frac{\partial \Omega}{\partial T}\right) - \mu_k \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu_k}\right), \tag{3.14}$$

která je východiskem k výpočtu mnoha dalších veličin. Pokud chcete termodynamiku studovat hlouběji, zkuste si sehnat sice starší, ale vynikající učebnici Jozefa Kvasnici [35]. Od stejného autora existuje i velmi podrobná učebnice statistické fyziky [36]. Další informace o statistické fyzice se dozvíte z publikací [37], [38], [39].

3.2 Základní pojmy statistické fyziky

3.2.1 Slovníček pojmů

Systém

Systémem rozumíme jakoukoli popisovanou entitu. Sadu nezávislých parametrů nutných k popisu nazýváme zobecněné souřadnice. Standardními postupy teoretické mechaniky přiřadíme každé zobecněné souřadnici zobecněnou hybnost. Známe-li počáteční hodnoty souřadnic a hybností, můžeme v klasické fyzice předpovědět trajektorii systému za pomoci Hamiltonových rovnic. Jde-li o kvantový systém, je stav dán vektorem v Hilbertově prostoru a časový vývoj určíme působením evolučního operátoru. V tomto případě má trajektorie pravděpodobnostní charakter a je kvantově „rozmazána“.

Fázový prostor

Fázovým prostorem nazýváme prostor zobecněných souřadnic a hybností (q, p). Nepíšeme-li indexy, automaticky myslíme celé množiny všech zobecněných souřadnic a hybností. Proč se používají hybnosti namísto rychlostí? Je pro to několik důvodů:

- Chceme-li sledovat časový vývoj, používáme Hamiltonovy rovnice pro polohy a hybnosti.
- Svět je na elementární úrovni kvantově rozmazán díky Heisenbergovým relacím neurčitosti. Ty platí opět mezi zobecněnou souřadnicí a jí příslušející zobecněnou hybností.
- Je-li situace symetrická vzhledem k posunutí v některé zobecněné souřadnici, zachovává se příslušná zobecněná hybnost. Tyto dvě veličiny neoddělitelně patří k sobě.
- Poissonovy závorky zobecněných souřadnic a odpovídajících zobecněných hybností jsou rovny jedné, ostatní závorky jsou nulové.
- Ve statistické fyzice uvidíme, že ve fázovém prostoru s osami (q, p) se při statistickém vývoji mnoha systémů zachovává objem a soubor systémů se chová jako nestlačitelná kapalina (Liouvillův teorém), což je pro popis velmi výhodné.

Soubor

Souborem rozumíme velké množství stejných systémů se stejným fázovým prostorem. Systémy mohou mít různé počáteční podmínky a ve fázovém prostoru jsou v daném okamžiku reprezentovány množinou mnoha bodů. Při časovém vývoji se jednotlivé body přesouvají po svých fázových trajektoriích daných Hamiltonovými rovnicemi.

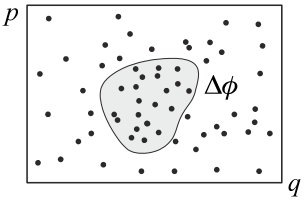
Fázový objem

Ve fázovém prostoru můžeme standardním způsobem zavést elementární objem fázového prostoru jako $2f$ rozměrný diferenciál (f je počet stupňů volnosti)

$$\mathrm{d}\phi = \mathrm{d}q_1 \cdots \mathrm{d}q_f \, \mathrm{d}p_1 \cdots \mathrm{d}p_f = \prod_k \mathrm{d}q_k \prod_k \mathrm{d}p_k = \mathrm{d}^f q \; \mathrm{d}^f p \,. \tag{3.15}$$

Jde o přirozené zobecnění „běžného“ objemu ve třech dimenzích, kde je $\mathrm{d}V = \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z$. Konečná oblast Ω fázového prostoru má potom objem

► $$\Delta\phi = \int_\Omega \mathrm{d}\phi = \int_\Omega \mathrm{d}^f q \; \mathrm{d}^f p \,. \tag{3.16}$$



Obr. 95: Fázový objem s jednou prostorovou a jednou hybnostní souřadnicí.

◖ Příklad 50: fázový objem oscilátoru

Určete fázový objem, který zaujímají ve fázovém prostoru harmonické oscilátory, jejichž maximální energie je E. Určete také, jaký objem zaujímá jedno kvantum energie harmonického oscilátoru.

Řešení: Z teoretické mechaniky víme, že fázovou trajektorií harmonického oscilátoru je elipsa. Harmonický oscilátor při svém pohybu zachovává energii, proto můžeme rovnici elipsy jednoduše zapsat jako rovnici energetické „nadplochy“

$$H \equiv \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} = E \,. \tag{3.17}$$

Na této nadploše (v tomto případě obyčejné elipse) se nacházejí oscilátory, které mají energii právě E. Uvnitř elipsy leží trajektorie oscilátorů s nižší energií, vně elipsy trajektorie oscilátorů s vyšší energií. Energetická nadplocha vymezuje ve fázovém prostoru množinu (včetně hranice), v níž se mohou nacházet oscilátory, jejichž energie je menší nebo rovna E. Fázový objem této množiny bude

$$\phi = \int_\Omega \mathrm{d}x\,\mathrm{d}p \,; \qquad \Omega = \left\{ (x,p) : \; \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \frac{p^2}{2m} \le E \right\}. \tag{3.18}$$

Provedeme-li substituce $\xi = (m\omega^2/2)^{1/2} x$; $\eta = p/(2m)^{1/2}$, zjednoduší se oblast integrace na kruh (dvojrozměrnou kouli)

$$\phi = \frac{2}{\omega} \int_\Omega \mathrm{d}\xi \, \mathrm{d}\eta \,; \qquad \Omega = \left\{ (\xi,\eta) : \; \xi^2 + \eta^2 \le E \right\}. \tag{3.19}$$

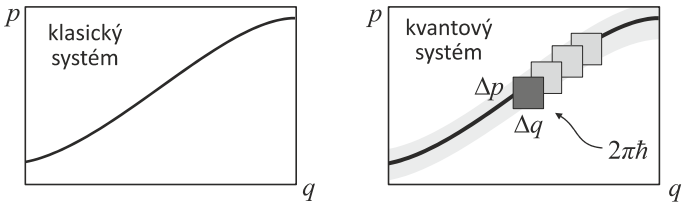
Výsledkem integrálu je objem 2D koule $V_2(E^{1/2})$, v tomto případě jde o obyčejnou plochu kruhu o poloměru $E^{1/2}$:

$$\phi = 2\pi E / \omega \,. \tag{3.20}$$

Energetické spektrum harmonického oscilátoru „skáče“ po kvantech $\Delta E = \hbar\omega$, jednomu kvantu tedy bude příslušet velikost fázového prostoru

$$\Delta\phi = 2\pi\,\Delta E/\omega = 2\pi\hbar\omega/\omega = 2\pi\hbar\,. \tag{3.21}$$

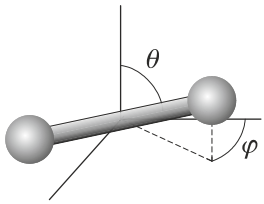
Hodnota $2\pi\hbar$ znamená velikost jednoho (jednorozměrného) stavu ve fázovém prostoru. Současně jde o velikost „pixelu“ rozmazání fázové trajektorie v kvantové teorii.



Obr. 96: Objem stavu ve fázovém prostoru.

Příklad 51: fázový objem molekuly

Vypočtěte fázový objem, který ohraničuje energetická nadplocha molekuly chovající se jako tuhá činka.



Obr. 97: Molekula jako tuhá činka.

Řešení: Molekula má celkem 5 stupňů volnosti. Může se pohybovat jako celek (tento pohyb popíšeme souřadnicemi těžiště molekuly x, y, z) a může rotovat ve dvou nezávislých úhlech (popíšeme je úhly θ a φ sférických souřadnic). Fázový prostor má tak 5 souřadnicových os a 5 hybnostních os, je tedy desetirozměrný. Molekula o hmotnosti m se ve fázovém prostoru vždy nachází v některém bodě tzv. energetické nadplochy (každý z obou atomů má hmotnost $m/2$ a je vzdálen od těžiště $l/2$)

$$E = \frac{1}{2}m\left(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2\right) + \frac{1}{2}m\left(\frac{l}{2}\right)^2\left(\dot{\theta}^2 + \sin^2\theta\,\dot{\varphi}^2\right) = \text{const.}$$

Standardním postupem určíme hamiltonián

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} + \frac{2}{ml^2}\left(p_\theta^2 + \frac{p_\varphi^2}{\sin^2\theta}\right).$$

Nyní se již můžeme pustit do výpočtu objemu oblasti fázového prostoru, kterou uzavírá energetická nadplocha:

$$\phi = \int\limits_{H \le E} \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z\,\mathrm{d}\varphi\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}p_x\,\mathrm{d}p_y\,\mathrm{d}p_z\,\mathrm{d}p_\varphi\,\mathrm{d}p_\theta \;\Rightarrow$$

$$\phi = \int\limits_V \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z \int\limits_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \int\limits_0^{\pi} \sin\theta\,\mathrm{d}\theta \int\limits_{p_1^2 + \cdots p_5^2 \le E} \sqrt{2} m^{5/2} l^2\,\mathrm{d}^5 p \;\Rightarrow$$

$$\phi = 2^{5/2}\pi V m^{5/2} l^2 E^{5/2} V_5(1)\,.$$

V druhém řádku jsme provedli standardní substituce, podobně jako v předchozím příkladě. Diferenciál páté hybnosti má dvě části, ale integrál první z nich je nulový. Veličina $V_5(1)$ je objem jednotkové pětirozměrné koule. ◗

Váhový faktor

Každý stupeň volnosti je v kvantové teorii rozmazán s hodnotou „pixelu“ $2\pi\hbar$, kterou zaujímá jeden kvantový stav (a nemusí jít jen o kvantový oscilátor, pro který jsme tuto hodnotu odvodili). Ve více dimenzích je velikost „základního pixelu“ neboli velikost jednoho kvantového stavu $(2\pi\hbar)^f$ (jde o prostý součin „pixelů“ jednotlivých dimenzí). Velmi výhodné bude zavést bezrozměrný fázový objem výrazem

► $$\mathrm{d}\Gamma \equiv \frac{\mathrm{d}\phi}{(2\pi\hbar)^f}\;; \qquad \Delta\Gamma = \int\limits_\phi \frac{\mathrm{d}^f q\,\mathrm{d}^f p}{(2\pi\hbar)^f}\,. \tag{3.22}$$

Tato bezrozměrná veličina se nazývá váhový faktor, využívá se zejména u kvantových systémů. Jde vlastně o fázový objem vydělený velikostí jednoho kvantového stavu, Γ má tedy význam počtu kvantových stavů obsažených ve fázovém objemu ϕ.

Hustota pravděpodobnosti

Bude-li soubor obsahovat velké množství systémů, můžeme zavést *hustotu počtu systémů* v elementu fázového objemu $\Delta N/\Delta\phi$. Čím bude toto číslo vyšší, tím více je v daném místě systémů a tím vyšší je pravděpodobnost nalézt v dané oblasti nějaký systém. *Hustota pravděpodobnosti* je úměrná hustotě počtu systémů ve fázovém prostoru. Z důvodu normování se někdy hustota pravděpodobnosti dělí ještě celkovým počtem částic. Také je možné využít bezrozměrný fázový objem (váhový faktor) a tak jsou celkem 4 možnosti zavedení a normování hustoty pravděpodobnosti:

$$\rho \equiv \frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}\phi}, \qquad \mathrm{d}w = \rho\,\mathrm{d}\phi, \qquad \int \mathrm{d}w = \int \frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}\phi}\mathrm{d}\phi = N\,; \tag{3.23}$$

► $$\rho \equiv \frac{1}{N}\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}\phi}, \qquad \mathrm{d}w = \rho\mathrm{d}\phi, \qquad \int \mathrm{d}w = \int \frac{1}{N}\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}\phi}\mathrm{d}\phi = 1\,; \tag{3.24}$$

$$\rho \equiv \frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}\Gamma}, \qquad \mathrm{d}w = \rho\mathrm{d}\Gamma, \qquad \int \mathrm{d}w = \int \frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}\Gamma}\mathrm{d}\Gamma = N\,; \tag{3.25}$$

► $$\rho \equiv \frac{1}{N}\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}\Gamma}, \qquad \mathrm{d}w = \rho\mathrm{d}\Gamma, \qquad \int \mathrm{d}w = \int \frac{1}{N}\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}\Gamma}\mathrm{d}\Gamma = 1\,. \tag{3.26}$$

Celková pravděpodobnost je normována buď k jedné (tak tomu je nejčastěji v matematice) nebo k celkovému počtu částic. V této učebnici budeme využívat druhé a čtvrté možnosti normování hustoty pravděpodobnosti (k jedné).

Středování přes fázový prostor

Je-li známa hustota pravděpodobnosti, můžeme průměrovat dynamické proměnné přes fázový prostor. Sečteme hodnoty dynamické proměnné A pro všechny systémy s vahou danou hustotou pravděpodobnosti ρ:

$$\langle A \rangle \equiv \int A(q,p)\,\mathrm{d}w = \int A(q,p)\,\rho \mathrm{d}\phi \qquad \text{nebo}$$

$$\langle A \rangle \equiv \int A(q,p)\,\mathrm{d}w = \int A(q,p)\,\rho \mathrm{d}\Gamma \qquad \text{nebo} \tag{3.27}$$

$$\langle A \rangle \equiv \sum A_n w_n \,.$$

První případ platí, použijeme-li fázový prostor, druhý, použijeme-li váhový faktor, třetí pro systém s diskrétními stavy, kde prostě sčítáme přes pravděpodobnosti jednotlivých stavů. Pravděpodobnosti splňují normovací podmínku

$$\int \mathrm{d}w = 1\,; \qquad \sum_n w_n = 1. \tag{3.28}$$

3.2.2 Ergodický problém

Střední hodnotu dynamické proměnné $A(q,p)$ v souboru mohu v zásadě určit dvojím způsobem. První z možností je středování přes soubor pomocí zavedené hustoty pravděpodobnosti:

$$\langle A \rangle \equiv \int A(q,p)\mathrm{d}w = \int A(q,p)\,\rho\,\mathrm{d}\Gamma\,. \tag{3.29}$$

Druhou z možností je zvolit si jeden ze systémů souboru a průměrovat veličinu A po dostatečně dlouhou dobu τ:

$$\overline{A} \equiv \lim_{\tau\to\infty} \frac{1}{\tau} \int_{t_0}^{t_0+\tau} A\big(q(t),p(t)\big)\,\mathrm{d}t\,. \tag{3.30}$$

Samozřejmě by výsledek limity neměl záviset na počátečním čase t_0. Velmi diskutovanou a velmi starou je otázka, zda obojím způsobem získáme týž výsledek:

$$\langle A \rangle \overset{?}{=} \overline{A}\,. \tag{3.31}$$

Tento problém se nazývá ergodický problém, je vyřešen kladně v mnoha jednotlivých případech, ale obecné řešení pro mechanické systémy známo není. V tomto textu budeme středovat veličiny pomocí vztahu (3.29) a budeme doufat, že i průměrování (3.30) by vedlo ke stejnému výsledku.

3.2.3 Liouvillův teorém

Proudění zpravidla popisujeme hustotou a tokem nějaké aditivní veličiny A. Může jít o tok hmotnosti, náboje, tepla, energie a podobně. Hustota a tok jsou definovány vztahy

$$\rho = \lim_{\Delta V \to 0} \frac{\Delta A}{\Delta V}, \qquad \mathbf{j} = \rho \mathbf{u} \tag{3.32}$$

a tvoří relativistický čtyřvektor $(\rho, \mathbf{j})$ transformující se pomocí Lorentzovy matice. Veličina $\mathbf{u}(t, \mathbf{x})$ je rychlostní pole. Jestliže se při proudění veličina A zachovává, platí rovnice kontinuity

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \mathbf{u} = 0 . \tag{3.33}$$

Jde o součet přes časovou i všechny prostorové derivace:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_k}{\partial x_k} = 0 .$$

V našem případě je věc jen nepatrně složitější. Aditivní veličinou je počet systémů v souboru, hustotou je hustota pravděpodobnosti. Tok ale musíme brát ve fázovém prostoru všech souřadnic a hybností

$$\mathbf{j} = (\rho \dot{q}_1, \cdots, \rho \dot{q}_f, \rho \dot{p}_1, \cdots, \rho \dot{p}_f) ,$$

stejně tak jako divergence v rovnici kontinuity bude obsahovat derivace přes všechny osy fázového prostoru:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho \dot{q}_k}{\partial q_k} + \frac{\partial \rho \dot{p}_k}{\partial p_k} = 0 .$$

Je jasné, že pokud se systémy ve fázovém prostoru neztrácejí, musí takový zákon zachování počtu systémů platit. Proveďme nyní derivace součinů:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial \dot{q}_k}{\partial q_k} \rho + \frac{\partial \rho}{\partial p_k} \dot{p}_k + \frac{\partial \dot{p}_k}{\partial p_k} \rho = 0 .$$

Ve třetím a pátém členu využijeme Hamiltonovy rovnice

$$\dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k} ; \qquad \dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k}$$

a dostaneme

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial^2 H}{\partial q_k \partial p_k} \rho + \frac{\partial \rho}{\partial p_k} \dot{p}_k - \frac{\partial^2 H}{\partial p_k \partial q_k} \rho = 0 .$$

Díky záměnnosti druhých parciálních derivací se nakonec oba zmíněné členy vyruší. Dostáváme tak rovnici kontinuity ve tvaru

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial q_k}\dot{q}_k + \frac{\partial \rho}{\partial p_k}\dot{p}_k = 0 .$$

Vzhledem k tomu, že $\rho = \rho(t, q_k, p_k)$ dostáváme tak

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = 0 . \qquad (3.34)$$

Hustota pravděpodobnosti se nemění a pravděpodobnost výskytu systémů ve fázovém prostoru se chová jako nestlačitelná kapalina. Rovnice (3.34) se nazývá Liouvillův teorém a má ve statistické fyzice zásadní důležitost.

Poznámka: Rovnici kontinuity můžeme obdobně upravit i u proudění běžné tekutiny, kterou popsujeme pouze hustotním a rychlostním polem:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \mathbf{u} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \partial_k(\rho u_k) = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial x_k}u_k + \frac{\partial u_k}{\partial x_k}\rho = 0 .$$

První dva členy dávají úplnou časovou derivaci hustoty a poslední člen lze upravit za pomoci divergence:

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} + \rho \operatorname{div} \mathbf{u} = 0$$

Je jasné, že proudění normální tekutiny je nestlačitelné, tj. $\mathrm{d}\rho/\mathrm{d}t = 0$, je-li $\operatorname{div} \mathbf{u} = 0$.

Hustota pravděpodobnosti je podle vztahu (3.34) konstantní. Kolik konstant máme ve výpočtu k dispozici? Počítáme-li zobecněné souřadnice a zobecněné hybnosti z Hamiltonových rovnic, vyjde řešení závislé na počátečním stavu (f polohách a f hybnostech), tj. obsahuje $2f$ integračních konstant pohybu, přesněji $2f - 1$, protože jednu konstantu spotřebujeme na volbu počátku časové osy t_0.:

$$q_k = q_k(t, \alpha_1, \ldots, \alpha_{2f-1}) ,$$
$$p_k = p_k(t, \alpha_1, \ldots, \alpha_{2f-1}) .$$

Kdybychom získané řešení dokázali beze zbytku invertovat a spočítat tyto integrační konstanty

$$\alpha_k = \alpha_k(q_1, \ldots, q_f , p_1, \ldots, p_f) ,$$

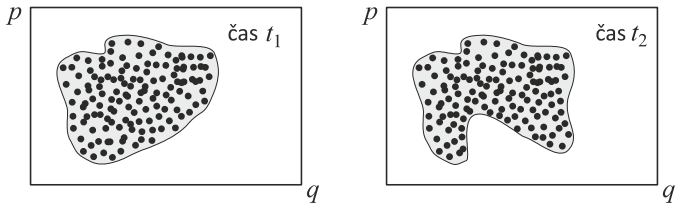
získali bychom všechny zákony zachování souboru. Bohužel ne vždy jsou definovány na celém oboru a z mechaniky máme zajištěnu existenci jen sedmi základních zákonů zachování: energie, hybnosti a momentu hybnosti. Má-li být úplná derivace hustoty pravděpodobnosti podle Liouvillova teorému konstantní, je rozumné předpokládat, že je funkcí těchto známých integrálů pohybu:

$$\rho = \rho(E, \mathbf{p}, \mathbf{L}) .$$

Vybereme-li souřadnicový systém pohybující se s těžištěm souboru a rotující spolu s ním, zůstává jediná nenulová veličina, na které může záviset hustota pravděpodobnosti – energie:

► $$\rho = \rho(E)\,. \tag{3.35}$$

Jde o nejzávažnější důsledek Liouvillova teorému.



Obr. 98: Liouvillův teorém. Fázový objem se může měnit, ale jeho velikost zůstává konstantní.

Díky nestlačitelnosti „proudící pravděpodobnosti" se nemění fázový objem zaujímaný vybranou makroskopickou částí systémů. Jestliže systémy zaujímaly na začátku ve fázovém prostoru určitý objem ϕ, bude se tento objem v průběhu časového vývoje různě deformovat, ale jeho velikost se nebude měnit. Tento objem (nebo váhový faktor) tedy bude opět jen funkcí energie systému

► $$\phi = \phi(E)\,; \qquad \Gamma = \Gamma(E)\,. \tag{3.36}$$

To je jen jiná formulace Liouvillova teorému. Více se dozvíte v publikaci [40].

Hustota energetických stavů

Pro element pravděpodobnosti můžeme díky Liouvillovu teorému psát

$$\mathrm{d}w = \rho\,\mathrm{d}\Gamma = \rho(E)\,\mathrm{d}\Gamma(E) = \rho\frac{\mathrm{d}\Gamma}{\mathrm{d}E}\,\mathrm{d}E = \rho(E)\,\gamma(E)\,\mathrm{d}E\,, \tag{3.37}$$

kde jsme označili

$$\gamma(E) \equiv \frac{\mathrm{d}\Gamma}{\mathrm{d}E} \tag{3.38}$$

tzv. hustotu energetických stavů (vzpomeňte si, že Γ má význam počtu kvantových stavů v uvažovaném fázovém objemu). U spojitých problémů je hustota energetických stavů spojitou funkcí, mnohdy má však i diskrétní část:

$$\gamma(E) = g(E) + \sum_n g_n\,\delta(E - E_n)\,. \tag{3.39}$$

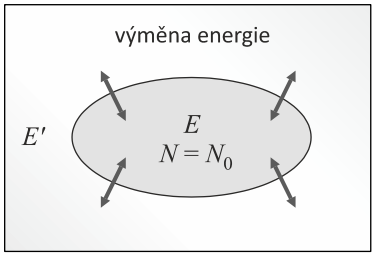
Symbol δ znamená Diracovu distribuci (analogie Kroneckerova delta v prostorech l_2 u prostorů L_2). Koeficienty g_n nazýváme stupeň degenerace stavu n.

3.3 Gibbsův kanonický soubor

3.3.1 Odvození rozdělení

Při odvození použijeme následující předpoklady:

- Systém o N částicích může vyměňovat energii s okolím. Znamená to tedy například možnost výměny tepelné energie přes stěny systému.
- Počet částic systému je konstantní. Systém nevyměňuje částice s okolím, částice v něm nevznikají ani nezanikají.
- Jediným vnějším parametrem je objem systému (je dán vnějšími faktory, tvarem nádoby). Práce obecně může záviset na mnoha vnějších faktorech: $\mathrm{d}A = A_\mathrm{k}\,\mathrm{d}a_\mathrm{k}$. Veličiny A_k nazýváme zobecněné síly a veličiny a_k vnější parametry. V našem jednoduchém příkladě máme jediný člen $\mathrm{d}A = p\mathrm{d}V$.
- Energie vázaná na povrch soustavy $E_{\partial V}$ je zanedbatelná vzhledem k celkové energii soustavy E_V, tj. zanedbáme povrchové jevy.
- Budeme podle Liouvillova teorému předpokládat, že hustota pravděpodobnosti i fázový objem závisejí jen na energii soustavy.



Obr. 99: Gibbsův kanonický soubor.

Uvedené předpoklady lze jednoduše vyjádřit matematickými vztahy:

$$\begin{aligned}
&(1)\quad E \neq \mathrm{const}\,,\\
&(2)\quad N = \mathrm{const}\,,\\
&(3)\quad \mathrm{d}A = p\mathrm{d}V\,,\\
&(4)\quad E_{\partial V} \ll E_V\,,\\
&(5)\quad \phi = \phi(E)\,; \qquad \rho = \rho(E)\,.
\end{aligned} \tag{3.40}$$

První věta termodynamická bude pro tuto soustavu mít jednoduchý tvar

$$\mathrm{d}U = T\,\mathrm{d}S - p\,\mathrm{d}V\,. \tag{3.41}$$

Vzhledem k tomu, že počet částic soustavy se nemění, je poslední člen v (3.7) nulový. Proměnné okolí budeme označovat čárkou. Pravděpodobnost, že systém i s okolím nalezneme ve stavu s určitou energií, je dána aditivností energie a multiplikativností fázového objemu:

$$\mathrm{d}w_{\mathrm{tot}} = \rho(E_{\mathrm{tot}})\,\mathrm{d}\Gamma_{\mathrm{tot}} = \rho(E+E')\,\mathrm{d}\Gamma\,\mathrm{d}\Gamma' . \tag{3.42}$$

Pro nezávislé subsystémy se ale pravděpodobnosti násobí a mělo by proto také platit:

$$\mathrm{d}w_{\mathrm{tot}} = \mathrm{d}w(E)\,\mathrm{d}w(E') = \rho(E)\mathrm{d}\Gamma(E)\;\rho(E')\mathrm{d}\Gamma(E') = \rho(E)\rho(E')\,\mathrm{d}\Gamma\mathrm{d}\Gamma' . \tag{3.43}$$

Porovnáním obou možností zjistíme, že pro hustotu pravděpodobnosti musí platit vztah

$$\rho(E+E') = \rho(E)\,\rho(E') . \tag{3.44}$$

V matematice se ukazuje, že existuje jediná funkce s touto vlastností, a tou je obecná exponenciála

$$\rho(E) = \mathrm{e}^{c_1 + c_2 E} . \tag{3.45}$$

V exponenciále označíme konstanty lineární kombinace písmeny α, $-\beta$. Volba znaménka je v tuto chvíli nepodstatná, a kdyby nebyla správná, β by vyšlo záporné. Uvidíme, že ve skutečnosti s rostoucí energií systému klesá pravděpodobnost jeho výskytu, a proto je minus před energií správné. Uveďme výraz jak pro spojitý, tak pro diskrétní případ:

$$\rho(E) = \mathrm{e}^{\alpha - \beta E} ; \qquad w_n = \mathrm{e}^{\alpha - \beta E_n} . \tag{3.46}$$

Hodnoty konstant α a β odvodíme z podmínky, že statistické výsledky musí limitně přecházet ve známé zákony termodynamiky. V diskrétním případě závisí možné hodnoty energetického spektra na vnějších parametrech systému, v našem případě na objemu zaujímaném systémem, tj. $E_n = E_n(V)$.

3.3.2 Konstanty rozdělení

Určeme nyní konstanty α a β. Nalezneme diferenciál střední hodnoty energie a porovnáme ho s první větou termodynamickou. Odvození je možné provést spojitě nebo diskrétně, například pro střední hodnotu energie můžeme ve spojitém případě psát

$$U = \int E\,\mathrm{d}w = \int E\,\rho(E)\,\mathrm{d}\Gamma = \int E\,\rho(E)\,\gamma(E)\,\mathrm{d}E \tag{3.47}$$

a v diskrétním

$$U = \sum E_n w_n = \sum E_n(V)\,w_n . \tag{3.48}$$

My se v tomto odvození budeme držet diskrétního případu a naopak některé příští odvození pro změnu povedeme spojitě. Nalezněme tedy diferenciál výrazu (3.48):

$$\mathrm{d}U = \sum\left[\left(\frac{\partial E_n}{\partial V}\,\mathrm{d}V\right)w_n\right] + \sum E_n\,\mathrm{d}w_n .$$

Hustota energie n-tého stavu odpovídá tlaku generovanému n-tým stavem (až na znaménko). V mechanice je tlak hustotou energie: $p = \Delta F/\Delta S = \Delta F\,\Delta l/(\Delta S\,\Delta l) = -\Delta E/\Delta V$.

Znaménko se volí záporné (síla je minus gradient energie). V druhém výrazu použijeme geniální trik, energii E_n vyjádříme pomocí pravděpodobnosti (3.46):

$$\mathrm{d}U = -\sum\left(p_n w_n \mathrm{d}V\right) + \sum\left(\frac{\alpha}{\beta} - \frac{1}{\beta}\ln w_n\right)\mathrm{d}w_n \,.$$

V součtech ponecháme jen výrazy, přes které se opravdu sčítá, ostatní členy vytkneme:

$$\mathrm{d}U = -\sum\left(p_n w_n\right)\mathrm{d}V + \frac{\alpha}{\beta}\,\mathrm{d}\sum w_n - \frac{1}{\beta}\sum\left(\ln w_n\,\mathrm{d}w_n\right).$$

V prvním výrazu je střední hodnota parciálních tlaků rovna celkovému tlaku. V druhém výrazu je součet všech pravděpodobností roven jedné a diferenciál jednotky je nulový. Třetí výraz upravíme podle vztahu $f\,\mathrm{d}g = \mathrm{d}\,(fg) - g\,\mathrm{d}f$:

$$\mathrm{d}U = -\,p\,\mathrm{d}V - \frac{1}{\beta}\,\mathrm{d}\sum\left(w_n \ln w_n\right) + \frac{1}{\beta}\sum\left(w_n\ \mathrm{d}\ln w_n\right).$$

Nyní ukažme, že poslední výraz je nulový:

$$\sum\left(w_n\,\mathrm{d}\ln w_n\right) = \sum\left(w_n \frac{1}{w_n}\mathrm{d}w_n\right) = \sum \mathrm{d}w_n = \mathrm{d}\sum w_n = \mathrm{d}\,1 = 0\,.$$

Ze statistických úvah jsme tak konečně dostali výraz pro diferenciál energie, který můžeme porovnat s první větou termodynamickou $\mathrm{d}U = -p\mathrm{d}V + T\mathrm{d}S$:

$$\mathrm{d}U = -\,p\,\mathrm{d}V - \frac{1}{\beta}\,\mathrm{d}\sum\left(w_n \ln w_n\right). \tag{3.49}$$

Je zřejmé, že koeficient β musí být úměrný převrácené hodnotě absolutní teploty a suma v druhém výrazu entropii. To platí až na libovolný multiplikativní koeficient, který musí být určen experimentálně:

► $$\beta = 1/\left(k_{\mathrm{B}}T\right), \tag{3.50}$$

► $$S = -k_{\mathrm{B}}\sum\left(w_n \ln w_n\right). \tag{3.51}$$

Poznámka 1: Tak jako v každé fyzikální teorii je i ve statistice jedna volitelná konstanta k_{B}. Nazýváme ji Boltzmannova konstanta a volbou její hodnoty můžeme vytvářet různé statistické teorie. Jen jedna z nich bude ale odpovídat reálné přírodě. Jde o stejnou situaci, jakou jsme poznali v kvantové teorii při zavedení Planckovy konstanty. Po porovnání prvních odvozených vztahů (například stavové rovnice ideálního plynu) se skutečností zjistíme hodnotu Boltzmannovy konstanty

$$k_{\mathrm{B}} = 1{,}38\times10^{-23}\ \mathrm{J\,K^{-1}}. \tag{3.52}$$

Poznámka 2: Navíc jsme získali statistický výraz pro entropii (3.51), který středuje logaritmus pravděpodobnosti n-tého stavu. Z hlediska statistiky je až na konstanty entropie rovna střední hodnotě logaritmu pravděpodobnosti:

$$S = -k_{\mathrm{B}}\left\langle \ln w \right\rangle. \tag{3.53}$$

Poznámka 3: Vztah mezi entropií a pravděpodobností realizace systému odvodil již Ludwig Boltzmann a je znám jako Boltzmannova rovnice ve tvaru

$$S = -k_\mathrm{B} \ln P\,. \tag{3.54}$$

Možná vás překvapí znaménko minus ve vztahu pro entropii. Uvědomíme-li si, že je pravděpodobnost normovaná k jedné, tj. každá dílčí pravděpodobnost je menší než jedna, je logaritmus pravděpodobnosti záporný. Znaménko minus před vztahem tedy zajišťuje nezápornou hodnotu entropie. Porovnáním s první větou termodynamickou jsme zjistili význam koeficientu β v pravděpodobnostním rozdělení. Dalšími úpravami statistické definice entropie a opětovným porovnáním s termodynamikou získáme ještě význam koeficientu α:

$$S = -k_\mathrm{B} \sum \left[w_n \ln w_n \right].$$

Za $\ln w_n$ dosadíme ze vztahu $w_n = \mathrm{e}^{\alpha - \beta E_n} \;\Rightarrow\; \ln w_n = \alpha - \beta E_n$, proto platí

$$S = -\,k_\mathrm{B} \sum \left[w_n (\alpha - \beta E_n) \right] =$$

$$= -\,k_\mathrm{B} \alpha \sum w_n \;+\; k_\mathrm{B} \beta \sum E_n \, w_n =$$

$$= -k_\mathrm{B}\, \alpha + k_\mathrm{B} \beta U\,.$$

Snadno nyní určíme neznámý koeficient α:

$$\alpha = \frac{-S + k_\mathrm{B} \beta U}{k_\mathrm{B}} = \frac{-S + U/T}{k_\mathrm{B}} =$$

$$= \frac{U - TS}{k_\mathrm{B} T} = \frac{F}{k_\mathrm{B} T}\,.$$

Získali jsme tak hodnoty obou koeficientů:

► $$\alpha = \frac{F}{k_\mathrm{B} T}; \quad \beta = \frac{1}{k_\mathrm{B} T}\;. \tag{3.55}$$

Pravděpodobnostní rozdělení tedy je (pro spojitý i diskrétní případ):

► $$\rho(E) = \mathrm{e}^{\frac{F-E}{k_\mathrm{B} T}}; \quad w_n(E) = \mathrm{e}^{\frac{F-E_n}{k_\mathrm{B} T}}\,. \tag{3.56}$$

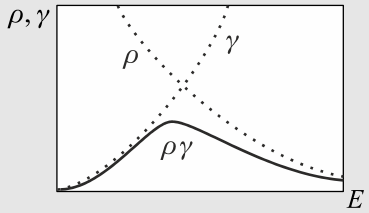
Často výrazy zkracujeme právě pomocí koeficientu $\beta = 1/k_\mathrm{B} T$:

► $$\rho(E) = \mathrm{e}^{\beta(F-E)}; \quad w_n(E) = \mathrm{e}^{\beta(F-E_n)}\,. \tag{3.57}$$

Odvozené vztahy se nazývají Gibbsovo kanonické rozdělení. Je pojmenováno podle významného amerického fyzika Josiaha Gibbse (1839–1903), který se zabýval termodynamikou a statistickou fyzikou. Mimo jiné také zformuloval známé Gibbsovo pravidlo fází platné při změně skupenství. V kvantové teorii máme místo hustoty pravděpodobnosti operátor hustoty

$$\hat{\rho} = \exp[\beta(F - \hat{H})]\,. \tag{3.58}$$

Poznámka: Ve výrazu pro pravděpodobnost $\mathrm{d}w = \rho \mathrm{d}\Gamma = \rho\gamma\,\mathrm{d}E$ je hustota pravděpodobnosti ρ exponenciálně klesající funkcí energie. Naopak hustota energetických stavů γ s rostoucí energií roste. Výsledná hustota pravděpodobnosti proto má maximum v okolí určité charakteristické energie, která je v systému zastoupena s největší pravděpodobností.



Obr. 100: Hustota pravděpodobnosti a hustota stavů.

3.3.3 Partiční suma a její význam

Nyní známe obě dvě konstanty rozdělení a z normovací podmínky můžeme určit volnou energii. A to je právě klíč k úspěchu. Známe-li volnou energii, můžeme jejím derivováním zjistit mnoho informací o systému, například stavovou rovnici. Výpočet volné energie provedeme paralelně v diskrétním i spojitém případě, abyste oba postupy mohli porovnat. V levé části bude diskrétní výpočet, v pravé spojitý:

$$\sum w_n = 1 \quad \Rightarrow$$
$$\sum \mathrm{e}^{\beta(F-E_n)} = 1 \quad \Rightarrow$$
$$\sum \mathrm{e}^{-\beta E_n} = \mathrm{e}^{-\beta F} \quad \Rightarrow$$
$$\ln\left(\sum \mathrm{e}^{-\beta E_n}\right) = -\beta F \quad \Rightarrow$$
$$F = -k_\mathrm{B} T \ln\left(\sum \mathrm{e}^{-\beta E_n}\right);$$

$$\int \rho\,\mathrm{d}\Gamma = 1 \quad \Rightarrow$$
$$\int \mathrm{e}^{\beta(F-E)}\,\mathrm{d}\Gamma = 1 \quad \Rightarrow$$
$$\int \mathrm{e}^{-\beta E}\,\mathrm{d}\Gamma = \mathrm{e}^{-\beta F} \quad \Rightarrow$$
$$\ln\left(\int \mathrm{e}^{-\beta E}\,\mathrm{d}\Gamma\right) = -\beta F \quad \Rightarrow$$
$$F = -k_\mathrm{B} T \ln\left(\int \mathrm{e}^{-\beta E}\,\mathrm{d}\Gamma\right).$$

Veličina nacházející se v logaritmu v kulaté závorce se nazývá *partiční funkce* (partiční suma, stavová suma) a je ústřední veličinou statistické fyziky, označujeme ji Z. Vzhledem k tomu, že argument logaritmu by měl být bezrozměrný, je použití váhového faktoru namísto fázového objemu vhodnější. V podstatě každý statistický výpočet začíná určením partiční (stavové) sumy. Popišme si nyní základní konstrukci statistického výpočtu:

Schéma statistického výpočtu

1) Zjistíme, jakých energií E_n může systém nabývat. V klasickém případě jde vždy o všechny hodnoty energií, které se v systému mohou vyskytnout. V kvantovém případě musíme určit spektrum Hamiltonova operátoru (například řešit Schrödingerovu rovnici).

2) Nalezneme partiční funkci Z jako součet tzv. Boltzmannových faktorů $\mathrm{e}^{-\beta E}$ přes celý obor energetického spektra:

$$Z = \sum \mathrm{e}^{-\beta E_n} \; ; \qquad \text{resp.} \qquad Z = \int \mathrm{e}^{-\beta E} \, \mathrm{d}\Gamma \, . \tag{3.59}$$

Právě tento krok může být komplikovaný. Často se řeší grafickými či numerickými metodami. Je třeba sečíst skutečně možnosti a na žádnou nezapomenout.

3) Logaritmováním nalezneme volnou energii *F*, stěžejní statistickou veličinu:

$$F = -k_\mathrm{B} T \ \ln Z \, . \tag{3.60}$$

4) Ze znalosti volné energie určíme entropii a tlak (stavovou rovnici) systému podle vztahu (3.10):

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right), \qquad p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right). \tag{3.61}$$

5) Určíme další odvozené veličiny, tj. vnitřní energii a její derivace (například měrná tepla, susceptibilitu atd.). Výchozím bodem může být Gibbsova-Helmholtzova rovnice (3.11) pro výpočet vnitřní energie ze známé volné energie

$$U = F + TS = F - T\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right). \tag{3.62}$$

Význam partiční sumy:

- Partiční suma je součtem všech Boltzmannových faktorů přes možné hodnoty energie (diskrétním či spojitým)

$$Z = \sum \mathrm{e}^{-\beta E_n} \; ; \qquad \text{resp.} \qquad Z = \int \mathrm{e}^{-\beta E} \, \mathrm{d}\Gamma \, .$$

- V kvantové teorii lze partiční sumu zapsat pomocí operátoru energie:

$$Z = \sum \mathrm{e}^{-\beta E_n} = \sum_n \langle n | \mathrm{e}^{-\beta \hat{H}} | n \rangle = \mathrm{Tr}\left(\mathrm{e}^{-\beta \hat{H}}\right),$$

kde symbol Tr() znamená stopu (součet diagonálních prvků v nějaké reprezentaci) funkce operátoru uvedeného v závorce. Výsledný výraz je znám jako Slaterova rovnice. Je pojmenovaná podle význačného amerického fyzika Johna Clarka Slatera (1900–1976), který se zabýval především kvantovou teorií.

- Partiční suma má jednoznačný vztah k volné energii a můžeme ji určit z experimentálního měření volné energie:

$$F = -k_\mathrm{B} T \ \ln Z \qquad \Rightarrow \qquad Z = \mathrm{e}^{-\beta F} \, .$$

- Partiční suma je převrácenou hodnotou normovací konstanty v pravděpodobnostním rozdělení, stačí dosadit za *F* z předchozího vztahu:

$$\rho(E) = \mathrm{e}^{\beta(F-E)} = \frac{1}{Z} \mathrm{e}^{-\beta E} \; ; \qquad w_n(E) = \mathrm{e}^{\beta(F-E_n)} = \frac{1}{Z} \mathrm{e}^{-\beta E_n} \; .$$

- Partiční suma je Laplaceovým obrazem hustoty energetických stavů $\gamma(E)$:

$$Z = \int \mathrm{e}^{-\beta E}\,\mathrm{d}\Gamma = \int_0^\infty \mathrm{e}^{-\beta E}\,\gamma(E)\,\mathrm{d}E\ .$$

  Naopak, známe-li partiční sumu (například z experimentálního změření volné energie), dostaneme po provedení inverzní Laplaceovy transformace hustotu energetických stavů:

$$\gamma(E) = \frac{1}{2\pi\,\mathrm{i}} \int_{\sigma-\mathrm{i}\infty}^{\sigma+\mathrm{i}\infty} \mathrm{e}^{\beta E}\,Z(\beta)\,\mathrm{d}\beta\ .$$

Shrňme jednotlivé významy partiční sumy:

$$\begin{aligned} Z &= \sum \mathrm{e}^{-\beta E_n}\ ; \\ Z &= \mathrm{Tr}\ \mathrm{e}^{-\beta \hat{H}}\ ; \\ Z &= \mathrm{e}^{-\beta F}\ ; \\ Z &= \frac{1}{K}\ ; \\ Z &= \mathscr{L}_\beta\,(\gamma)\ . \end{aligned} \qquad (3.63)$$

Nyní již víme vše, co je třeba k zahájení a někdy i k úspěšnému dokončení statistického výpočtu. V příští kapitole se s tímto postupem seznámíme na jednoduchých příkladech.

◖ Příklad 52: maximum kanonického rozdělení
Dokažte, že kanonické rozdělení má maximum při $E_n = \langle E \rangle$.

Řešení: Uvažujme diskrétní kanonické rozdělení $w_n(\beta) = A \exp[-\beta E_n]$. Z normovací podmínky nalezneme normovací konstantu A:

$$\sum w_k = 1 \quad \Rightarrow \quad A = \frac{1}{\sum_k \mathrm{e}^{-\beta E_k}} \quad \Rightarrow \quad w_n = \frac{\mathrm{e}^{-\beta E_n}}{\sum_k \mathrm{e}^{-\beta E_k}}\ .$$

Tak, jak už víme z dřívějška, je normovací konstanta rovna převrácené hodnotě partiční sumy. Nyní najdeme podmínku pro maximum vzhledem k parametru β:

$$\frac{\partial w_n}{\partial \beta} = 0 \quad \Rightarrow \quad E_n = \sum_k E_k\, w_k \quad \Rightarrow \quad E_n = \langle E \rangle\ .$$

Nejvíce je v systému zastoupen stav odpovídající střední hodnotě energie. ◗

3.4 Jednoduché příklady

3.4.1 Ideální plyn

Nyní provedeme poprvé kompletní statistický výpočet podle postupu z kapitoly 3.3.3. Systémem bude N stejných klasických částic, které neinteragují ani vzájemně, ani s okolím (potenciální energie je nulová). Souborem by bylo mnoho těchto systémů (systémem je například nádoba naplněná plynem, souborem je mnoho těchto nádob). Rozhodli jsme se tedy popisovat nádobu jako celek, to nám umožní například zjistit tlak v této nádobě. Postupujme nyní přesně podle dříve uvedeného schématu:

1) Energetické spektrum. Energie systému může nabývat libovolné nezáporné hodnoty a je dána pouze součtem kinetických energií všech částic:

$$E = \sum_{a=1}^{N} \frac{\mathbf{p}_a^2}{2m}.$$

2) Partiční funkce. Nalezneme partiční funkci jako součet (v tomto případě spojitý, tedy integrál) všech Boltzmannových faktorů:

$$Z = \int \mathrm{e}^{-\beta E}\,\mathrm{d}\Gamma = \int \exp\left[-\sum_{a=1}^{N}\frac{\mathbf{p}_a^2}{2mk_\mathrm{B}T}\right]\frac{\mathrm{d}^{3N}x\,\mathrm{d}^{3N}p}{(2\pi\hbar)^{3N}} =$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N}}\,V^N \int \exp\left[-\sum_{a=1}^{N}\frac{\mathbf{p}_a^2}{2mk_\mathrm{B}T}\right]\mathrm{d}^{3N}p =$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N}}\,V^N \left(\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\frac{\xi^2}{2mk_\mathrm{B}T}\right]\mathrm{d}\xi\right)^{3N} =$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N}}\,V^N \left(\sqrt{2\pi mk_\mathrm{B}T}\right)^{3N}.$$

kde jsme rozepsali do složek jednotlivé hybnosti, $3N$ součtů v argumentu exponenciály jsme převedli na součin exponenciál. Integrál se tak stal součinem $3N$ stejných integrálů Gaussova typu (G4). Výsledná partiční suma tedy je

$$Z(T,V,N) = a^N\,V^N T^{3N/2}\,;$$
$$a \equiv (2\pi mk_\mathrm{B})^{3/2}/(2\pi\hbar)^3. \tag{3.64}$$

3) Volná energie. Volnou energii snadno určíme ze vztahu (3.60):

$$F(T,V,N) = -k_\mathrm{B}T\ln Z = -Nk_\mathrm{B}T\ln\left(a\,VT^{3/2}\right).$$

4) Termodynamické veličiny. Určíme nyní entropii a tlak (stavovou rovnici) jako parciální derivace (3.10) volné energie. Chemický potenciál je vzhledem ke konstantnímu počtu částic nepotřebný.

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right) = +Nk_{\mathrm{B}} \ln\left(aVT^{3/2}\right) + \frac{3Nk_{\mathrm{B}}}{2}, \tag{3.65}$$

$$p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right) = \frac{N k_{\mathrm{B}} T}{V}. \tag{3.66}$$

Provedeme-li limitní přechod k nulové teplotě (tedy k absolutní nule), bude první část ve vztahu (3.65) pro entropii divergovat k $-\infty$. To je dáno tím, že v oblasti nízkých teplot selhává klasický výpočet a bylo by třeba provést výpočet kvantový. Po takovém výpočtu by se první část výrazu s klesající teplotou blížila k nule. První část výrazu (3.65) závisí prostřednictvím koeficientu a na Planckově konstantě. To je proto, že Planckova konstanta určuje velikost jednoho stavu ve fázovém prostoru a entropie jako statistická veličina souvisí s pravděpodobností výskytu určitého stavu. Druhá část vztahu pro entropii má charakter integrační konstanty $S_0 = 3Nk_{\mathrm{B}}/2$, která je hodnotou entropie při teplotě absolutní nuly (její nenulová hodnota je mimo jiné předmětem třetí věty termodynamické, o které jsme se nezmiňovali). Povšimněte si, že velikost entropie je úměrná počtu částic. To je logické, jde o tepelnou energii vynásobenou integračním faktorem a energie je v počtu částic aditivní. Entropii budeme věnovat samostatnou kapitolu později.

Druhý odvozený vztah (3.66) je stavovou rovnicí ideálního plynu ($pV = Nk_{\mathrm{B}}T$) a na Planckově konstantě samozřejmě nemůže záviset. Tlak je v tomto vztahu klasickým projevem nekvantového plynu. Uveďme i alternativní vyjádření pro stavovou rovnici:

$$p = \frac{Nk_{\mathrm{B}}T}{V}; \tag{3.67}$$

$$p = nk_{\mathrm{B}}T; \qquad n \equiv \frac{N}{V}. \tag{3.68}$$

Veličinu n nazýváme koncentrace částic. Stavová rovnice se někdy vyjadřuje i za pomoci univerzální plynové konstanty, pro naše účely nebude takové vyjádření nutné.

5) Vnitřní energie. Vnitřní energii bychom mohli určit přímou integrací z její definice, tj. $U = \langle E \rangle = \int E \, \mathrm{d}w$, ale rychlejší je využít definici volné energie $F = U - TS$:

$$U = F + TS =$$

$$= -Nk_{\mathrm{B}}T \ln\left(aVT^{3/2}\right) + \frac{3Nk_{\mathrm{B}}T}{2} + Nk_{\mathrm{B}}T \ln\left(aVT^{3/2}\right) = \frac{3}{2}Nk_{\mathrm{B}}T$$

Výsledek tedy je

$$U = \frac{3}{2}Nk_{\mathrm{B}}T; \qquad u \equiv \frac{U}{N} = \frac{3}{2}k_{\mathrm{B}}T, \tag{3.69}$$

kde u je energie jedné částice. Vnitřní energie opět nezávisí na Planckově konstantě, povšimněte si, že každý stupeň volnosti systému přispívá k vnitřní energii hodnotou $k_{\mathrm{B}}T/2$. Toto tvrzení je známo jako *ekvipartiční teorém*.

Na závěr vypišme všechny odvozené vztahy pro ideální plyn:

$$Z = a^N\, V^N T^{3N/2}; \qquad a = \left(\frac{mk_\mathrm{B}}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2},$$

$$F = -Nk_\mathrm{B}T \ln\left(a\, VT^{3/2}\right),$$

$$S = \frac{3Nk_\mathrm{B}}{2} + Nk_\mathrm{B} \ln\left(a\, V\, T^{3/2}\right), \tag{3.70}$$

$$p = \frac{Nk_\mathrm{B}T}{V},$$

$$U = \frac{3}{2}\, Nk_\mathrm{B}T\,.$$

Poznámka: Zpravidla se výpočet partiční sumy provádí jen pro systém s jednou jedinou částicí. Partiční sumu jedné částice označujeme malým písmenem *z*. Jak je z výpočtu vidět, budeme-li mít *N* nezávislých částic, bude celková partiční suma součinem integrálů partičních sum jednotlivých částic. Pro identické nekvantové částice proto platí

$$Z = z_1\, z_2 \ldots z_N = z^N\,. \tag{3.71}$$

Partiční suma je multiplikativní v počtu částic, volná energie, entropie, tlak a vnitřní energie jsou naopak aditivní veličiny.

3.4.2 Částice ve vnějším poli

Prozkoumejme nyní vlastnosti hustoty pravděpodobnosti částice ve vnějším potenciálním poli $V(x, y, z)$. Souborem je mnoho takovýchto částic. Fázovým prostorem bude *n*-tice souřadnic a hybností (x, y, z , p_x, p_y, p_z). Energie systému má tvar

$$E = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V(x, y, z)\,.$$

Element pravděpodobnosti bude

$$\mathrm{d}w = \rho\, \mathrm{d}\phi = \mathrm{e}^{\beta(F-E)}\, \mathrm{d}^3x\, \mathrm{d}^3p = K\, \mathrm{e}^{-\beta E}\, \mathrm{d}^3x\, \mathrm{d}^3p\,.$$

Pokud bychom namísto fázového prostoru využili váhový prostor, budeme mít

$$\mathrm{d}w = \rho\, \mathrm{d}\Gamma = \mathrm{e}^{\beta(F-E)}\, \frac{\mathrm{d}^3x\, \mathrm{d}^3p}{(2\pi\hbar)^3} = \tilde{K}\, \mathrm{e}^{-\beta E}\, \mathrm{d}^3x\, \mathrm{d}^3p\,.$$

Z toho je patrné, že obě vyjádření vedou na stejný finální vztah, normovací konstantu musíme v obou případech určit z podmínky $\int \mathrm{d}w = 1$. Po dosazení za energii získáváme výsledné pravděpodobnostní rozdělení:

$$\mathrm{d}w(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = K \exp\left[-\beta\left(\frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V(x, y, z)\right)\right] \mathrm{d}^3x\, \mathrm{d}^3p\,. \tag{3.72}$$

Vzhledem k vlastnostem exponenciální funkce vidíme, že výsledek lze napsat jako součin pravděpodobnosti pro souřadnice a pro hybnosti, tj. rozdělení souřadnic a hybností je nezávislé

$$\mathrm{d}w = \mathrm{d}w_1(\mathbf{x})\,\mathrm{d}w_2(\mathbf{p})\,;$$

$$\mathrm{d}w = K_1 \exp\left[-\frac{V(x,y,z)}{k_\mathrm{B}T}\right]\mathrm{d}^3x \times K_2 \exp\left[-\frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2mk_\mathrm{B}T}\right]\mathrm{d}^3p\,.$$

V případě vhodného tvaru potenciální energie se může rozdělení rozpadnout dokonce i na násobky pravděpodobností v jednotlivých osách. Pro hybnosti to jde vždy automaticky. V dalším textu budeme obě pravděpodobnosti probírat odděleně, proto je budeme značit jediným symbolem dw.

$$\mathrm{d}w(\mathbf{p}) = \mathrm{d}w(p_x)\;\;\mathrm{d}w(p_y)\;\;\mathrm{d}w(p_z)\,;$$

$$\mathrm{d}w(\mathbf{p}) = K_x \exp\left[-\frac{p_x^2}{2mk_\mathrm{B}T}\right]\mathrm{d}p_x \times K_y \exp\left[-\frac{p_y^2}{2mk_\mathrm{B}T}\right]\mathrm{d}p_y \times K_z \exp\left[-\frac{p_z^2}{2mk_\mathrm{B}T}\right]\mathrm{d}p_z\,.$$

Všechny tři elementy pravděpodobnosti jsou dány stejnou funkcí (exponenciálou), proto jsou pravděpodobnosti všech tří projekcí hybností shodné. Konstanty rozdělení můžeme snadno určit z normovací podmínky $\int \mathrm{d}w = 1$, která platí pro každou část rozdělení zvlášť.

Barometrická formule

Zabývejme se nyní rozdělením poloh částic v tíhovém poli $V = mgy$. Hmotnost jedné částice je m, výška nad povrchem y. Pravděpodobnost výskytu částice bude

$$\mathrm{d}w(x,y,z) = K \exp\left[-\frac{mgy}{k_\mathrm{B}T(y)}\right]\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z\,.$$

Je evidentní, že pravděpodobnost výskytu částice nezávisí na souřadnicích x, z, přes které můžeme integrovat a výsledek integrace zahrnout do normovací konstanty. Zůstane jen pravděpodobnost výskytu částice ve svislém směru:

$$\mathrm{d}w(y) = C \exp\left[-\frac{mgy}{k_\mathrm{B}T(y)}\right]\mathrm{d}y\,. \tag{3.73}$$

Hustota pravděpodobnosti výskytu částice dw/dy musí být úměrná počtu jedinců v dané oblasti fázového prostoru (v tomto případě jen v objemu), tedy koncentraci $n(y)$ částic nad zemí:

$$n(y) = n_0 \exp\left[-\frac{mgy}{k_\mathrm{B}T(y)}\right]. \tag{3.74}$$

Nyní již snadno určím tlak $p = nk_\mathrm{B}T$:

$$p(y) = n_0\, k_\mathrm{B}\, T(y) \exp\left[-\frac{mgy}{k_\mathrm{B}T(y)}\right]. \tag{3.75}$$

Jde o známou Boltzmannovu *barometrickou formuli*, která popisuje pokles tlaku částic s výškou v atmosféře. Známe-li teplotní profil atmosféry, snadno dopočteme výškový profil tlaku.

◖ Příklad 53: rotující válec
Určete hustotu plynu ve válci o poloměru R a délce L, který rotuje kolem své osy úhlovou rychlostí ω.

Řešení: Potenciální energii jedné rotující částice určíme jako záporně vzatou rotační energii ($T + V = \text{const}$)

$$V(r) = -\frac{J\omega^2}{2} = -\frac{mr^2\omega^2}{2}.$$

Z barometrické formule máme okamžitě koncentraci částic

$$n(r) = n_0 \exp\left[\frac{m r^2\omega^2}{2k_\mathrm{B}T}\right]. \qquad ◗$$

Boltzmannovo pravděpodobnostní rozdělení

Zabývejme se nyní rozdělením jedné složky hybnosti či rychlosti. Pro konkrétnost uvažujme projekci hybnosti či rychlosti do osy x, mohli bychom však zvolit libovolnou osu:

$$\mathrm{d}w(p_x) = K \exp\left[-\frac{p_x^2}{2mk_\mathrm{B}T}\right] \mathrm{d}p_x .$$

Určeme nejprve konstantu rozdělení z normovací podmínky. Integraci provedeme za pomoci vztahu (G4):

$$\int \mathrm{d}w(p_x) = 1 \qquad \Rightarrow$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} K \exp\left[-\frac{p_x^2}{2mk_\mathrm{B}T}\right] \mathrm{d}p_x = 1 \qquad \Rightarrow$$

$$K\sqrt{2\pi mk_\mathrm{B}T} = 1 \qquad \Rightarrow$$

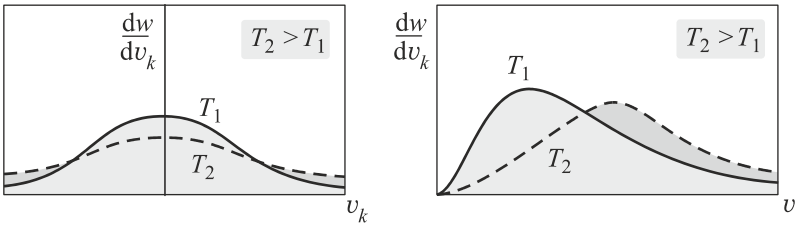
$$K = \frac{1}{\sqrt{2\pi mk_\mathrm{B}T}} .$$

Boltzmannovo rozdělení v hybnostech či rychlostech má tedy charakter Gaussova balíku $y = A \exp(-\alpha x^2)$:

► $$\mathrm{d}w(p_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi mk_\mathrm{B}T}} \exp\left[-\frac{p_x^2}{2mk_\mathrm{B}T}\right] \mathrm{d}p_x ; \qquad (3.76)$$

► $$\mathrm{d}w(v_x) = \frac{m}{\sqrt{2\pi mk_\mathrm{B}T}} \exp\left[-\frac{mv_x^2}{2k_\mathrm{B}T}\right] \mathrm{d}v_x . \qquad (3.77)$$

Nejpravděpodobnější projekcí hybnosti nebo rychlosti je nulová hodnota, to je dáno chaotičností pohybu. Čím vyšší je teplota, tím vyšší je podíl částic s vysokými rychlostmi. Kladné i záporné projekce jsou zastoupeny stejně, rozdělení je symetrické. Plocha pod rozdělením je vždy rovna jedné, tj. celkové pravděpodobnosti výskytu částice.



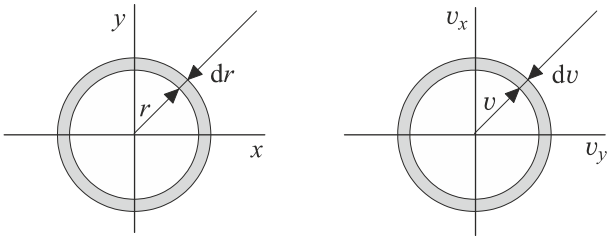
Obr. 101: Boltzmannovo rozdělení (nalevo)
a Maxwellovo rozdělení (napravo

Maxwellovo pravděpodobnostní rozdělení

V tomto odstavci se budeme zabývat rozdělením velikosti celkové rychlosti částice, tzv. Maxwellovým rozdělením. Nejprve napišme rozdělení ve všech třech rychlostech, které je součinem rozdělení v jednotlivých osách:

$$\mathrm{d}w(\mathbf{v}) = \mathrm{d}w(v_x)\,\mathrm{d}w(v_y)\,\mathrm{d}w(v_z) = \frac{m^3}{(2\pi m k_\mathrm{B} T)^{3/2}}\,\exp\left[-\frac{m\left(v_x^2+v_y^2+v_z^2\right)}{2k_\mathrm{B}T}\right]\mathrm{d}v_x\mathrm{d}v_y\mathrm{d}v_z\,.$$

Přejdeme-li v prostoru (x, y, z) k sférickým souřadnicím a přes úhlové proměnné integrujeme, zůstane jediná proměnná – vzdálenost od počátku r a objemový element bude $\mathrm{d}V = 4\pi r^2\,\mathrm{d}r$. Nyní provedeme tutéž operaci, ale v rychlostním prostoru, tj. s osami označenými (v_x, v_y, v_z). Výsledek je analogický: objemový element bude mít hodnotu $\mathrm{d}v_x\,\mathrm{d}v_y\,\mathrm{d}v_z = 4\pi v^2\mathrm{d}v$.



Obr. 102: Sférický element v rychlostním prostoru.

Nyní již můžeme napsat rozdělení ve velikostech rychlostí (Maxwellovo rozdělení)

$$\mathrm{d}w(v) = \frac{4\pi m^3}{(2\pi m k_\mathrm{B} T)^{3/2}}\,v^2\,\exp\left[-\frac{m v^2}{2k_\mathrm{B}T}\right]\mathrm{d}v\,. \qquad (3.78)$$

Jde o funkci typu $y = x^2\exp[-x^2]$, průběh vidíme na obrázku 101. Pravděpodobnost nalézt částici s konkrétní rychlostí má maximum závislé na teplotě. Je málo pravděpo-

dobné nalézt částici s nízkou i s vysokou rychlostí. U vysokých rychlostí pravděpodobnost nalezení částice s touto rychlostí exponenciálně klesá. Částice s vysokými rychlostmi z chvostu Maxwellova rozdělení mohou mít únikovou rychlost od Země a zemská atmosféra je ztrácí. Prohlédněte si hustotu pravděpodobnosti dw/dv na obrázku.

Typické rychlosti

Ze znalosti rozdělení můžeme snadno určit nejpravděpodobnější hodnotu rychlosti (při ní má rozdělení maximum), střední hodnotu velikosti rychlosti (dělí plochu pod křivkou rozdělení na dvě stejné poloviny) a střední kvadratickou rychlost (ta je důležitá pro určení středních kvadratických fluktuací, kterým budeme věnovat samostatnou kapitolu). Nejpravděpodobnější rychlost určíme jako maximum hustoty pravděpodobnosti:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v} v^2 \exp\left[-\frac{m v^2}{2k_\mathrm{B}T}\right] = 0 \qquad \Rightarrow \qquad v_0 = \sqrt{\frac{2k_\mathrm{B}T}{m}}\,.$$

Střední hodnotu velikosti rychlosti spočteme z definice, která vede na integrál typu (G3):

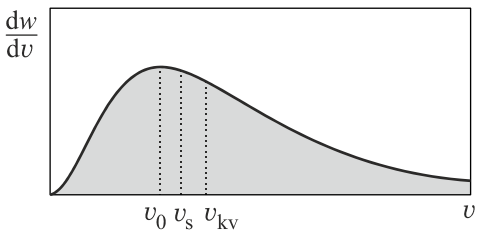
$$v_\mathrm{s} = \langle v \rangle = \int_0^\infty v\,\mathrm{d}w(v) = \frac{4\pi m^3}{(2\pi m k_\mathrm{B}T)^{3/2}} \int_0^\infty v^3 \exp\left[-\frac{m v^2}{2k_\mathrm{B}T}\right] \mathrm{d}v = \sqrt{\frac{8k_\mathrm{B}T}{\pi m}}\,.$$

Střední kvadratická hodnota vede na jednoduchý integrál typu (G2):

$$v_\mathrm{kv} = \sqrt{\langle v^2 \rangle} = \sqrt{\int_0^\infty v^2 \mathrm{d}w(v)} = \sqrt{\frac{4\pi m^3}{(2\pi m k_\mathrm{B}T)^{3/2}} \int_0^\infty v^4 \exp\left[-\frac{m v^2}{2k_\mathrm{B}T}\right] \mathrm{d}v} = \sqrt{\frac{3k_\mathrm{B}T}{m}}\,.$$

Všechny tři charakteristické rychlosti se liší nepatrně a jsou řádově shodné:

► $$v_0 = \sqrt{\frac{2\,k_\mathrm{B}T}{m}} \quad ; \qquad v_\mathrm{s} = \sqrt{\frac{8\,k_\mathrm{B}T}{\pi m}} \quad ; \qquad v_\mathrm{kv} = \sqrt{\frac{3\,k_\mathrm{B}T}{m}}\,. \tag{3.79}$$



Obr. 103: Nejpravděpodobnější, střední a kvadratická rychlost.

S rostoucí teplotou se hodnota střední rychlosti částic zvyšuje. Pomocí nejpravděpodobnější rychlosti, které se někdy říká tepelná rychlost, lze Boltzmannovo i Maxwellovo rozdělení jednoduše zapsat jako

$$\mathrm{d}w(\mathbf{v}) = C \exp\left[-\frac{\mathbf{v}^2}{v_0^2}\right] \mathrm{d}^3\mathbf{v}\,; \qquad \mathrm{d}w(v) = A v^2 \exp\left[-\left(\frac{v}{v_0}\right)^2\right] \mathrm{d}v\,. \tag{3.80}$$

3.4.3 Klasický oscilátor

Termodynamické veličiny

Za systém budeme nyní považovat soustavu N stejných nezávislých oscilátorů. Označme ε energii jednoho oscilátoru a z partiční sumu jednoho oscilátoru. Určeme tyto veličiny:

$$\varepsilon = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 + \frac{p^2}{2m} \ .$$

$$z = \int \exp\left[-\frac{m\omega^2 x^2}{2k_\mathrm{B}T} - \frac{p^2}{2mk_\mathrm{B}T} \right] \frac{\mathrm{d}x\,\mathrm{d}p}{2\pi\hbar} \qquad \Rightarrow$$

$$z = \frac{1}{2\pi\hbar} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{m\omega^2 x^2}{2k_\mathrm{B}T} \right] \mathrm{d}x \right) \left(\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{p^2}{2mk_\mathrm{B}T} \right] \mathrm{d}p \right) = \frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{2\pi k_\mathrm{B}T}{m\omega^2}} \sqrt{2\pi m k_\mathrm{B}T} \quad \Rightarrow$$

$$z = \frac{k_\mathrm{B}T}{\hbar\omega}; \qquad Z = \left(\frac{k_\mathrm{B}T}{\hbar\omega} \right)^N .$$

Povšimněte si, že partiční suma je bezrozměrná, je podílem tepelné energie a energie elementárního kvanta energie oscilátoru. Váhový prostor nám opět zanese Planckovu konstantu i do nekvantového výpočtu. V klasických veličinách Planckova konstanta přirozeným způsobem vymizí. Dále již jen určíme jednotlivé termodynamické veličiny:

$$F = -k_\mathrm{B}T \ln Z = -Nk_\mathrm{B}T \ln \frac{k_\mathrm{B}T}{\hbar\omega},$$

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = Nk_\mathrm{B} + Nk_\mathrm{B} \ln \frac{k_\mathrm{B}T}{\hbar\omega},$$

$$U = F + TS = Nk_\mathrm{B}T \ .$$

Partiční suma je opět multiplikativní v počtu částic, ostatní veličiny jsou aditivní. Entropie má opět konstantní člen a logaritmický člen, který diverguje v limitě $T \to 0$, protože klasický výpočet nelze na situaci v okolí absolutní nuly aplikovat. Zapišme přehledně dosažené výsledky pro klasický oscilátor:

$$Z = \left(\frac{k_\mathrm{B}T}{\hbar\omega} \right)^N ;$$

$$F = -Nk_\mathrm{B}T \ln \frac{k_\mathrm{B}T}{\hbar\omega}; \qquad (3.81)$$

$$S = Nk_\mathrm{B} + Nk_\mathrm{B} \ln \frac{k_\mathrm{B}T}{\hbar\omega};$$

$$U = Nk_\mathrm{B}T \ .$$

Pravděpodobnostní rozdělení

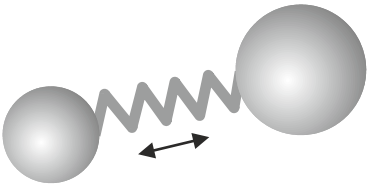
Napišme na závěr ještě pravděpodobnostní rozdělení v polohách a hybnostech klasického oscilátoru s určenými normovacími konstantami (normovací konstanty jsou převrácenou hodnotou odpovídající části partiční sumy):

$$\begin{aligned} \mathrm{d}w(x) &= \sqrt{\frac{m\omega^2}{2\pi k_\mathrm{B} T}}\, \exp\left[-\frac{m\omega^2 x^2}{2k_\mathrm{B}T}\right] \mathrm{d}x\,, \\ \mathrm{d}w(p) &= \sqrt{\frac{1}{2\pi m\, k_\mathrm{B} T}}\, \exp\left[-\frac{p^2}{2m\, k_\mathrm{B}T}\right] \mathrm{d}p\ . \end{aligned} \tag{3.82}$$

Obě rozdělení mají charakter Gaussova balíku a v principu jsou u souboru mnoha oscilátorů při dané teplotě možné i velmi velké výchylky z rovnovážné polohy a velké hybnosti. Jsou ale velmi nepravděpodobné. Povšimněte si, že na teplotě závisí jak amplituda, tak položířka Gaussova balíku.

3.5 Další příklady

3.5.1 Kvantový oscilátor (vibrátor)



Termodynamické veličiny

Problém jednoho harmonického oscilátoru je definován vztahy (2.50)

$$\hat{\mathbf{H}}\,|n\rangle = \varepsilon_n\,|n\rangle\,; \qquad \hat{\mathbf{H}} \equiv \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + \frac{1}{2}\; m\omega^2\hat{\mathbf{X}}^2.$$

Energetické spektrum harmonického oscilátoru (2.63) jsme odvodili několika způsoby (Schrödingerova, Diracova, Heisenbergova reprezentace):

$$\varepsilon_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\,, \qquad |n\rangle = \psi_n(\xi) = \alpha_n H_n(\xi)\,\mathrm{e}^{-\xi^2/2}\;; \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

Nezávislá proměnná a normovací koeficienty jsou dány vztahy

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\;\; x\,; \qquad \alpha_n = \frac{1}{\sqrt{\pi^{1/2}\;\; n!\;\; 2^n}}.$$

Nyní již můžeme přistoupit k výpočtu partiční funkce, nejprve pro jeden oscilátor:

$$z = \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left[-\frac{(n+\frac{1}{2})\hbar\omega}{k_{\mathrm{B}}T}\right] =$$

$$= \exp\left[-\frac{\hbar\omega}{2\,k_{\mathrm{B}}T}\right] \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left[-\frac{n\,\hbar\omega}{k_{\mathrm{B}}T}\right] =$$

$$= \exp\left[-\frac{\hbar\omega}{2\,k_{\mathrm{B}}T}\right] \sum_{n=0}^{\infty} \left[\exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_{\mathrm{B}}T}\right)\right]^n.$$

Zbylá řada je geometrická řada, kterou lze snadno sečíst za pomoci vztahu (G.11), exponentem je kvantové číslo n:

$$z = \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T}}}{1-\mathrm{e}^{-\frac{\hbar\omega}{k_\mathrm{B}T}}} = \frac{1}{\mathrm{e}^{+\frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T}} - \mathrm{e}^{-\frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T}}} = \frac{1}{2\,\mathrm{sh}\left(\frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T}\right)}.$$

Pro N nezávislých oscilátorů je partiční funkce příslušnou mocninou,

$$Z = 2^{-N}\,\mathrm{sh}^{-N}\left(\frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T}\right).$$

Nyní nalezneme standardním postupem volnou energii, entropii a vnitřní energii systému:

$$F = -k_\mathrm{B}T\ln Z = Nk_\mathrm{B}T\,\ln\left[2\,\mathrm{sh}\left(\frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T}\right)\right];$$

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = -Nk_\mathrm{B}\ln\left[2\,\mathrm{sh}\left(\frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T}\right)\right] + \frac{N\hbar\omega}{2T}\,\mathrm{cth}\,\frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T};$$

$$U = F + TS = \frac{N\hbar\omega}{2}\,\mathrm{cth}\,\frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T}.$$

Shrňme dosažené výsledky (místo teploty použijeme koeficient β):

$$\begin{aligned} &Z = 2^{-N}\,\mathrm{sh}^{-N}\left(\beta\hbar\omega/2\right);\\ &F = Nk_\mathrm{B}T\,\ln\left[2\,\mathrm{sh}\left(\beta\hbar\omega/2\right)\right];\\ &S = -Nk_\mathrm{B}\ln\left[2\,\mathrm{sh}\left(\beta\hbar\omega/2\right)\right] + \tfrac{1}{2}N\beta\hbar\omega k_\mathrm{B}\,\mathrm{cth}\,(\beta\hbar\omega/2);\\ &U = \frac{N\hbar\omega}{2}\,\mathrm{cth}\,(\beta\hbar\omega/2). \end{aligned} \qquad (3.83)$$

Poslední vztah pro vnitřní energii odvodil Albert Einstein v roce 1906. V tomto kvantovém případě již entropie pro $T \to 0$ nediverguje. Nalezněme střední energii soustavy harmonických oscilátorů v limitě nízkých a vysokých teplot:

1) $T \to 0$: $\qquad U = \lim_{T\to 0}\frac{N\hbar\omega}{2}\,\mathrm{cth}\,(\beta\hbar\omega/2) = N\frac{\hbar\omega}{2}.$

2) $k_\mathrm{B}T \gg \hbar\omega$: $\qquad U = \frac{N\hbar\omega}{2}\,\mathrm{cth}\,(\beta\hbar\omega/2) \to \frac{N\hbar\omega}{2}\frac{2}{\beta\hbar\omega} = Nk_\mathrm{B}T.$

Případ nízkých teplot je ryze kvantový. Při absolutní nule jsou všechny oscilátory v základním stavu a vnitřní energie je rovna počtu oscilátorů násobeným energií základního stavu. Při vysokých teplotách jde naopak o ryze klasický případ. Střední tepelná energie je podstatně větší než základní energetické kvantum a vnitřní energie je dána klasickým vztahem (3.81). Teplota, při které je střední tepelná energie rovna vibračnímu kvantu (argument exponenciál je roven jedné, $\hbar\omega \approx k_\mathrm{B}T$) se nazývá *vibrační teplota*,

označujeme ji T_V. Limita nízkých teplot znamená $T << T_V$, limita vysokých teplot znamená $T >> T_V$. Pro vibrační teplotu máme vztah

$$T_V = \frac{\hbar\omega}{k_B} \ . \tag{3.84}$$

Pro různé kvantové vibrátory (například vibrující molekuly či krystalovou mříž) jde o charakteristickou veličinu. Frekvence oscilací a tedy i vibrační teplota klesají s hmotností oscilujících jedinců. Například pro molekulu vodíku je vibrační teplota 6 100 K, zatímco pro hmotnější molekulu dusíku je vibrační teplota „jen" 3 340 K.

◖ Příklad 54: Morseův potenciál

Určete vibrační teplotu pro dvojici atomů, jejichž interakce je popsána Morseovým potenciálem (podle amerického fyzika Philipa Morseho) [42]

$$\begin{aligned} V(r) &= V_0 \left[1 - \mathrm{e}^{-\alpha(r-r_0)}\right]^2 = \\ &= V_0 - 2V_0\,\mathrm{e}^{-\alpha(r-r_0)} + V_0\,\mathrm{e}^{-2\alpha(r-r_0)} \ . \end{aligned} \tag{3.85}$$

Řešení: Nejprve určíme minimum potenciální energie tak, že první derivaci položíme rovnu nule. Snadno zjistíme, že minimum je v bodě $r = r_0$. Tuhost oscilací je při malých výchylkách z rovnovážné polohy rovna druhé derivaci potenciální energie v minimu (1.26). Z tuhosti oscilátoru určíme frekvenci:

$$\omega = \sqrt{V''(r_0)/m} \ .$$

Nyní již snadno odvodíme obecný vztah pro vibrační teplotu:

$$T_V = \frac{\hbar\omega}{k_B} = \frac{\hbar}{k_B}\sqrt{V''(r_0)/m} \ .$$

Z charakteristického průběhu potenciální energie lze snadno určit vibrační teplotu. V našem případě dostaneme po provedení derivací výsledný vztah

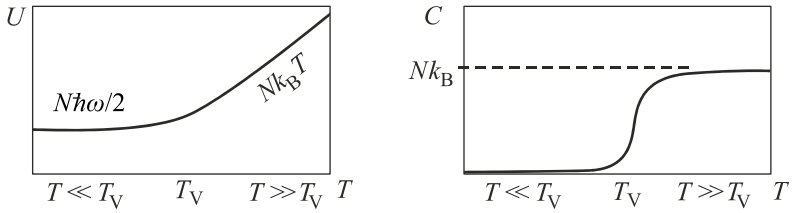
$$T_V = \frac{\hbar\omega}{k_B} = \frac{\hbar\alpha}{k_B}\sqrt{\frac{2V_0}{m}} \ .$$

◗

Určeme nyní tepelnou kapacitu soustavy harmonických oscilátorů

$$C \equiv \frac{\partial U}{\partial T} = Nk_B \left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right)^2 \mathrm{sh}^{-2}\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right). \tag{3.86}$$

Na následujících obrázcích jsou vykresleny vypočtené průběhy vnitřní energie a tepelné kapacity. Při nízkých teplotách je vnitřní energie dána nulovými kmity ($N\hbar\omega/2$), při vysokých teplotách je lineární funkcí teploty. K přechodu mezi oběma průběhy dochází v okolí vibrační teploty. Při nízkých teplotách vibrační stupně volnosti nepřispívají k tepelné kapacitě. Říkáme, že při teplotách výrazně nižších, než je vibrační teplota, jsou vibrační stupně volnosti „*zamrzlé*". Při vysokých teplotách přispívají vibrační stupně volnosti k měrnému teplu konstantní hodnotou.



Obr. 105: Průběh vnitřní energie a tepelné kapacity pro kvantový oscilátor.

Každý vibrační stupeň volnosti přidává při vysokých teplotách k tepelné kapacitě systému hodnotu k_B. V krystalických látkách je tepelná kapacita vztažená na počet vibrujících jedinců blízká hodnotě 3 k_B. Tento vztah v krystalech experimentálně objevili francouzští fyzici Pierre Louis Dulong (1785–1838) a Alexis Thérèse Petit (1791–1820) v roce 1819. Boltzmannovu konstantu můžeme interpretovat jako tepelnou kapacitu jednoho jednorozměrného harmonického oscilátoru. Poznamenejme, že u krystalických látek je pokojová teplota nad vibrační teplotou (na rozdíl od dvouatomárních plynů).

Pravděpodobnost nalezení vibrátoru v energetickém stavu

Pravděpodobnost je dána Boltzmannovým faktorem

$$w_n = C \exp\left[-\frac{(n+1/2)\hbar\omega}{k_B T}\right].$$

Normovací konstantu určíme buď z podmínky, že součet všech pravděpodobností je roven jedné, nebo si uvědomíme, že jde o převrácenou hodnotu partiční sumy. Výsledný vztah je:

► $$w_n = 2\,\mathrm{sh}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \mathrm{e}^{-\beta(n+1/2)\hbar\omega} \quad . \tag{3.87}$$

Opět proveďme rozbor v limitě nízkých a vysokých teplot:

1) $T \ll T_V$: $$w_n = \lim_{T\to 0} 2\,\mathrm{sh}\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \exp\left(-\frac{(n+1/2)\hbar\omega}{k_B T}\right) = \begin{cases} 1 & \text{pro } n = 0, \\ 0 & \text{pro } n \neq 0; \end{cases}$$

2) $T \gg T_V$: $$w_n = 2\,\mathrm{sh}\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \exp\left(-\frac{(n+1/2)\hbar\omega}{k_B T}\right) \to 2 \cdot \frac{\hbar\omega}{2k_B T} \cdot 1 = \frac{\hbar\omega}{k_B T}.$$

První případ je opět ryze kvantový a vidíme, že při absolutní nule je obsazen jen základní energetický stav. Druhý případ je naopak klasický. Při vysoké teplotě jsou všechny stavy zastoupeny rovnoměrně.

Pravděpodobnost nalezení vibrátoru v dané poloze

Výpočet hustoty pravděpodobnosti lze provést přímo (vlnové funkce jsou reálné)

$$\rho(x) = \langle x|\hat{\rho}|x\rangle = \langle x|\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}|x\rangle = \langle x|n\rangle\langle n|\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}|m\rangle\langle m|x\rangle = \sum_{n,m} \psi_n^* w_n \delta_{nm} \psi_m = \sum_n \psi_n^2 w_n.$$

Za vlnové funkce dosadíme příslušné Hermitovy polynomy a za pravděpodobnosti rozdělení v energetické reprezentaci (3.87). Je třeba „jen“ sečíst příslušnou řadu Hermitových polynomů, což není snadné. Jinou možností je nepřímý výpočet za pomoci triku, na který přišel švýcarsko-americký jaderný fyzik, jeden z ředitelů komplexu CERN a nositel Nobelovy ceny za fyziku, Felix Bloch (1905–1983). Využijeme působení operátorů $\hat{p}\hat{\rho}$ a $\hat{x}\hat{\rho}$ v x-reprezentaci a v Heisenbergově maticové reprezentaci:

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}x} = \sum_n 2\psi_n \frac{\mathrm{d}\psi_n}{\mathrm{d}x} w_n = \frac{2}{-\mathrm{i}\hbar} \sum_n \psi_n (-\mathrm{i}\hbar \partial \psi_n / \partial x) w_n = \frac{2\mathrm{i}}{\hbar} \sum_n \psi_n (\hat{P}\psi_n) w_n =$$

$$= \frac{2\mathrm{i}}{\hbar} \sum_{n,k} \psi_n P_{nk} \psi_k w_n = -\sum_{k=0}^{\infty} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \left(\sqrt{k+1}\,\psi_{k+1}\psi_k - \sqrt{k}\,\psi_{k-1}\psi_k \right) w_k =$$

$$= -\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \sum_{k=0}^{\infty} \sqrt{k+1} \left(w_k - w_{k+1} \right) \psi_{k+1}\psi_k =$$

$$= -\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \left(1 - \mathrm{e}^{-\beta\hbar\omega} \right) \sum_{k=0}^{\infty} \sqrt{k+1}\, w_k\, \psi_{k+1}\psi_k \,.$$

Při výpočtu jsme použili maticového rozpisu operátoru hybnosti podle kapitoly 2.3.3 a reálnost vlnových funkcí. Zcela analogicky budeme hledat působení operátoru $\hat{x}\hat{\rho}$:

$$x\rho = \langle x | \hat{x}\hat{\rho} | x \rangle = \langle x | \hat{x}\, \mathrm{e}^{-\beta\hat{H}} | x \rangle = \sum_{n,k} \psi_n \psi_k X_{nk} w_k =$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\sqrt{k+1}\,\psi_{k+1}\psi_k + \sqrt{k}\,\psi_{k-1}\psi_k \right) w_k =$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sum_{k=0}^{\infty} \sqrt{k+1} \left(w_k + w_{k+1} \right) \psi_{k+1}\psi_k =$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(1 + \mathrm{e}^{-\beta\hbar\omega} \right) \sum_{k=0}^{\infty} \sqrt{k+1}\, w_k\, \psi_{k+1}\psi_k \,.$$

Působení obou dvou operátorů vede na tutéž řadu. V tom právě tkví geniální Blochův trik. Vydělením obou získaných rovností se zbavíme nepříjemné řady a získáme jednoduchou rovnici

$$\frac{\dfrac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}x}}{x\rho} = -\frac{2m\omega}{\hbar} \frac{\left(1 - \mathrm{e}^{-\beta\hbar\omega} \right)}{\left(1 + \mathrm{e}^{-\beta\hbar\omega} \right)},$$

která vede na diferenciální rovnici v separovaném tvaru

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\rho} = -\frac{2m\,\omega}{\hbar} \,\mathrm{th}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2} \right) x\,\mathrm{d}x \,.$$

Řešení je snadné, integrační konstantu určíme jako vždy z normovací podmínky:

► $$\rho(x) = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}\,\exp\left[-\lambda x^2\right]; \qquad \lambda(T) \equiv \frac{m\omega}{\hbar}\,\mathrm{th}\left(\frac{\hbar\omega}{2k_\mathrm{B}T}\right). \tag{3.88}$$

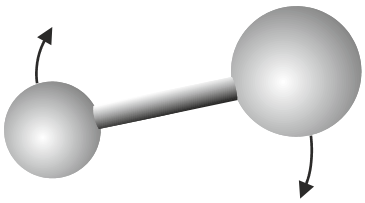
Tuto dnes slavnou formuli odvodil Felix v roce 1932. Formule má velký význam v teorii kmitů krystalové mříže. Odvoďme, tak jako v minulých případech, limitu při nízkých a vysokých teplotách:

$$1)\ T \ll T_\mathrm{V}: \qquad \rho(x) \to \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\,\exp\left[-\frac{m\omega x^2}{\hbar}\right] = \psi_0^2(x).$$

$$2)\ T \gg T_\mathrm{V}: \qquad \rho(x) \to \sqrt{\frac{m\omega^2}{2\pi k_\mathrm{B}T}}\,\exp\left[-\frac{m\omega^2 x^2}{2k_\mathrm{B}T}\right].$$

První případ odpovídá opět ryze kvantovému řešení, jde o hustotu pravděpodobnosti oscilátoru v základním kvantovém stavu. Případ vysokých teplot dává klasický výsledek (3.82).

3.5.2 Kvantový rotátor



Prozkoumejme nyní vlastnosti rotující částice s nenulovým momentem hybnosti **L** a nenulovým momentem setrvačnosti *J*. Může jít například o rotující dvouatomovou molekulu nebo nějaký podobný systém. Nejprve odvodíme partiční sumu pro systém tvořený jedinou molekulou. Standardní translační vztah $p^2/2m$ u rotačních pohybů přejde v analogický vztah $L^2/2J$:

$$\varepsilon = \frac{L^2}{2J} = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2J}; \qquad l = 0,1,2,...$$

Využili jsme vztah (2.149) pro kvantování velikosti momentu hybnosti. Nesmíme zapomenout, že každý takový energetický stav je degenerován, vyskytuje se $2l$+1 krát, jednotlivé stavy se stejnou energií se liší magnetickým kvantovým číslem, které nabývá hodnot $m = -l, -l+1, \ldots, 0, \ldots, l-1, l$. Proto v partiční sumě musíme každý Boltzmannův faktor vzít v úvahu tolikrát, kolikrát je daný stav degenerován:

$$z = \sum_{l=0}^{\infty} g_l \exp\left[-\frac{l(l+1)\hbar^2}{2J\,k_\mathrm{B}T}\right] = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\exp\left[-\frac{l(l+1)\hbar^2}{2J\,k_\mathrm{B}T}\right].$$

Poprvé se setkáváme s řadou, která není analyticky řešitelná. Tuto řadu můžeme sečíst jen numericky nebo v limitě nízkých či vysokých teplot. Oblast nízkých a vysokých teplot je dána argumentem exponenciály. Je-li argument roven jedné, dostáváme cha-

rakteristickou teplotu, při níž je tepelná energie rovna rotační energii. Vyjdeme-li ze vztahu $\hbar^2 \approx 2J\,k_\mathrm{B}T$, dostaneme pro tzv. *rotační teplotu* vztah

$$T_\mathrm{R} = \frac{\hbar^2}{2k_\mathrm{B}J}\ . \tag{3.89}$$

Rotační teplota je pro daný systém, podobně jako vibrační teplota, zcela charakteristickou veličinou. Hodnoty rotačních a vibračních teplot některých plynů naleznete v následující tabulce:

plyn	rotační teplota	vibrační teplota
H_2	85 K	6100 K
HCl	15 K	4140 K
N_2	3 K	3340 K
O_2	2 K	2230 K

Pokusme se sečíst řadu pro partiční sumu alespoň v limitě nízkých a vysokých teplot:

Nízké teploty

Při nízkých teplotách ($T \ll T_\mathrm{R}$) exponenciály v řadě s rostoucím l prudce klesají, členy řady velmi rychle konvergují, a proto stačí vzít v úvahu první dva členy řady:

$$z = 1 + 3\exp\left[-\frac{\hbar^2}{Jk_\mathrm{B}T}\right] = 1 + 3\exp\left(-2T_\mathrm{R}/T\right).$$

Standardním postupem určíme termodynamické veličiny v limitě nízkých teplot:

$$Z = \left[1 + 3\exp\left(-2T_\mathrm{R}/T\right)\right]^N,$$

$$F = -k_\mathrm{B}T\ln Z = -Nk_\mathrm{B}T\ln\left[1 + 3\exp\left(-2T_\mathrm{R}/T\right)\right].$$

Druhý člen je malý, proto můžeme provést Taylorův rozvoj do prvního řádu $\ln(1+x) \sim x$ a pro volnou energii máme jednodušší formuli

$$F \approx -3Nk_\mathrm{B}T\exp\left(-2T_\mathrm{R}/T\right).$$

Nyní nalezneme entropii a vnitřní energii

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = 3Nk_\mathrm{B}\exp\left(-2T_\mathrm{R}/T\right) + 6Nk_\mathrm{B}\frac{T_\mathrm{R}}{T}\exp\left(-2T_\mathrm{R}/T\right),$$

$$U = F + TS = 6Nk_\mathrm{B}T_\mathrm{R}\exp\left(-2T_\mathrm{R}/T\right).$$

Vysoké teploty

Při vysokých teplotách ($T \gg T_\mathrm{R}$) je obsazeno mnoho stavů s velkým l a součet můžeme nahradit integrací:

$$z = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\exp\left[-l(l+1)\frac{T_\mathrm{R}}{T}\right] \approx \int_0^{\infty}(2x+1)\exp\left[-x(x+1)\frac{T_\mathrm{R}}{T}\right]\mathrm{d}x\,.$$

V integrálu provedeme substituci $\xi = x(x+1)$:

$$z \approx \int_0^\infty \exp\left[-\frac{T_\mathrm{R}}{T}\,\xi\right] \mathrm{d}\xi \;= \frac{T}{T_\mathrm{R}}\,.$$

Standardním postupem určíme termodynamické veličiny v limitě vysokých teplot:

$$Z = \left(T / T_\mathrm{R}\right)^N ,$$

$$F = -k_\mathrm{B} T \ln Z = -N k_\mathrm{B} T \ln\left(T/T_\mathrm{R}\right),$$

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = N k_\mathrm{B}\left[1 + \ln\left(T/T_\mathrm{R}\right)\right],$$

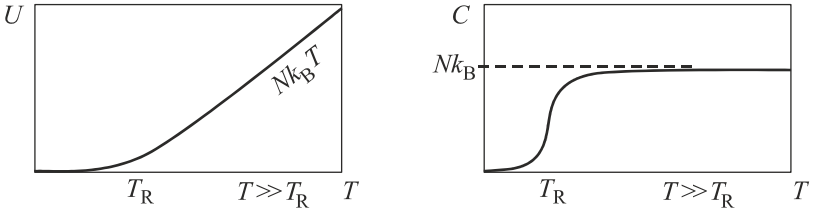
$$U = F + TS = N k_\mathrm{B} T\,.$$

Jak jsme mohli očekávat, dostáváme v limitě vysokých teplot klasické výsledky. Sepišme na závěr výsledky v limitě nízkých i vysokých teplot do přehledné tabulky:

$T \ll T_\mathrm{R}$	$T \gg T_\mathrm{R}$
$Z = \left[1 + 3\exp\left(-2T_\mathrm{R}/T\right)\right]^N$	$Z = \left(T / T_R\right)^N$
$F \doteq -3Nk_\mathrm{B} T \exp\left(-2T_\mathrm{R}/T\right)$	$F = -N k_\mathrm{B} T \ln\left(T/T_\mathrm{R}\right)$
$S = 3Nk_\mathrm{B} \exp\left(-2T_R / T\right) + +6Nk_\mathrm{B} \frac{T_\mathrm{R}}{T} \exp\left(-2T_\mathrm{R}/T\right)$	$S = Nk_\mathrm{B}\left[1 + \ln\left(T/T_\mathrm{R}\right)\right]$
$U = 6N k_\mathrm{B} T_\mathrm{R} \exp\left(-2T_\mathrm{R}/T\right)$	$U = N k_\mathrm{B} T$

(3.90)

Situace je obdobná jako u oscilátoru. Do rotační teploty není systém schopen absorbovat teplo. Jeho stupně volnosti jsou „*zamrzlé*“. Nad rotační teplotou přispívá k tepelné kapacitě každý rotátor hodnotou Boltzmannovy konstanty.



Obr. 107: Průběh vnitřní energie a tepelné kapacity pro kvantový rotátor.

U dvouatomárních molekul jsou rotační teploty podstatně nižší než vibrační. Při postupném zahřívání plynu se nejprve uvolní rotační stupně volnosti a teprve později vibrační stupně volnosti.

◖ **Příklad 55:** Určete nejpravděpodobnější rotační kvantové číslo pro kvantový rotátor (stav s nejvyšším zastoupením).

Řešení: Pravděpodobnost, že se systém nachází ve stavu s vedlejším kvantovým číslem l je dána výše odvozenou formulí

$$w_l = A(2l+1)\exp\left[-\frac{l(l+1)\hbar^2}{2J k_\mathrm{B} T}\right] = A(2l+1)\exp\left[-l(l+1)\frac{T_\mathrm{R}}{T}\right].$$

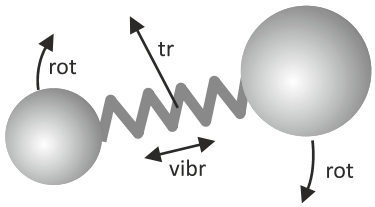
Při nízkých teplotách systém nerotuje, pravděpodobnost je téměř nulová. Při vysokých teplotách nalezneme standardním postupem maximum (s proměnnou l budeme zacházet jako se spojitou proměnnou):

$$\frac{\partial w_l}{\partial l} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad l_\mathrm{max} = \sqrt{\frac{T}{2T_\mathrm{R}}} - \frac{1}{2} \approx \sqrt{\frac{T}{2T_\mathrm{R}}}\,.$$

Z vypočteného vztahu můžeme zjistit typická vedlejší kvantová čísla rotujících molekul při dané teplotě. ◗

3.5.3 Dvouatomární plyn

Uvažujme nyní systém složený z N dvouatomových molekul s rozlišitelnými atomy (jinak bychom se museli zabývat symetrií vlnových funkcí). Tak se chová řada plynů. Energie jedné molekuly bude složena z translační energie, vibrační energie, rotační energie a energie dalších (například jaderných) stupňů volnosti.



Partiční suma pro jednu molekulu bude *součinem* partičních sum jednotlivých stupňů volnosti a termodynamické veličiny budou *součtem* odpovídajících členů:

$$\varepsilon = \varepsilon_\mathrm{tr} + \varepsilon_\mathrm{vib} + \varepsilon_\mathrm{rot} + \varepsilon_\mathrm{nuc} + \cdots \ .$$

$$z = \sum \mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon_\mathrm{tr}+\varepsilon_\mathrm{vib}+\varepsilon_\mathrm{rot}+\cdots)} =$$

$$= \int \mathrm{e}^{-\beta\varepsilon_\mathrm{tr}}\,\mathrm{d}\Gamma \cdot \sum \mathrm{e}^{-\beta\varepsilon_\mathrm{vib}} \cdot \sum \mathrm{e}^{-\beta\varepsilon_\mathrm{rot}} \ldots =$$

$$= z_\mathrm{tr} \cdot z_\mathrm{vib} \cdot z_\mathrm{rot} \cdots$$

Celková partiční suma pro N částic potom bude:

$$Z = z_\mathrm{tr}^N \cdot z_\mathrm{vib}^N \cdot z_\mathrm{rot}^N \cdots$$

Základní termodynamické veličiny jsou podle své definice aditivní a bude pro ně platit

$$F = -k_{\mathrm{B}}T \ln Z = F_{\mathrm{tr}} + F_{\mathrm{vib}} + F_{\mathrm{rot}} + \cdots \ ,$$
$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = S_{\mathrm{tr}} + S_{\mathrm{vib}} + S_{\mathrm{rot}} + \cdots \ ,$$
$$U = F + TS = U_{\mathrm{tr}} + U_{\mathrm{vib}} + U_{\mathrm{rot}} + \cdots \ ,$$
$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = C_{\mathrm{tr}} + C_{\mathrm{vib}} + C_{\mathrm{rot}} + \cdots \ .$$

Zkoumejme nyní příspěvek k tepelné kapacitě jednotlivých stupňů volnosti:

Translační stupně volnosti

$$U_{\mathrm{tr}} = \frac{3}{2} N k_{\mathrm{B}} T \quad \Rightarrow \quad c \equiv \frac{1}{N}\left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = \frac{3}{2} k_{\mathrm{B}} \ .$$

Translační stupně volnosti přispívají k měrné tepelné kapacitě plynu (tepelná kapacita vztažená na počet částic) konstantní hodnotou.

Vibrační stupně volnosti

$$U_{\mathrm{vib}} = \frac{N\hbar\omega}{2} \operatorname{cth}\left(\frac{\hbar\omega}{2k_{\mathrm{B}}T}\right) \quad \Rightarrow \quad c \equiv \frac{1}{N}\left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = k_{\mathrm{B}}\left(\frac{\hbar\omega}{2k_{\mathrm{B}}T}\right)^2 \operatorname{sh}^{-2}\left(\frac{\hbar\omega}{2k_{\mathrm{B}}T}\right).$$

Na následujících obrázcích jsou vykresleny vypočtené průběhy. Při nízkých teplotách je vnitřní energie dána nulovými kmity ($N\hbar\omega/2$), při vysokých teplotách je lineární funkcí teploty. K přechodu mezi oběma průběhy dochází v okolí vibrační teploty. Při nízkých teplotách vibrační stupně volnosti nepřispívají k měrnému teplu. Říkáme, že při teplotách výrazně nižších, než je vibrační teplota jsou vibrační stupně volnosti „*zamrzlé*“. Při vysokých teplotách přispívají vibrační stupně volnosti k měrnému teplu konstantní hodnotou. Provedeme-li limity malých a velkých teplot, dostaneme:

$$T \ll T_{\mathrm{V}} \quad \Rightarrow \quad U = N\hbar\omega/2 \ , \quad C = 0 \ , \quad c = 0 \ ;$$
$$T \gg T_{\mathrm{V}} \quad \Rightarrow \quad U = N k_{\mathrm{B}} T \ , \quad C = N k_{\mathrm{B}} \ , \quad c = k_{\mathrm{B}} .$$

Každý vibrační stupeň volnosti přidává při vysokých teplotách k tepelné kapacitě plynu hodnotu k_{B}. Jak už víme, Boltzmannovu konstantu můžeme interpretovat jako tepelnou kapacitu jedné vibrující molekuly.

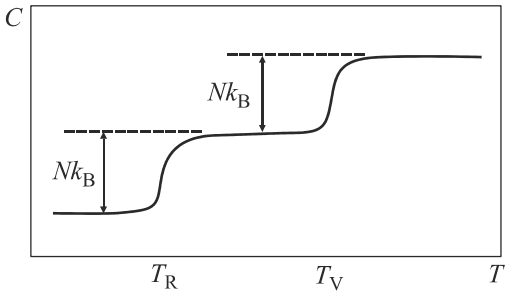
Rotační stupně volnosti

Pro rotační stupně volnosti neznáme analytický průběh vnitřní energie a tepelné kapacity při konstantním objemu. Známe ale hodnoty v limitě nízkých a vysokých teplot vzhledem k rotační teplotě, viz (3.90):

$$T \ll T_{\mathrm{R}} \quad \Rightarrow \quad U = 6N k_{\mathrm{B}} T_{\mathrm{R}} \exp\left(-2T_{\mathrm{R}}/T\right), \quad C \simeq 0 \ , \quad c \simeq 0 \ ;$$
$$T \gg T_{\mathrm{R}} \quad \Rightarrow \quad U = N k_{\mathrm{B}} T \ , \quad C = N k_{\mathrm{B}} \ , \quad c = k_{\mathrm{B}} \ .$$

Vidíme, že rotační stavy přispívají k měrnému teplu stejným způsobem jako vibrační stavy, příspěvek se projeví při teplotách vyšších než je rotační teplota. Při teplotách

nižších jsou rotační stavy opět „*zamrzlé*“. Každý rotační stav přispěje k tepelné kapacitě opět hodnotou Boltzmannovy konstanty. Výsledný průběh měrné tepelné kapacity má schodovitý charakter:



Obr. 109: Tepelná kapacita dvouatomárního plynu.

Při zvyšování teploty přibývají další stupně volnosti, každý „rozmrzlý“ stupeň volnosti přispěje k měrné tepelné kapacitě hodnotou k_B. Každý translační stupeň volnosti přispívá k měrné tepelné kapacitě nezávisle na teplotě hodnotou $k_B/2$, tj. celkem $3k_B/2$. O rotačních a vibračních spektrech se můžete dočíst další detaily v učebnici [38].

Poznámka: U kyanu HCN odpovídá přechod mezi druhou a první rotační hladinou vlnové délce 1,3 mm, což koresponduje s vlnovým maximem reliktního záření. Právě reliktní záření proto způsobuje rotační excitace mezihvězdného kyanu. Rotační teplota kyanu je 15 K.

3.5.4 Anharmonický oscilátor

Velmi zajímavá situace nastane, pokud v Taylorově rozvoji potenciální energie v okolí minima je důležitý i třetí (asymetrie minima) nebo dokonce čtvrtý člen. Nyní již nejde o harmonické oscilace, ale o anharmonický oscilátor s energií ve tvaru

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} + a_3 x^3 + a_4 x^4 \,. \tag{3.91}$$

Za předpokladu vysoké teploty ($k_B T >> \hbar\omega$) můžeme počítat klasickou partiční sumu pro N nezávislých oscilátorů. Za nízké teploty by se problém musel řešit kvantově. Pro jeden oscilátor máme:

$$\begin{aligned} z &\equiv \int \mathrm{e}^{[-\beta E]} \frac{\mathrm{d}p\mathrm{d}x}{2\pi\hbar} = \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int \exp\left[-\left(\frac{p^2}{2mk_B T} + \frac{m\omega^2 x^2}{2k_B T} + \frac{a_3 x^3}{k_B T} + \frac{a_4 x^4}{k_B T} \right) \right] \mathrm{d}p\,\mathrm{d}x = \\ &= \frac{\sqrt{2\pi m k_B T}}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-\frac{m\omega^2 x^2}{2k_B T} \right] \exp\left[-\frac{a_3 x^3}{k_B T} - \frac{a_4 x^4}{k_B T} \right] \mathrm{d}x \end{aligned} \tag{3.92}$$

Je třeba poznamenat, že jakkoli malý anharmonický člen třetího řádu vede k nekonvergentnímu integrálu (3.92). Konvergenci zajišťuje přítomnost členu čtvrtého řádu s $a_4 > 0$. Nyní budeme předpokládat, že anharmonické členy jsou malé ve srovnání s harmonickým a provedeme rozvoj druhé exponenciály do druhého řádu v argumentu:

$$z \approx \frac{\sqrt{2\pi m k_\mathrm{B} T}}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-\frac{m\omega^2 x^2}{2k_\mathrm{B}T}\right]\left(1-\frac{a_3 x^3}{k_\mathrm{B}T}-\frac{a_4 x^4}{k_\mathrm{B}T}+\frac{1}{2k_\mathrm{B}^2T^2}\left(a_3x^3+a_4x^4\right)^2\right)\mathrm{d}x\,.$$

Jde o součet Gaussových integrálů s různými mocninami x násobícími základní exponenciálu. Integrály s lichými mocninami jsou nulové, ponecháme proto jen sudé členy do šestého řádu v x:

$$z \approx \frac{\sqrt{2\pi m k_\mathrm{B} T}}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-\frac{m\omega^2 x^2}{2k_\mathrm{B}T}\right]\left(1-\frac{a_4 x^4}{k_\mathrm{B}T}+\frac{a_3^2 x^6}{2k_\mathrm{B}^2T^2}+\cdots\right)\mathrm{d}x$$

Po triviálním výpočtu za pomoci vztahu (G2), nebo v programových prostředích MATLAB, Mathematica atp., dostaneme

$$z \approx \frac{\sqrt{2\pi m k_\mathrm{B} T}}{2\pi\hbar}\sqrt{\frac{2\pi k_\mathrm{B} T}{m\omega^2}}\left(1-3\frac{a_4 k_\mathrm{B} T}{m^2\omega^4}+\frac{15}{2}\frac{a_3^2 k_\mathrm{B} T}{m^3\omega^6}+\cdots\right) \Rightarrow$$

$$z \approx \frac{k_\mathrm{B}T}{\hbar\omega}-3\frac{a_4 k_\mathrm{B}^2T^2}{\hbar m^2\omega^5}+\frac{15}{2}\frac{a_3^2 k_\mathrm{B}^2T^2}{\hbar m^3\omega^7}+\cdots \Rightarrow$$

$$Z \approx \left(\frac{k_\mathrm{B}T}{\hbar\omega}-3\frac{a_4 k_\mathrm{B}^2T^2}{\hbar m^2\omega^5}+\frac{15}{2}\frac{a_3^2 k_\mathrm{B}^2T^2}{\hbar m^3\omega^7}+\cdots\right)^N . \tag{3.93}$$

Nyní určíme standardním způsobem termodynamické veličiny

$$F = -k_\mathrm{B}T\ln Z = -Nk_\mathrm{B}T\ln\left(\frac{k_\mathrm{B}T}{\hbar\omega}-3\frac{a_4 k_\mathrm{B}^2T^2}{\hbar m^2\omega^5}+\frac{15}{2}\frac{a_3^2 k_\mathrm{B}^2T^2}{\hbar m^3\omega^7}+\cdots\right), \tag{3.94}$$

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} \Rightarrow$$

$$S \approx Nk_\mathrm{B}\ln\left(\frac{k_\mathrm{B}T}{\hbar\omega}-3\frac{a_4 k^2T_\mathrm{B}^2}{\hbar m^2\omega^5}+\frac{15}{2}\frac{a_3^2 k_\mathrm{B}^2T^2}{\hbar m^3\omega^7}+\cdots\right)+Nk_\mathrm{B}\frac{1-6\dfrac{a_4 k_\mathrm{B}T}{m^2\omega^4}+15\dfrac{a_3^2 k_\mathrm{B}T}{m^3\omega^6}+\cdots}{\left(1-3\dfrac{a_4 k_\mathrm{B}T}{m^2\omega^4}+\dfrac{15}{2}\dfrac{a_3^2 k_\mathrm{B}T}{m^3\omega^6}+\cdots\right)},$$

$$U = F + TS = Nk_\mathrm{B}T\frac{1-6\dfrac{a_4 k_\mathrm{B}T}{m^2\omega^4}+15\dfrac{a_3^2 k_\mathrm{B}T}{m^3\omega^6}+\cdots}{\left(1-3\dfrac{a_4 k_\mathrm{B}T}{m^2\omega^4}+\dfrac{15}{2}\dfrac{a_3^2 k_\mathrm{B}T}{m^3\omega^6}+\cdots\right)} \Rightarrow,$$

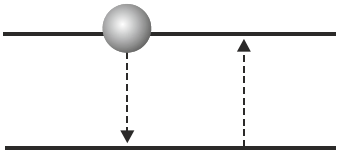
$$U \approx Nk_{\mathrm{B}}T\left(1-3\frac{a_4 k_{\mathrm{B}}T}{m^2\omega^4}+\frac{15}{2}\frac{a_3^2 k_{\mathrm{B}}T}{m^3\omega^6}+\cdots\right), \tag{3.95}$$

$$C=\frac{\partial U}{\partial T}\approx Nk_{\mathrm{B}}+Nk_{\mathrm{B}}^2\left(\frac{15a_3^2}{m^3\omega^6}-\frac{6a_4}{m^2\omega^4}\right)T+\cdots. \tag{3.96}$$

Vidíme, že anharmoničnost vibrací v krystalech nebo molekulách vede k narušení Dulongova Petitova zákona. V tepelné kapacitě se objevuje lineární a případně i kvadratický člen v teplotě.

Poznamenejme, že pokud položíme čtvrtou mocninu x v rozvoji energie (3.91) přesně rovnou nule, nebude integrál (3.92) konvergovat a systém bude nestabilní, při rostoucí výchylce z rovnováhy půjde potenciální energie k nekonečné hodnotě. Pokud budeme předpokládat, že čtvrtá mocnina x v rozvoji je byť jen velmi malá, zajistíme konvergenci integrálu i stabilitu zkoumaného systému.

3.5.5 Dvouhladinový systém



Nalezněme chování kvantového systému s dvěma blízkými energetickými hladinami $\varepsilon_0 = 0$ a $\varepsilon_1 = \varepsilon$ s degeneračními faktory g_0 a g_1. Partiční suma pro jednu částici bude mít jen dva členy

$$z = g_0 + g_1 \exp(-\beta\varepsilon)\,. \tag{3.97}$$

Nyní budeme postupovat standardně:

$$Z=\left[g_0+g_1\exp\left(-\frac{\varepsilon}{k_{\mathrm{B}}T}\right)\right]^N, \tag{3.98}$$

$$F=-k_{\mathrm{B}}T\ln Z=-Nk_{\mathrm{B}}T\ln\left[g_0+g_1\exp\left(-\frac{\varepsilon}{k_{\mathrm{B}}T}\right)\right], \tag{3.99}$$

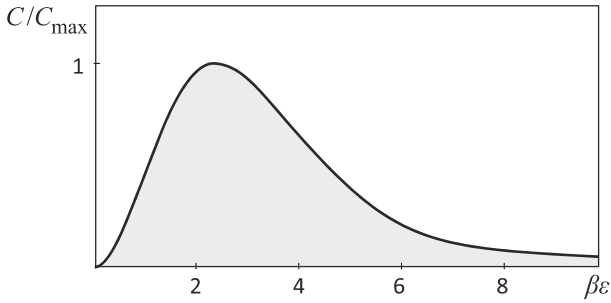
$$S=-\frac{\partial F}{\partial T}=Nk_{\mathrm{B}}\ln\left[g_0+g_1\exp\left(-\frac{\varepsilon}{k_{\mathrm{B}}T}\right)\right]+\frac{N\varepsilon/T}{\left[1+g\exp\left(\frac{\varepsilon}{k_BT}\right)\right]};\quad g\equiv\frac{g_0}{g_1}, \tag{3.100}$$

$$U=F+TS=\frac{N\varepsilon}{\left[1+g\exp\left(\frac{\varepsilon}{k_{\mathrm{B}}T}\right)\right]}, \tag{3.101}$$

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{Ng\,\varepsilon^2}{k_\mathrm{B}T^2} \frac{\exp\left(\dfrac{\varepsilon}{k_\mathrm{B}T}\right)}{\left[1 + g\,\exp\left(\dfrac{\varepsilon}{k_\mathrm{B}T}\right)\right]^2}, \tag{3.102}$$

► $$c_V = \frac{C_V}{N} = \frac{g\,\varepsilon^2}{k_\mathrm{B}T^2} \frac{\exp\left(\dfrac{\varepsilon}{k_\mathrm{B}T}\right)}{\left[1 + g\,\exp\left(\dfrac{\varepsilon}{k_\mathrm{B}T}\right)\right]^2}. \tag{3.103}$$

Dostali jsme velmi známý vztah pro příspěvek dvouhladinového systému k měrnému teplu. Příspěvek konverguje k nule v oblasti nízkých i vysokých teplot. To znamená, že existuje teplota, při které je příspěvek k měrnému teplu maximální. Maximum je možné určit numericky, pro $g = 1$ vychází $c_\mathrm{max} \sim 0{,}34\ k_\mathrm{B}$.

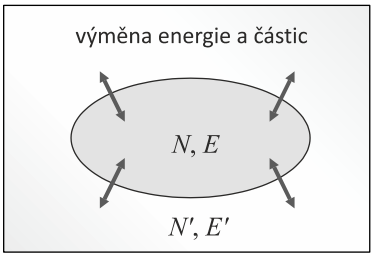


Obr. 111: Tepelná kapacita dvouhladinového systému.

Více se o tepelných kapacitách, rotačních a vibračních spektrech a vztahu mezi termodynamikou, statistickou fyzikou a chemií dozvíte z online učebnice [41]. Zajímavé informace o spektroskopii rotačních a vibračních stavů naleznete také v publikaci [42].

3.6 Grandkanonický soubor

3.6.1 Odvození rozdělení



Na rozdíl od kanonického rozdělení připouštíme u grandkanonického rozdělení výměnu částic s okolím. Ostatní předpoklady jsou stejné jako u kanonického rozdělení. Systém samozřejmě může s okolím vyměňovat energii, zanedbáme povrchové jevy a jediným vnějším parametrem systému bude prozatím objem. Opět předpokládáme platnost Liouvillova teorému. První větu termodynamickou budeme psát ve standardním tvaru (pro jednoduchost uvažujeme jeden druh částic):

$$\mathrm{d}U = T\,\mathrm{d}S - p\,\mathrm{d}V + \mu\,\mathrm{d}\bar{N}. \tag{3.104}$$

Vzhledem k tomu, že N ve statistice znamená okamžitý počet částic v systému, musíme střední počet v první větě označit symbolem s pruhem. Pravděpodobnostní rozdělení v diskrétním, resp. spojitém případě označíme

$$w_{nN} = w_{nN}(E)\,; \qquad \text{resp.} \qquad \rho_N = \rho_N(E)\,. \tag{3.105}$$

Index n čísluje kvantové stavy systému, index N počet částic v systému. Požadujeme aditivnost v energii a počtu částic systému a jeho okolí:

$$E_{\mathrm{tot}} = E + E'\,; \qquad N_{\mathrm{tot}} = N + N'\,. \tag{3.106}$$

Podobně jako v kanonickém případě požadujeme nezávislost (multiplikativnost) pravděpodobnostních rozdělení systému a okolí:

$$w_{n\,N+N'}(E+E') = w_{nN}(E)\,w_{nN'}(E')\,. \tag{3.107}$$

Řešením je jedině exponenciální funkce typu

$$w_{nN}(E_{nN}) = \mathrm{e}^{c_1 + c_2 E_{nN} + c_3 N} = \mathrm{e}^{\alpha - \beta E_{nN} + \gamma N}\,. \tag{3.108}$$

Pro spojitý případ bude mít hustota pravděpodobnosti tvar

$$\rho_N(E_N) = \mathrm{e}^{\alpha - \beta E_N + \gamma N}\,. \tag{3.109}$$

Konstanty lineární kombinace jsme označili α, $-\beta$, γ a určíme je v následující kapitole.

3.6.2 Konstanty rozdělení

Při určení konstant budeme postupovat obdobně jako u kanonického rozdělení, tj. porovnáme diferenciál vnitřní energie s termodynamickým vztahem. Postup je poněkud pracný a čtenář, kterého to nezajímá, si může přečíst výsledek na konci této kapitoly. V principu pro určení tří konstant musíme využít tři rovnice: jde o normování pravděpodobnosti, středování energie a středování počtu částic (poslední rovnice nebyla třeba u kanonického rozdělení). Problém můžeme řešit jak diskrétně, tak spojitě (v levém sloupci naleznete diskrétní vztahy, v pravém sloupci jejich spojité analogie):

$$\begin{aligned} &\sum_{n,N} w_{nN} = 1\,, && \sum_{N} \int \rho_N(E_N)\,\mathrm{d}\Gamma_N = 1\,, \\ &\sum_{n,N} E_{nN} w_{nN} = U\,, && \sum_{N} \int E\,\rho_N(E_N)\,\mathrm{d}\Gamma_N = U\,, \\ &\sum_{n,N} N\, w_{nN} = \bar{N}\,; && \sum_{N} N \int \rho_N(E_N)\,\mathrm{d}\Gamma_N = \bar{N}\,. \end{aligned} \tag{3.110}$$

I ve spojitém případě musíme sčítat přes všechny možné počty částic. Odvození budeme provádět v diskrétním případě. Podobně jako u kanonického rozdělení nejprve nalezneme diferenciál vnitřní energie:

$$\mathrm{d}U = \mathrm{d}\sum_{n,N} E_{nN}(V)\, w_{nN} = \sum_{n,N}\left[\left(\frac{\partial E_{nN}}{\partial V}\,\mathrm{d}V + \frac{\partial E_{nN}}{\partial N}\,\mathrm{d}N\right) w_{nN}\right] + \sum_{n,N} E_{nN}\,\mathrm{d}w_{nN}\,.$$

Derivaci energie podle objemu budeme opět interpretovat jako parciální tlak, změna energie s počtem částic je parciální chemický potenciál, v posledním členu vyjádříme E_{nN} z rozdělení (3.108):

$$\mathrm{d}U = \sum_{n,N}\left(-p_{nN} w_{nN}\mathrm{d}V\right) + \sum_{n,N}\left(\mu_{nN}\, w_{nN}\mathrm{d}N\right) + \sum_{n,N}\left(\frac{\alpha}{\beta} + \frac{\gamma}{\beta}N - \frac{1}{\beta}\ln w_{nN}\right)\mathrm{d}w_{nN}\,.$$

První člen interpretujeme stejně jako u kanonického rozdělení jako mechanickou práci. Poslední člen roznásobíme a vytkneme konstanty:

$$\mathrm{d}U = -p\,\mathrm{d}V + \sum_{n,N}\mu_{nN}\, w_{nN}\mathrm{d}N + \frac{\gamma}{\beta}\sum_{n,N} N\,\mathrm{d}w_{nN} + \frac{\alpha}{\beta}\mathrm{d}\sum_{n,N} w_{nN} - \frac{1}{\beta}\sum_{n,N}\ln w_{nN}\,\mathrm{d}w_{nN}\,.$$

Třetí a pátý člen upravíme podle vztahu pro derivaci součinu $f\,\mathrm{d}g = \mathrm{d}(fg) - g\mathrm{d}f$, čtvrtý člen je nulový (součet pravděpodobností je roven jedné a diferenciál jednotky je nulový):

$$\mathrm{d}U = -p\mathrm{d}V + \sum_{n,N}\mu_{nN}\, w_{nN}\mathrm{d}N + \frac{\gamma}{\beta}\mathrm{d}\sum_{n,N} N\, w_{nN} - \frac{\gamma}{\beta}\sum_{n,N} w_{nN}\,\mathrm{d}N - \frac{1}{\beta}\mathrm{d}\sum_{n,N}(\ln w_{nN})\, w_{nN}\,.$$

Jako jeden z posledních kroků sloučíme druhý a čtvrtý člen:

$$\mathrm{d}U = -p\,\mathrm{d}V + \sum_{n,N}\left(\mu_{nN} - \frac{\gamma}{\beta}\right) w_{nN}\mathrm{d}N + \frac{\gamma}{\beta}\,\mathrm{d}\bar{N} - \frac{1}{\beta}\mathrm{d}\sum_{n,N} w_{nN}\ln w_{nN}.$$

Má-li tento výraz korespondovat s první větou termodynamickou (3.104), musí platit

► $$\beta = \frac{1}{k_\mathrm{B}T}, \qquad \gamma = \frac{\mu}{k_\mathrm{B}T}, \qquad S = -k_\mathrm{B}\sum_{n,N} w_{nN}\ln w_{nN}\,. \tag{3.111}$$

Druhá podmínka ($\gamma/\beta = \mu$) nám zajistí korespondenci třetího členu s odpovídajícím členem první věty termodynamické a současně vypadnutí členu druhého. Ostatní podmínky jsou shodné s kanonickým rozdělením. V tuto chvíli tedy máme určeny dvě konstanty. Zbývá jediná neurčená konstanta rozdělení – normovací konstanta α. Tu určíme například ze vztahu pro entropii:

$$S = -k_\mathrm{B}\sum_{n,N} w_{nN}\ln w_{nN} = -k_\mathrm{B}\sum_{n,N} w_{nN}\left(\alpha - \beta E_{nN} + \gamma N\right) = -k_\mathrm{B}\alpha + k_\mathrm{B}\beta U - k_\mathrm{B}\gamma\bar{N}\,.$$

Po triviálních úpravách dopočteme hledanou konstantu:

► $$\alpha = \frac{U - TS - \mu\bar{N}}{k_\mathrm{B}T} = \frac{\Omega}{k_\mathrm{B}T}\,. \tag{3.112}$$

Nyní známe všechny konstanty a můžeme napsat výsledné rozdělení v diskrétním i spojitém případě:

► $$w_{nN} = \mathrm{e}^{\beta(\Omega - E_{nN} + \mu N)}\,; \qquad \rho_N = \mathrm{e}^{\beta(\Omega - E_N + \mu N)}\,. \tag{3.113}$$

Grandkanonický potenciál zjevně souvisí s normováním pravděpodobnosti, použijeme-li explicitně vypsanou normovací konstantu, má rozdělení často používaný tvar

► $$w_{nN} = K\exp\left[\frac{-E_{nN} + \mu N}{k_\mathrm{B}T}\right]; \qquad \rho_N = K\exp\left[\frac{-E_N + \mu N}{k_\mathrm{B}T}\right]. \tag{3.114}$$

3.6.3 Partiční suma

Podobný význam, jako měla volná energie u kanonického rozdělení, má grandkanonický potenciál u systémů s proměnným počtem částic. Grandkanonický potenciál vypočteme z normovací podmínky rozdělení. Výpočet provedeme v diskrétním (nalevo) i spojitém (napravo) případě.

$$\sum_{n,N} w_{nN} = 1 \;\Rightarrow$$

$$\sum_{n,N} \mathrm{e}^{\beta(\Omega - E_{nN} + \mu N)} = 1 \;\Rightarrow$$

$$\sum_{n,N} \mathrm{e}^{-\beta E_{nN} + \beta\mu N} = \mathrm{e}^{-\beta\Omega} \;\Rightarrow$$

$$\sum_{N}\int \rho_N\,\mathrm{d}\Gamma_N = 1 \;\Rightarrow$$

$$\sum_{N}\int \mathrm{e}^{\beta(\Omega - E_N + \mu N)}\,\mathrm{d}\Gamma_N = 1 \;\Rightarrow$$

$$\sum_{N}\int \mathrm{e}^{-\beta E_N + \beta\mu N}\,\mathrm{d}\Gamma_N = \mathrm{e}^{-\beta\Omega} \;\Rightarrow$$

Nyní už snadno vypočteme grandkanonický potenciál Ω:

$$\Omega = -k_{\mathrm{B}}T \begin{cases} \ln\left(\sum\limits_{n,N} \mathrm{e}^{-\beta E_{nN} + \beta\mu N} \right); & \text{diskrétní případ,} \\ \ln\left(\sum\limits_{N} \int \mathrm{e}^{-\beta E_N + \beta\mu N} \, \mathrm{d}\Gamma_N \right); & \text{spojitý případ.} \end{cases} \tag{3.115}$$

Veličina nacházející se v logaritmu v kulaté závorce se nazývá *grandkanonická partiční funkce* a je ústřední veličinou statistické fyziky s proměnným počtem částic, označujeme ji Ξ (velké ksí). Vzhledem k tomu, že argument logaritmu by měl být bezrozměrný, je použití váhového faktoru namísto fázového objemu vhodnější.

Schéma statistického výpočtu s proměnným počtem částic

1) Nejprve zjistíme, jakých energií E_{nN} může systém nabývat. V klasickém případě půjde o všechny hodnoty energií, které se v systému mohou vyskytnout. V kvantovém případě musíme určit spektrum Hamiltonova operátoru (například řešit Schrödingerovu rovnici).

2) Nalezneme partiční funkci Ξ jako součet všech veličin $\mathrm{e}^{-\beta E + \beta\mu N}$ přes celý obor energetického spektra:

$$\Xi = \sum_{n,N} \mathrm{e}^{-\beta E_{nN} + \beta\mu N}; \quad \text{resp.} \quad \Xi = \sum_{N} \int \mathrm{e}^{-\beta E_N + \beta\mu N} \, \mathrm{d}\Gamma_N. \tag{3.116}$$

3) Určíme grandkanonický potenciál

$$\Omega = -k_{\mathrm{B}}T \ln \Xi. \tag{3.117}$$

4) Určíme základní termodynamické veličiny S, p, N:

$$S = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial T}\right), \qquad p = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial V}\right), \qquad \bar{N} = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}\right). \tag{3.118}$$

5) Určíme vnitřní energii U a její derivace:

$$U = \Omega + TS + \mu\bar{N}. \tag{3.119}$$

6) Vzhledem k tomu, že grandkanonický potenciál je funkcí chemického potenciálu μ, je třeba ho ze všech odvozených termodynamických vztahů vyloučit. Teoreticky to lze provést nezávisle na (3.118) z relace

$$\bar{N} = \sum_{n,N} N\, w_{nN} \quad \Rightarrow \quad \bar{N} = \bar{N}(T,V,\mu) \quad \Rightarrow \quad \mu = \mu(\bar{N},T,V). \tag{3.120}$$

Prakticky může vyloučení chemického potenciálu z rovnic činit problémy. Chemický potenciál však lze také chápat jako parametr v parametrickém zadání křivek. Poznáme-li například z (3.118) závislosti $p = p(T, V, \mu)$ a $\bar{N} = \bar{N}(T, V, \mu)$, můžeme do grafu s osami $(p, \bar{N})$ vykreslovat souřadnice $(p, \bar{N})$ pro určitý interval hodnot μ, a tím zkonstruovat graficky závislost tlaku na průměrném počtu částic.

Vztah grandkanonické a kanonické partiční sumy

Upravme nyní vztah pro grandkanonickou partiční sumu:

$$\Xi = \sum_{n,N} \mathrm{e}^{-\beta E_{nN} + \beta \mu N} = \sum_{N} \left[\left(\sum_{n} \mathrm{e}^{-\beta E_{nN}} \right) \cdot \left(\mathrm{e}^{\beta \mu} \right)^{N} \right].$$

Označíme-li Z_N kanonickou partiční sumu pro N částic a zavedeme-li tzv. *fugacitu* (značíme ji malým řeckým dzéta)

$$\varsigma \equiv \mathrm{e}^{\beta \mu}, \tag{3.121}$$

dostaneme přehledný vztah

$$\Xi = \sum_{N} Z_N \varsigma^N. \tag{3.122}$$

Uvedený vztah platí v klasické fyzice, kde jsou v systému N částic jednotlivé částice v principu rozlišitelné. V kvantové teorii jsou částice nerozlišitelné a každá z $N!$ možných permutací částic je stejným stavem. Ve vztahu (3.122) je každá permutace v součtu započítána, to znamená, že jeden stav je započten namísto jednou vícekrát ($N!$ krát). V kvantové teorii je proto správným vztahem výraz

$$\Xi = \sum_{N} \frac{Z_N}{N!} \varsigma^N, \tag{3.123}$$

který silně připomíná Taylorův rozvoj ve fugacitě. Koeficienty jsou kanonické partiční sumy pro N částic.

3.7 Fermiony a bosony

Nerozlišitelné částice

V kvantové teorii můžeme předpovědět jen pravděpodobnost výskytu částice v nějakém místě a čase. Tato pravděpodobnost má maximum v místě klasické trajektorie, se vzdáleností od ní zpravidla exponenciálně ubývá a dosti daleko od klasické trajektorie je sice velmi malá, nikoli však nulová. Máme-li dvě stejné částice, nikdy si nemůžeme být jisti, která částice je která. Pravděpodobnost výskytu jedné částice v místě druhé je nenulová. Hovoříme o tom, že stejné částice jsou v kvantové teorii *nerozlišitelné*. To ve svém důsledku vede k rozdělení všech částic na dva základní typy, *fermiony* a *bosony*, které se liší svými vlastnostmi a chováním (viz kapitola 2.8). Fermiony mají poločíselný spin, dva nemohou být ve stejném kvantovém stavu (splňují Pauliho vylučovací princip), jejich vlnová funkce je antisymetrická a jejich kreační a anihilační operátory splňují antikomutační relace. Naopak bosony mají celočíselný spin, ve stejném kvantovém stavu jich může být libovolné množství, jejich vlnová funkce je symetrická a jejich kreační a anihilační operátory splňují komutační relace. Všechny polní částice tvořící interakce (fotony, gluony, W^+, W^-, Z^0) jsou bosony se spinem 1. K bosonům také patří částice složené ze dvou kvarků (mezony), které mají spin roven 0 (skalární mezony) nebo 1 (vektorové mezony). Všechny základní stavební kameny hmoty (kvarky a leptony) jsou naopak fermiony se spinem 1/2. K fermionům také patří částice složené ze tří kvarků (hadrony), například neutron a proton. Z hlediska statistiky mají, zejména při nízkých teplotách, fermiony a bosony zcela odlišné chování a jejich pravděpodobnostní rozdělení jsou různá. Fermiony podléhají Fermiho-Diracovu rozdělení a bosony Boseho-Einsteinovu rozdělení.

Reprezentace obsazovacích čísel

Obsazovacím číslem nazýváme počet částic v daném energetickém stavu:

energie stavu	obsazovací číslo
ε_1	N_1
ε_2	N_2
ε_3	N_3
⋮	⋮

Pro fermiony může obsazovací číslo (z důvodu platnosti Pauliho vylučovacího principu) nabývat jen hodnot 0, 1. Pro bosony může jít o jakékoli celé nezáporné číslo 0, 1, 2, … V reprezentaci obsazovacích čísel můžeme pro počet částic a celkovou energii psát

$$N = \sum_i N_i \,, \qquad E_N = \sum_i \varepsilon_i N_i \,. \tag{3.124}$$

Grandkanonickou partiční sumu můžeme upravit v reprezentaci obsazovacích čísel následujícím způsobem:

$$\Xi = \sum_{N,n}{}' \, \mathrm{e}^{-\beta E_{nN} + \beta \mu N} = \sum_{N_1, N_2, \ldots} \exp\left[-\beta \sum_i (\varepsilon_i N_i - \mu N_i) \right] =$$

$$= \sum_{N_1, N_2, \ldots} \prod_i \exp\left[-\beta (\varepsilon_i N_i - \mu N_i) \right] = \prod_i \sum_{N_i} \exp\left[-\beta N_i (\varepsilon_i - \mu) \right].$$

Čárka nad symbolem součtu má naznačit, že všechny permutace částic považujeme v kvantové teorii za jeden jediný stav a do celkového součtu přispějí tyto permutace jediným členem. Je vidět, že celková grandkanonická suma se rozpadá na součin parciálních grandkanonických sum jednotlivých stavů:

$$\Xi = \prod_i \Xi_i \, ; \qquad \Xi_i = \sum_{N_i} \exp\left[-\beta N_i (\varepsilon_i - \mu) \right]. \tag{3.125}$$

V důsledku toho jsou termodynamické veličiny dány součty jednotlivých příspěvků:

$$\begin{aligned}
\Omega &= \sum_i \Omega_i \, ; & \Omega_i &= -k_\mathrm{B} T \ln \Xi_i \, , \\
S &= \sum_i S_i \, ; & S_i &= -\left(\frac{\partial \Omega_i}{\partial T} \right), \\
p &= \sum_i p_i \, ; & p_i &= -\left(\frac{\partial \Omega_i}{\partial V} \right), \\
\bar{N} &= \sum_i \bar{N}_i \, ; & \bar{N}_i &= -\left(\frac{\partial \Omega_i}{\partial \mu} \right).
\end{aligned} \tag{3.126}$$

3.7.1 Fermiho-Diracovo a Boseho-Einsteinovo rozdělení

Fermiho-Diracovo rozdělení

Zabývejme se nejprve fermiony. Podle Pauliho vylučovacího principu nemohou být dva fermiony ve stejném kvantovém stavu. V daném stavu tedy není buď žádný fermion, nebo je přítomen jeden jediný

$$N_i = 0, 1 \, . \tag{3.127}$$

Partiční suma *i*-tého stavu má proto v reprezentaci obsazovacích čísel jen dva členy:

$$\Xi_i = \sum_{N_i} \exp\left[-\beta N_i (\varepsilon_i - \mu) \right] \; = \; 1 + \; \exp\left[-\beta (\varepsilon_i - \mu) \right].$$

Snadno dopočteme grandkanonický potenciál *i*-tého stavu

$$\Omega_i = -k_\mathrm{B} T \ln \Xi_i = -k_\mathrm{B} T \ln \left(1 + \; \exp\left[-\beta (\varepsilon_i - \mu) \right] \right)$$

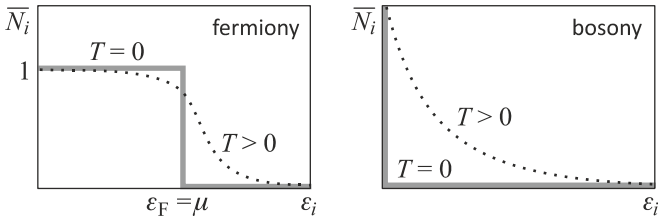
a střední počet částic v *i*-tém stavu

► $$\bar{N}_i = -\frac{\partial \Omega_i}{\partial \mu} = \frac{1}{\exp\left[\beta(\varepsilon_i - \mu)\right] + 1}. \tag{3.128}$$

Tento výraz se nazývá Fermiho-Diracovo rozdělení. Nalezněme jeho průběh v limitě nízkých teplot ($T \to 0, \beta \to \infty$):

$$\lim_{\beta\to\infty} \bar{N}_i = \lim_{\beta\to\infty} \frac{1}{\exp\left[\beta(\varepsilon_i - \mu)\right] + 1} = \begin{cases} 1 & \text{pro } \varepsilon_i < \mu, \\ 0 & \text{pro } \varepsilon_i > \mu. \end{cases}$$

Všechny stavy jsou zaplněné po jedné částici až po tzv. Fermiho mez $\varepsilon_F = \mu$. Nad Fermiho mezí jsou stavy neobsazené. Fermiho mez je tak poslední obsazenou energetickou hladinou při nulové teplotě. Chemický potenciál je při absolutní nule roven Fermiho mezi. Fermiony se chovají „nesnášenlivě“. Je-li nějaký stav obsazen částicí, další částice již tento stav nemůže obsadit. Při absolutní nule se snaží zaujmout stav s co nejnižší energií. Je-li již obsazen, obsadí nejbližší další volný. Tím dojde k tomu, že při absolutní nule jsou obsazené všechny stavy až po Fermiho mez. Rozdělení je pojmenováno podle italského fyzika Enrica Fermiho (1901–1954) a podle anglického fyzika Paula Adriena Maurice Diraca (1902–1984).



Obr. 113: Rozdělení fermionů (nalevo) a bosonů (napravo).

Boseho-Einsteinovo rozdělení

Nalezněme nyní rozdělení souboru bosonů. Bosony nesplňují Pauliho vylučovací princip a v daném stavu jich může být libovolné množství. Obsazovací čísla proto jsou:

$$N_i = 0, 1, 2, \ldots \tag{3.129}$$

Grandkanonická partiční suma i-tého stavu bude nekonečnou řadou

$$\Xi_i = \sum_{N_i=0}^{\infty} \exp\left[-\beta N_i (\varepsilon_i - \mu)\right] =$$

$$= \sum_{N_i=0}^{\infty} \left(\exp\left[-\beta(\varepsilon_i - \mu)\right]\right)^{N_i}.$$

Jde o geometrickou řadu, kterou bez problémů sečteme:

$$\Xi_i = \frac{1}{1 - \exp\left[-\beta(\varepsilon_i - \mu)\right]}. \tag{3.130}$$

Snadno dopočteme grandkanonický potenciál i-tého stavu

$$\Omega_i = -k_\mathrm{B} T \ln \Xi_i =$$
$$= +k_\mathrm{B} T \ln\left(1 - \exp\left[-\beta(\varepsilon_i - \mu)\right]\right)$$

a střední počet částic v *i*-tém stavu

$$\bar{N}_i = -\frac{\partial \Omega_i}{\partial \mu} = \frac{1}{\exp\left[\beta(\varepsilon_i - \mu)\right] - 1}. \tag{3.131}$$

Tento výraz se nazývá Boseho-Einsteinovo rozdělení. Je pojmenováno podle indického fyzika Satyendry Boseho (1854–1948) a německo-amerického fyzika Alberta Einsteina (1879–1955), Povšimněte si, že od Fermi-Diracova rozdělení se liší jen znaménkem. To je pro vztahy popisující fermiony a bosony typické (symetrická a antisymetrická vlnová funkce, komutátor a antikomutátor). Z podmínky pro konvergenci geometrické řady plyne, že chemický potenciál souboru bosonů musí splňovat podmínku

$$\mu \leq \varepsilon_0 \ . \tag{3.132}$$

Nalezněme průběh rozdělení v limitě nízkých teplot ($T \to 0$, $\beta \to \infty$):

$$\lim_{\beta\to\infty} \bar{N}_i = \lim_{\beta\to\infty} \frac{1}{\exp\left[\beta(\varepsilon_i - \mu)\right] - 1} = \begin{cases} \infty \ \text{pro} \ \varepsilon_i = \varepsilon_0 = \mu \ , \\ 0 \ \text{pro} \ \varepsilon_i > \varepsilon_0 \ . \end{cases}$$

Mlčky jsme při součtu geometrické řady předpokládali nekonečný počet částic. Při absolutní nule všechny obsadí základní energetický stav. V reálných systémech je počet částic konečný. Boseho-Einsteinovo rozdělení při nulové i nenulové teplotě je znázorněno na obrázku 113 napravo. Stav látky, při kterém se částice hromadí v základním stavu, nazýváme *bosonový kondenzát* neboli BEC (*Bose-Einstein Condensate*). Typickým příkladem jsou například Cooperovy páry elektronů, které při nízkých teplotách vykazují jako bosonový kondenzát supravodivé a supratekuté vlastnosti.

Obě rozdělení lze souhrnně zapsat

$$\bar{N}_i = \frac{1}{\exp\left[\beta(\varepsilon_i - \mu)\right] \pm 1}. \tag{3.133}$$

Znaménko „+“ platí pro fermiony a „–“ pro bosony. Za jakých podmínek obě rozdělení splynou? Je zřejmé, že k tomu dojde tehdy, lze-li zanedbat jedničku ve jmenovateli, tj. exponenciála převládne a $\bar{N}_i \ll 1$. Potom

$$\bar{N}_i \ll 1 \qquad \Rightarrow \qquad \bar{N}_i \sim \frac{1}{\exp\left[\beta(\varepsilon_i - \mu)\right]} \sim K \exp\left[-\beta\varepsilon_i\right]$$

a obě rozdělení přechází v Boltzmannovo rozdělení. Kvantové stavy jsou většinou prázdné a jen tu a tam je některý obsazený. K této situaci dochází, je-li

- vysoký počet kvantových stavů,
- řídký plyn (malý počet částic),
- vysoké teploty (částice excitovány do vysokých energetických stavů).

Shrňme na závěr vlastnosti fermionů a bosonů do přehledné tabulky:

	fermiony	**bosony**
spin	1/2, 3/2, ...	0, 1, 2, ...
příklady částic	elektrony, neutrina, kvarky	všechny polní částice
hamiltonián	$\hat{H}(1,2) = \hat{H}(2,1)$	$\hat{H}(1,2) = \hat{H}(2,1)$
vlnová funkce	$\lvert 1,2\rangle = -\lvert 2,1\rangle$	$\lvert 1,2\rangle = +\lvert 2,1\rangle$
kreační a anihilační operátory	$\left[a_k^+ , a_l\right]_+ = \delta_{kl}$	$\left[a_k^+ , a_l\right]_- = \delta_{kl}$
statistika ($\bar{N}_i$)	$\dfrac{1}{\exp\left[\beta(\varepsilon_i - \mu)\right] + 1}$	$\dfrac{1}{\exp\left[\beta(\varepsilon_i - \mu)\right] - 1}$

3.7.2 Soubory fermionů (trpaslík a neutronová hvězda)

V závěrečných fázích vývoje hvězd může snahu gravitace zhroutit hvězdu do černé díry zastavit tlak degenerovaného elektronového plynu (bílý trpaslík) nebo degenerovaného neutronového plynu (neutronová hvězda). Proto se budeme zabývat souborem fermionů nenulové hmotnosti. Základní charakteristiky obou částic jsou

$$s = 1/2\,; \qquad \mu \neq 0\,; \qquad m_0 \neq 0\,. \tag{3.134}$$

Nenulový chemický potenciál vyžaduje provést dopočet podle vztahu (3.120), nenulová klidová hmotnost znamená vztah mezi hybností a energií (pro nerelativistický případ):

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m}\,; \qquad p = \sqrt{2m\varepsilon}\,; \qquad \mathrm{d}\,p = \frac{1}{2}\sqrt{2m}\;\varepsilon^{-1/2}\,\mathrm{d}\varepsilon\,. \tag{3.135}$$

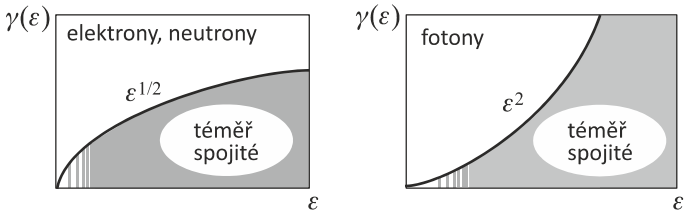
Určeme nyní element váhového faktoru

$$\mathrm{d}\Gamma_\varepsilon = g\frac{\mathrm{d}^3x\,\mathrm{d}^3p}{(2\pi\hbar)^3} \to \frac{4\pi g V}{(2\pi\hbar)^3}\,p^2\mathrm{d}p = \frac{4\pi g V}{(2\pi\hbar)^3}\cdot 2m\varepsilon\cdot\frac{1}{2}\sqrt{2m}\;\varepsilon^{-1/2}\,\mathrm{d}\varepsilon\,.$$

Pro váhový faktor nerelativistických fermionů tedy platí

► $$\begin{aligned} \mathrm{d}\Gamma_\varepsilon &= \gamma(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon\,; \\ \gamma(\varepsilon) &= \alpha V\,\varepsilon^{1/2}\,; \\ \alpha &\equiv \frac{g\,m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3}\,. \end{aligned} \tag{3.136}$$

V příští kapitole uvidíme, že počet kvantových stavů neroste tak jako u fotonů, ale přesto má rostoucí tendenci a pro vyšší energie lze hustotu energetických stavů považovat za téměř spojitou.



Obr. 114: Hustota energetických stavů fermionů (nalevo). Napravo je pro srovnání hustota energetických stavů pro fotony

Grandkanonická partiční funkce odpovídající jednomu energetickému stavu je

$$\Xi_\varepsilon = \sum_{N_\varepsilon = 0}^{1} \mathrm{e}^{-\beta N_\varepsilon(\varepsilon-\mu)} = 1 + \mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon-\mu)}; \tag{3.137}$$

Termodynamické veličiny, které nás zajímají, pro tento stav dávají

$$\Omega_\varepsilon = -k_\mathrm{B}T \ln \Xi_\varepsilon = -k_\mathrm{B}T \ln\left[1 + \mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon-\mu)}\right]; \tag{3.138}$$

$$\bar{N}_\varepsilon = -\frac{\partial \Omega_\varepsilon}{\partial \mu} = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1}; \tag{3.139}$$

$$U_\varepsilon = \varepsilon \bar{N}_\varepsilon = \frac{\varepsilon}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1}. \tag{3.140}$$

Nyní nalezneme integrální veličiny, tedy součty přes všechny stavy. Logaritmické závislosti v grandkanonickém potenciálu se zbavíme integrací per partes. Výpočty jsou jinak zcela přímočaré:

$$\Omega = \int \Omega_\varepsilon \,\mathrm{d}\Gamma_\varepsilon = \int_0^\infty -k_\mathrm{B}T \ln\left[1 + \mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon-\mu)}\right] \alpha V \varepsilon^{1/2} \,\mathrm{d}\varepsilon =$$

$$-k_\mathrm{B}T\alpha V \int_0^\infty \varepsilon^{1/2} \ln\left[1 + \mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon-\mu)}\right] \mathrm{d}\varepsilon =$$

$$-k_\mathrm{B}T\alpha V \left\{ \left[\frac{2}{3}\varepsilon^{3/2} \ln\left[1 + \mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon-\mu)}\right] \right]_0^\infty - \int_0^\infty \frac{2}{3}\varepsilon^{3/2} (-\beta) \frac{\mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon-\mu)}}{1 + \mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon-\mu)}} \right\}.$$

První výraz z integrace per partes je nulový – horní mez vynuluje logaritmická závislost, dolní mocninná závislost. Druhý člen s integrálem bychom mohli řešit numericky, ale pro naše účely postačí ho ponechat v obecné podobě:

$$\Omega = -\frac{2}{3} \alpha V \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{3/2}}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1} \,\mathrm{d}\varepsilon. \tag{3.141}$$

Z grandkanonického potenciálu určíme snadno tlak, tedy stavovou rovnici

$$p = -\frac{\partial \Omega}{\partial V} = \frac{2}{3}\alpha \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{3/2}}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}\,\mathrm{d}\varepsilon. \tag{3.142}$$

Další termodynamické veličiny získáme opět integrací veličin odpovídajících jednomu stavu:

$$\bar{N} = \int \bar{N}_\varepsilon \,\mathrm{d}\Gamma_\varepsilon = \alpha V \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2}}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}\,\mathrm{d}\varepsilon\,; \tag{3.143}$$

$$U = \int U_\varepsilon \,\mathrm{d}\Gamma_\varepsilon = \alpha V \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{3/2}}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}\,\mathrm{d}\varepsilon\,. \tag{3.144}$$

Integrály v jednotlivých vztazích je nutné nalézt numericky. Pokud vydělíme poslední dva vztahy objemem, získáme trojici intenzivních veličin popisujících fermionový plyn:

$$p = \frac{2}{3}\alpha \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{3/2}}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}\,\mathrm{d}\varepsilon\,; \tag{3.145}$$

$$n \equiv \frac{\bar{N}}{V} = \alpha \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2}}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}\,\mathrm{d}\varepsilon\,; \tag{3.146}$$

$$u \equiv \frac{U}{V} = \alpha \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{3/2}}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}\,\mathrm{d}\varepsilon\,. \tag{3.147}$$

I bez výpočtu integrálů je patrný vztah mezi tlakem a hustotou vnitřní energie pro fermiony o nenulové hmotnosti:

► $$p = \frac{2}{3}u\,. \tag{3.148}$$

Hvězdy ve fázích bílého trpaslíka nebo neutronové hvězdy jsou v závěrečných fázích svého vývoje. V centru neprobíhá termojaderná fúze, a i když teplota nitra je z „lidského“ hlediska značná, z hlediska aktivního života hvězdy je zanedbatelná a pro hvězdu v podstatě znamená nulovou teplotu. V limitě nízkých teplot ($\beta \to \infty$) lze integrály snadno vypočítat, protože

$$\bar{N}_\varepsilon = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1} \to \begin{cases} 1 & \text{pro } \varepsilon \le \mu_0; \\ 0 & \text{pro } \varepsilon > \mu_0, \end{cases}$$

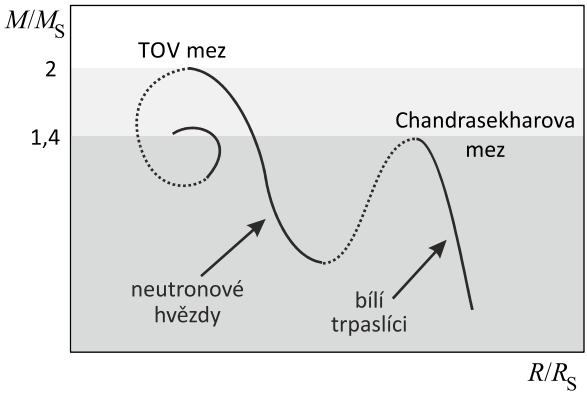
kde μ_0 je chemický potenciál v limitě absolutní nuly. Integrace přes „schodovité“ rozdělení se nyní stává triviální záležitostí:

$$p = \frac{4}{15}\alpha \mu_0^{5/2}; \qquad n = \frac{2}{3}\alpha \mu_0^{3/2}; \qquad u = \frac{2}{5}\alpha \mu_0^{5/2}. \tag{3.149}$$

Chemický potenciál je parametrem rovnic a lze ho snadno vyloučit z rovnice pro koncentraci částic:

► $$\mu_0 = \text{const}\, n^{2/3} \quad \Rightarrow \quad p = \text{const}\, n^{5/3}\,; \quad u = \frac{3}{2}\,p\,. \tag{3.150}$$

Fermionový plyn vykazuje polytropní chování s koeficientem 5/3. I při nulové teplotě existuje obrovský nenulový tlak způsobený kvantovými procesy („nesnášenlivostí" fermionů). Plyn se střední tepelnou energií menší než Fermiho mez ($k_B T < \mu_0$) nazýváme degenerovaný. V případě relativistického výpočtu vyjde polytropní koeficient 4/3, což je právě na hranici stability a nestability polytropní hvězdy (viz Úvod to teorie plazmatu, str. 210–211).



Obr. 115: Stabilní konfigurace (plnou čarou) hvězdy bez probíhající termojaderné syntézy.

3.7.3 Soubor fotonů (Planckův vyzařovací zákon)

Fotony jsou částice elektromagnetické interakce šířící se rychlostí světla. Jejich základní charakteristiky (spin, chemický potenciál, klidová hmotnost, elektrický náboj) jsou

$$s = 1\,; \qquad \mu = 0\,; \qquad m_0 = 0\,; \qquad Q_e = 0\ . \tag{3.151}$$

Ve speciální relativitě platí pro energii částice jednoduchý vztah

$$E = \sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2}\ . \tag{3.152}$$

Pro malé hybnosti vztah přejde v nerelativistický výraz (3.135). Nyní ale máme fotony šířící se rychlostí světla, jejichž klidová hmotnost je nulová (jen takové částice se mohou šířit rychlostí světla). Pro jejich energii vychází po dosazení za $m_0 = 0$ jednoduchý vztah:

$$\varepsilon = pc\,. \tag{3.153}$$

Představme si soubor fotonů uzavřený v nějaké oblasti o objemu V při teplotě T. Na fotony budeme v prvním přiblížení nahlížet jako na spojitý systém a určíme element váhového prostoru systému skládajícího se z jednoho fotonu. Degenerační faktor $g = 2$, protože elektromagnetické záření je příčné a existují dva nezávislé příčné mody (polarizace) záření. U elementu váhového faktoru provedeme automaticky všechny proveditelné integrace, element hybnostního prostoru převedeme do sférických souřadnic a hybnost převedeme podle vztahu (3.153) na energii:

$$\mathrm{d}\Gamma_\varepsilon = g\,\frac{\mathrm{d}\phi}{(2\pi\hbar)^3} = 2\,\frac{\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z\,\mathrm{d}p_x\,\mathrm{d}p_y\,\mathrm{d}p_z}{(2\pi\hbar)^3} \to \frac{2V}{(2\pi\hbar)^3}\,4\pi p^2\mathrm{d}p = \frac{V\varepsilon^2}{\pi^2\hbar^3c^3}\,\mathrm{d}\varepsilon\,.$$

Získali jsme tak vztah pro hustotu energetických stavů, která kvadraticky roste s energií:

$$\mathrm{d}\Gamma_\varepsilon = \gamma(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon\,; \qquad \gamma(\varepsilon) = \frac{V\varepsilon^2}{\pi^2\hbar^3c^3}\,. \tag{3.154}$$

Hustota energetických stavů fotonů roste podstatně rychleji, než tomu bylo u fermionových stavů a můžeme ji považovat za spojitou veličinu. Je to dobře patrné z obrázku 114. Napišme přehledně základní statistické a termodynamické veličiny pro jeden stav:

$$\Xi_\varepsilon = \sum_{N_\varepsilon=0}^{\infty} \mathrm{e}^{-\beta N_\varepsilon \varepsilon} = \frac{1}{1-\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon}}\,, \tag{3.155}$$

$$\Omega_\varepsilon = -k_\mathrm{B}T\ln\Xi_\varepsilon = k_\mathrm{B}T\ln\left[1-\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon}\right], \tag{3.156}$$

$$\bar{N}_\varepsilon = -\lim_{\mu\to 0}\frac{\partial\Omega_\varepsilon}{\partial\mu} = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta\varepsilon}-1}\,. \tag{3.157}$$

$$U_\varepsilon = \varepsilon\bar{N}_\varepsilon = \frac{\varepsilon}{\mathrm{e}^{\beta\varepsilon}-1}\,. \tag{3.158}$$

Všechny tyto vztahy již byly odvozeny dříve, viz např. (3.131), stačilo jen položit $\mu = 0$. Nyní přistoupíme k výpočtu celkových termodynamických veličin:

$$\Omega = \int_0^\infty \Omega_\varepsilon\,\mathrm{d}\Gamma_\varepsilon = \frac{V}{\pi^2\hbar^3c^3}\,k_\mathrm{B}T\int_0^\infty \varepsilon^2\ln\left[1-\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon}\right]\mathrm{d}\varepsilon\,.$$

Po integraci per partes (obdobně jako u fermionového plynu) dostaneme:

$$\Omega = -\frac{V}{\pi^2\hbar^3c^3}\,\frac{1}{3}\int_0^\infty \frac{\varepsilon^3}{\mathrm{e}^{\beta\varepsilon}-1}\,\mathrm{d}\varepsilon\,. \tag{3.159}$$

Integrál je v tomto případě analyticky řešitelný, viz dodatek G2, ale pro naše účely ho můžeme ponechat v obecném tvaru. Nyní určíme tlak, střední počet fotonů a vnitřní energii:

$$p = -\frac{\partial\Omega}{\partial V} = \frac{1}{3}\,\frac{1}{\pi^2\hbar^3c^3}\int_0^\infty \frac{\varepsilon^3}{\mathrm{e}^{\beta\varepsilon}-1}\,\mathrm{d}\varepsilon\,, \tag{3.160}$$

$$\bar{N} = \int \bar{N}_\varepsilon\,\mathrm{d}\Gamma_\varepsilon = \frac{V}{\pi^2\hbar^3c^3}\int_0^\infty \frac{\varepsilon^2}{\mathrm{e}^{\beta\varepsilon}-1}\,\mathrm{d}\varepsilon\,, \tag{3.161}$$

$$U = \int_0^\infty \varepsilon\bar{N}_\varepsilon\,\mathrm{d}\Gamma_\varepsilon = \frac{V}{\pi^2\hbar^3c^3}\int_0^\infty \frac{\varepsilon^3}{\mathrm{e}^{\beta\varepsilon}-1}\,\mathrm{d}\varepsilon\,. \tag{3.162}$$

Po zavedení intenzivních veličin (poslední dva výrazy vydělíme objemem) máme:

$$p = \frac{1}{3}\frac{1}{\pi^2\hbar^3c^3}\int_0^\infty \frac{\varepsilon^3}{\mathrm{e}^{\beta\varepsilon}-1}\,\mathrm{d}\varepsilon\,, \tag{3.163}$$

$$n = \frac{1}{\pi^2\hbar^3c^3}\int_0^\infty \frac{\varepsilon^2}{\mathrm{e}^{\beta\varepsilon}-1}\,\mathrm{d}\varepsilon\,, \tag{3.164}$$

$$u = \frac{1}{\pi^2\hbar^3c^3}\int_0^\infty \frac{\varepsilon^3}{\mathrm{e}^{\beta\varepsilon}-1}\,\mathrm{d}\varepsilon\,. \tag{3.165}$$

Všimněte si, že i bez provedení integrace zjistíme porovnáním rovnic (3.163) a (3.165) vztah mezi tlakem záření a hustotu energie

► $$p = \frac{1}{3}u\,. \tag{3.166}$$

Ze vztahu (3.165) nalezneme snadno diferenciál hustoty energie

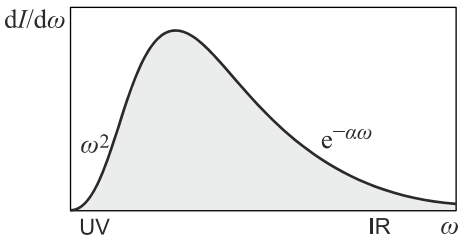
$$\mathrm{d}u = \frac{1}{\pi^2\hbar^3c^3}\frac{\varepsilon^3}{\mathrm{e}^{\beta\varepsilon}-1}\mathrm{d}\varepsilon\,. \tag{3.167}$$

Tok energie neboli intenzitu záření ($I = uc$) můžeme nyní napsat jako funkci energie stavu ε, úhlové frekvence ($\varepsilon = \hbar\omega$) nebo vlnové délky ($\omega = 2\pi c/\lambda$):

$$\mathrm{d}I(\varepsilon) = \frac{1}{\pi^2\hbar^3c^2}\frac{\varepsilon^3}{\exp\left(\dfrac{\varepsilon}{k_\mathrm{B}T}\right)-1}\,\mathrm{d}\varepsilon\,; \tag{3.168}$$

$$\mathrm{d}I(\omega) = \frac{\hbar}{\pi^2c^2}\frac{\omega^3}{\exp\left(\dfrac{\hbar\omega}{k_\mathrm{B}T}\right)-1}\,\mathrm{d}\omega\,; \tag{3.169}$$

$$\mathrm{d}I(\lambda) = -16\pi^2\hbar c^2\frac{\lambda^{-5}}{\exp\left(\dfrac{2\pi\hbar c}{\lambda k_\mathrm{B}T}\right)-1}\,\mathrm{d}\lambda\,. \tag{3.170}$$



Obr. 116: Planckův vyzařovací zákon.

Jde o slavný Planckův vyzařovací zákon odvozený v roce 1901. Asi nejčastěji se používá intenzita záření připadající na frekvenční interval $\mathrm{d}I/\mathrm{d}\omega$. Průběh je na obrázku 117.

Pro nízké frekvence je $\mathrm{d}I/\mathrm{d}\omega \approx \omega^2$ (ve jmenovateli $\exp[x] - 1 \approx x$). Pro vysoké frekvence dominuje exponenciála a platí $\mathrm{d}I/\mathrm{d}\omega \approx \exp[-\hbar\omega/k_\mathrm{B}T]$. Vztah pro nízké frekvence se nazývá Rayleighův-Jeansův zákon. Byl znám ještě před objevem Planckova zákona. Vztah diverguje pro vysoké frekvence (tzv. UV katastrofa).

Wienův posunovací zákon

Nalezněme nyní maximum vyzařování odpovídající Planckovu zákonu. Toto maximum je závislé na teplotě a určíme ho derivováním vztahu (3.169):

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\omega}\left(\frac{\omega^3}{\exp\left(\hbar\omega/k_\mathrm{B}T\right)-1}\right) = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \frac{\hbar\omega}{k_\mathrm{B}T}\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_\mathrm{B}T}\right) = 3\left[\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_\mathrm{B}T}\right)-1\right].$$

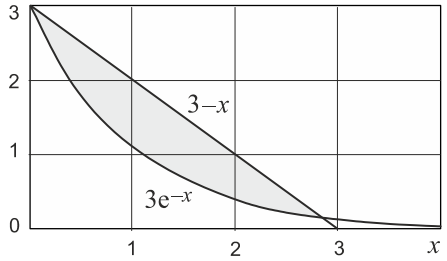
Výsledná rovnice je transcendentní rovnice typu

$$x\,\mathrm{e}^x = 3\left(\mathrm{e}^x - 1\right); \qquad x \equiv \frac{\hbar\omega}{k_\mathrm{B}T}.$$

Obě strany vydělíme exponenciálou a polynomiální závislosti převedeme nalevo:

$$3 - x = 3\,\mathrm{e}^{-x}.$$

V tomto tvaru je možné snadno rovnici řešit graficky, tj. do grafu vykreslíme levou a pravou stranu a nalezneme průsečík obou křivek:



Obr. 117: Grafické řešení rovnice $3 - x = 3\mathrm{e}^{-x}$.

Obě křivky se protínají v bodě $x_0 \simeq 2{,}822$, a proto

$$\omega_\mathrm{max} = \frac{2{,}822\,k_\mathrm{B}T}{\hbar}.$$

Ve vlnové délce platí rozdělení (3.170). Obdobným postupem získáme maximum ve vlnové délce (Wienův posunovací zákon):

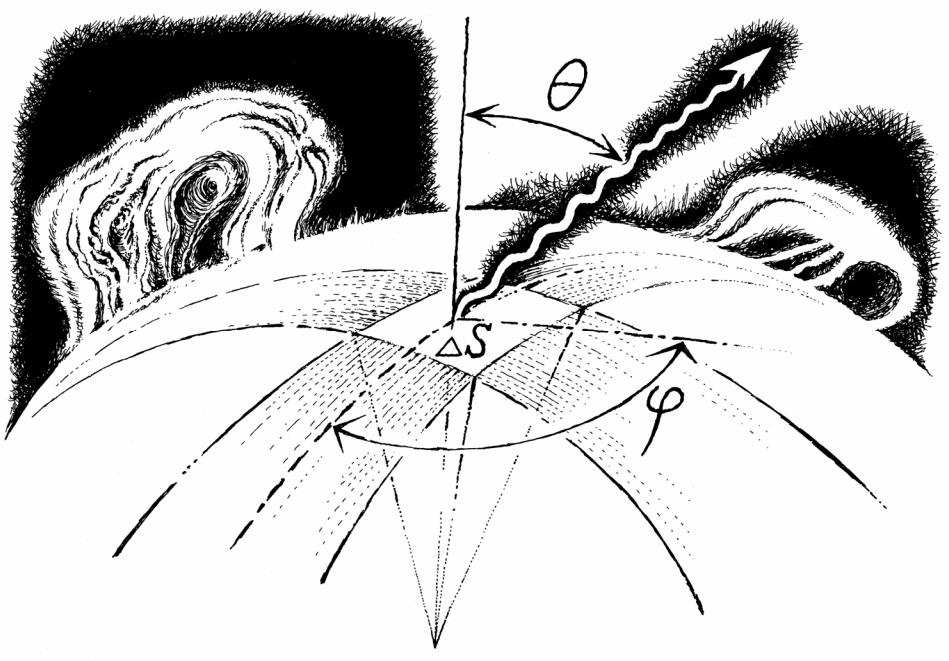
► $$\lambda_\mathrm{max} = \frac{b}{T}; \qquad b = 0{,}00289\ \mathrm{K\,m}. \tag{3.171}$$

Čím teplejší těleso, tím na kratších vlnových délkách vyzařuje. Reliktní záření ($T \sim 3$ K) má maximum pro vlnové délky přibližně 1 mm, člověk ($T \sim 300$ K) pro vlnové délky asi 10 μm, chladné hvězdy ($T \sim 3\,000$ K) vyzařují v IR oboru na délce asi 1 000 nm,

hvězdy jako Slunce ($T \sim 6\,000$ K) ve viditelném spektru na vlnové délce 500 nm a velmi horké hvězdy ($T \sim 30\,000$ K) vyzařují v UV na vlnové délce 100 nm.

Stefanův-Boltzmannův zákon

Z Planckova vyzařovacího zákona můžeme také najít celkovou vyzářenou energii za jednotku času z jednotkové plochy tělesa.



Obr. 118: K integraci Planckova zákona přes úhlové závislosti.

Intenzita vyzářená v daném směru (φ,θ) na frekvenční interval dω je rovna d$I(\omega)$, v celém oboru frekvencí jde o hodnotu

$$I_{\varphi,\theta} = \int_0^\infty \cos\theta \, \mathrm{d}I(\omega) \ . \tag{3.172}$$

Tuto hodnotu budeme středovat přes celý prostorový úhel Ω (k pozorovateli se dostanou paprsky pod různými úhly z různých plošek)

$$I = \left\langle I_{\varphi,\theta} \right\rangle_\Omega = \frac{1}{4\pi} \int I_{\varphi,\theta} \, \mathrm{d}\Omega \tag{3.173}$$

(celý prostorový úhel je 4π). Element prostorového úhlu ve sférických souřadnicích je

$$\mathrm{d}\Omega = \frac{\mathrm{d}S}{r^2} = \frac{\mathrm{d}l_\varphi \, \mathrm{d}l_\theta}{r^2} = \frac{r\,\mathrm{d}\varphi \cdot r \sin\theta \, \mathrm{d}\theta}{r^2} = \sin\theta \, \mathrm{d}\varphi \, \mathrm{d}\theta \ ; \tag{3.174}$$

$$I = \frac{1}{4\pi}\int\left[\int_0^\infty \frac{\hbar}{\pi^2 c^2}\,\frac{\omega^3}{\exp\left(\hbar\omega/k_\mathrm{B}T\right)-1}\cos\theta\,\mathrm{d}\omega\right]\mathrm{d}\Omega\,.$$

Vztah budeme integrovat přes celé frekvenční spektrum a přes vnější prostorovou polokouli:

$$I = \frac{1}{4\pi}\int_0^\infty\left(\int_0^{\pi/2}\left(\int_0^{2\pi}\frac{\hbar}{\pi^2 c^2}\,\frac{\omega^3}{\exp\left(\hbar\omega/k_\mathrm{B}T\right)-1}\cos\theta\sin\theta\,\mathrm{d}\varphi\right)\mathrm{d}\theta\right)\mathrm{d}\omega\,.$$

Integrace přes úhly je triviální a dává

$$I = \frac{\hbar}{4\pi^2 c^2}\int_0^\infty \frac{\omega^3}{\exp\left(\hbar\omega/k_\mathrm{B}T\right)-1}\,\mathrm{d}\omega\,.$$

Jako poslední krok provedeme substituci $x = \hbar\omega/k_\mathrm{B}T$:

$$I = \frac{k_\mathrm{B}^4}{4\hbar^3\pi^2c^2}T^4\int_0^\infty\frac{x^3}{\exp(x)-1}\,\mathrm{d}x = \frac{k_\mathrm{B}^4}{4\hbar^3\pi^2c^2}T^4\cdot\frac{\pi^4}{15} = \frac{\pi^2k_\mathrm{B}^4}{60\hbar^3c^2}T^4.$$

Výpočet integrálu naleznete v dodatku G2. Výsledkem je známý Stefanův-Boltzmannův zákon

$$I = \sigma T^4\,;\qquad \sigma = \frac{\pi^2k_\mathrm{B}^4}{60\hbar^3c^2} = 5{,}8\times10^{-8}\ \mathrm{W\,m^{-2}\,K^{-4}}\,. \tag{3.175}$$

Poznámka: Při odvození Planckova zákona jsme váhový faktor odvodili spojitě. Fotony jsme si ale mohli představit jako stojaté vlny v krabici ve tvaru kvádru, které mají vlnové vektory ve směru souřadnicových os a uzly na hranicích kvádru. Výsledek by byl stejný jako při našem odvození.

◖ Příklad 56: teplota Slunce

Určete povrchovou teplotu Slunce, víte-li, že maximum vyzařování je na vlnové délce 500 nm.

Řešení: Podle Wienova zákona je povrchová teplota rovna

$$T = \frac{b}{\lambda_\mathrm{max}} \sim 5\,800\ \mathrm{K}\,.$$

Horké hvězdy vyzařují obecně na kratší vlnové délce. Typické modré hvězdy mají povrchovou teplotu přes 9 000 K, žluté a zelené hvězdy okolo 6 000 K, červené hvězdy jen asi 3 000 K. Wiennův zákon lze aplikovat i na podstatně chladnější tělesa. Například člověk s povrchovou teplotou cca 310 K vyzařuje přibližně jako černé těleso s maximem vyzařování na vlnové délce 10 μm. V této oblasti musí být proto maximálně citlivá čidla pro detekci osob.

◗

◖ Příklad 57: výkon Slunce

Nalezněte celkový zářivý výkon Slunce, znáte-li jeho povrchovou teplotu $T = 5\,800$ K.

Řešení: Zářivý výkon Slunce určíme ze Stefanova-Boltzmannova zákona:

$$P_{\mathrm{S}} = IS = \sigma T^4 4\pi R_{\mathrm{S}}^2 = 4\times 10^{26}\ \mathrm{W}\,. \tag{3.176}$$

Obrovská hodnota zářivého výkonu Slunce je dána jeho velkou hmotností. V průměru produkuje jeden kilogram sluneční hmoty výkon velmi malý. Při hmotnosti Slunce 2×10^{30} kg jde pouze o 0,0002 W/kg. ◗

◖ Příklad 58: sluneční konstanta

Určete intenzitu slunečního záření v okolí Země.

Řešení: Sluneční konstanta je intenzita slunečního záření (energie kolmo dopadající na jednotkovou plochu za jednotku času) nad atmosférou naší Země. Tuto veličinu můžeme spočítat jako podíl celkového výkonu Slunce a celkové plochy povrchu koule procházející Zemí se středem ve Slunci:

$$I_{\mathrm{Z}} = \frac{P_{\mathrm{S}}}{4\pi R_{\mathrm{ZS}}^2} = 1{,}4\ \mathrm{kW\,m^{-2}}\,. \tag{3.177}$$

U naší Země dopadá na každý metr čtvereční plochy, kolmo postavené ke Slunečnímu záření, výkon 1,4 kW. Tento ohromný výkon je přímo využíván ve slunečních panelech kosmických sond a ve slunečních elektrárnách. Při povrchu Země je tento výkon snížen rozptylem v atmosféře. Kromě jaderné energie pochází veškerá běžně dostupná energie na Zemi ze sluneční energie. Dopadající výkon slunečního záření je například částečně absorbován rostlinami a pomocí fotosyntézy ukládán do energie chemických vazeb. Po mnoha letech je tato energie zpětně využita při spalování uhlí, nafty nebo benzínu. Dopadající záření způsobuje také odpařování vody z povrchu Země a umožňuje tak vodní koloběh. Proto i energie využívaná ve vodních elektrárnách má prapůvod ve sluneční energii. ◗

◖ Příklad 59: teplota planety

Určete rovnovážnou teplotu planety ve vzdálenosti d od mateřské hvězdy, jejíž teplota je T_* a poloměr R_*. Planeta má odrazivost povrchu (albedo) A.

Řešení: Nejprve určíme zářivý výkon hvězdy, který je dán Stefanovým-Boltzmannovým zákonem:

$$P_* = I_* S = \sigma T_*^4\ 4\pi R_*^2\,.$$

Spočtěme intenzitu hvězdného záření na oběžné dráze planety, tedy ve vzdálenosti d (hvězda vyzařuje do celého prostoru, tj. budeme uvažovat povrch koule o poloměru d):

$$I_{\mathrm{P}} = \frac{P_*}{4\pi d^2} = \frac{\sigma T_*^4\ 4\pi R_*^2}{4\pi d^2} = \frac{\sigma T_*^4 R_*^2}{d^2}\,.$$

Toto záření bude planeta absorbovat přibližně průmětem svého povrchu otočeného ke hvězdě, z celkového dopadajícího záření se část A odrazí a $(1–A)$ pohltí. Výkon pohlcovaný planetou tedy bude:

$$P_{\mathrm{P}} = (1-A) I_{\mathrm{P}}\ \pi R_{\mathrm{P}}^2 = (1-A)\frac{\sigma T_*^4 R_*^2}{d^2}\pi R_{\mathrm{P}}^2 .$$

Nyní sestavíme celkovou energetickou bilanci planety za předpokladu, že nemá jiný zdroj energie. Pohlcený výkon se vyzařuje celým povrchem planety dle Planckova resp. Stefanova-Boltzmannova zákona:

$$P_{\mathrm{P}} = \sigma T_{\mathrm{P}}^4\ 4\pi R_{\mathrm{P}}^2 ,$$

$$(1-A)\frac{\sigma T_*^4 R_*^2}{d^2}\pi R_{\mathrm{P}}^2 = \sigma T_{\mathrm{P}}^4\ 4\pi R_{\mathrm{P}}^2 ,$$

$$T_{\mathrm{P}} = \sqrt[4]{\frac{(1-A)}{4}}\ \sqrt{\frac{R_*}{d}}\ T_* . \tag{3.178}$$

Naše Země má albedo kolem 0,25 (75 % záření pohltí) a rovnovážná teplota vychází přibližně 280 K. ◗

◖ Příklad 60: záření husté jako voda

Určete, při jaké fázi expanze vesmíru (při jaké teplotě) mělo záření hustotu stejnou jako voda.

Řešení: Mezi hustotou hmoty a energie platí jednoduchý vztah plynoucí z Einsteinovy formule

$$\rho_{\mathrm{E}} = \rho_{\mathrm{M}}\, c^2 . \tag{3.179}$$

Hustota hmoty ρ_{M} bude odpovídat hustotě vody. Hustotu energie záření určíme z toku energie, který je dán Stefanovým-Boltzmannovým zákonem:

$$\rho_{\mathrm{E}} = \frac{I}{c} = \frac{\sigma T^4}{c} . \tag{3.180}$$

Porovnáním obou vztahů určíme teplotu vesmíru, při které mělo elektromagnetické záření hustotu stejnou jako voda:

$$T = \sqrt[4]{\frac{\rho_{\mathrm{M}}\, c^3}{\sigma}} = 8\times 10^8\ \mathrm{K} .$$

Vesmír měl tuto teplotu asi 4 minuty po Velkém třesku a právě se v něm začínaly tvořit první lehké prvky. ◗

◖ Příklad 61: energie fotonů při expanzi

Určete závislost hustoty energie fotonů na expanzní funkci vesmíru.

Řešení: U soustavy nerelativistických fermionů jsme získali mezi tlakem a hustotou energie vztah $p = ⅔\, u$, pro fotonový plyn vyšlo $p = ⅓\, u$, v klasické mechanice je $p = u$. Proto se někdy zavádí obecný vztah mezi tlakem a hustotou energie ve tvaru

$$p = w u , \tag{3.181}$$

kde je parametr w charakteristický pro danou entitu. Snadno určíme pokles hustoty energie záření ($w = 1/3$) s rostoucími rozměry tepelně izolovaného systému (například celého vesmíru, který nemá žádné okolí). Pro $\mathrm{d}Q = 0$ zůstane z první věty termodynamické jen.

$$\mathrm{d}U = -p\,\mathrm{d}V,$$

$$\mathrm{d}(uV) = -\frac{1}{3}u\,\mathrm{d}V.$$

Předpokládejme, že je objem roven třetí mocnině rozměrů (u vesmíru jde o tzv. expanzní funkci), tj.

$$\mathrm{d}(uR^3) = -\frac{1}{3}u\,\mathrm{d}R^3,$$

$$R^3\,\mathrm{d}u + 3R^2u\,\mathrm{d}R + u\,R^2\,\mathrm{d}R = 0\,,$$

$$\frac{\mathrm{d}u}{u} + 4\frac{\mathrm{d}R}{R} = 0\,,$$

$$\ln uR^4 = K\,,$$

$$u \sim \frac{1}{R^4}\,. \tag{3.182}$$

Hustota energie záření (resp. částice s nulovou klidovou hmotou) klesá jako $u \sim 1/R^4$. To je dáno tím, že s rostoucím objemem klesá hustota jako $1/R^3$, ale navíc se při expanzi prodlužuje vlnová délka fotonů, která expanzi vesmíru „sleduje“. Tím se dále snižuje energie fotonů (je úměrná $1/\lambda$) a výsledný pokles je roven $1/R^4$.

◗

O fyzice fermionů a bosonů se můžete dozvědět více informací v publikacích [43], [44].

3.8 Fluktuace a entropie

3.8.1 Fluktuace

V minulých kapitolách jsme zavedli střední hodnotu dynamické proměnné A středovanou přes soubor

$$\langle A \rangle \equiv \sum_n A_n w_n \ .$$

Definujme nyní odchylku veličiny A od střední hodnoty

$$\Delta A \ \equiv \ A - \langle A \rangle . \tag{3.183}$$

Střední hodnota odchylek je samozřejmě nulová (je zhruba stejně kladných i záporných odchylek od střední hodnoty):

$$\langle \Delta A \rangle = 0 . \tag{3.184}$$

Chceme-li přesto znát průměrnou velikost odchylek, musíme průměrovat buď absolutní hodnoty odchylek, nebo kvadráty odchylek (průměr z kvadrátů je třeba samozřejmě nakonec odmocnit, aby měl výsledek stejný rozměr jako původní veličina):

$$\Delta A_{\text{abs}} \equiv \langle |\Delta A| \rangle ; \quad \Delta A_{\text{kv}} \equiv \sqrt{\langle (\Delta A)^2 \rangle} . \tag{3.185}$$

Druhá z veličin se nazývá *střední kvadratická fluktuace* veličiny A. Velký význam má ve statistice i sama neodmocněná veličina (průměr z kvadrátů odchylek, *rozptyl*, *variance* nebo *druhý centrální moment* veličiny A):

$$\text{var}\, A \equiv \left\langle (\Delta A)^2 \right\rangle = \left\langle \left(A - \langle A \rangle \right)^2 \right\rangle = \left\langle A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \right\rangle$$

$$= \left\langle A^2 \right\rangle - 2\langle A \rangle^2 + \langle A \rangle^2 = \left\langle A^2 \right\rangle - \langle A \rangle^2 .$$

Tedy platí:

$$\text{var}\, A \equiv < (\Delta A)^2 > \ = \ < A^2 > - < A >^2 . \tag{3.186}$$

Fluktuace různých fyzikálních veličin úzce souvisí s důležitými charakteristikami systému. Například fluktuace velikosti rychlosti v souvisí s teplotou, fluktuace energie E souvisí s tepelnou kapacitou, fluktuace počtu částic N s kompresibilitou systému ($\partial V/\partial p$) a fluktuace magnetizace M (hustoty dipólového momentu) se susceptibilitou ($\partial M/\partial H$). Tyto charakteristiky systému lze relativně snadno experimentálně měřit. Při počítačových simulacích je naopak snadné sledovat fluktuace simulovaných veličin a z nich usuzovat na měrná tepla, kompresibilitu a susceptibilitu systému. Nalezněme nyní varianci velikosti rychlosti.

Fluktuace rychlosti

Odvoďme nyní vztahy pro variance (rozptyly) velikosti rychlosti a kvadrátu rychlosti. Využijeme při tom hodnotu střední kvadratické rychlosti a střední rychlosti ze vztahu (3.79), vyšší mocniny rychlosti získáme přímou integrací přes Maxwellovo rozdělení:

$$\mathrm{var}\, v = < v^2 > - < v >^2 = v_{\mathrm{kv}}^2 - v_{\mathrm{s}}^2 = \frac{3k_{\mathrm{B}}T}{m} - \frac{8k_{\mathrm{B}}T}{\pi m} = (3 - 8/\pi)\frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}.$$

$$\mathrm{var}\, v^2 = < v^4 > - < v^2 >^2 = 15\left(\frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}\right)^2 - 9\left(\frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}\right)^2 = 6\left(\frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}\right)^2.$$

Obě variance tedy úzce souvisí s teplotou:

► $$\mathrm{var}\, v = (3 - 8/\pi)\frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}; \tag{3.187}$$

► $$\mathrm{var}\, v^2 = 6\left(\frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}\right)^2. \tag{3.188}$$

Fluktuace energie

Spočtěme z definice tepelnou kapacitu při stálém objemu

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T}\left(\sum_n E_n w_n\right) = \frac{\partial}{\partial T}\left(\sum_n E_n(V)\exp\left[\frac{F(T,V) - E_n(V)}{k_{\mathrm{B}}T}\right]\right) \quad \Rightarrow$$

$$C_V = \sum_n E_n \left(\frac{\frac{\partial F}{\partial T}k_{\mathrm{B}}T - (F - E_n)k_{\mathrm{B}}}{(k_{\mathrm{B}}T)^2}\right)\exp\left[\frac{F - E_n}{k_{\mathrm{B}}T}\right] \quad \Rightarrow$$

$$C_V = \sum_n E_n \left(\frac{-Sk_{\mathrm{B}}T - (F - E_n)k_{\mathrm{B}}}{(k_{\mathrm{B}}T)^2}\right)w_n.$$

Získaný výraz rozdělíme na jednotlivé členy a ze součtu vytkneme veličiny, přes které se nesčítá:

$$C_V = -\frac{S}{k_{\mathrm{B}}T}\sum_n E_n w_n - \frac{F}{k_{\mathrm{B}}T^2}\sum_n E_n w_n + \frac{1}{k_{\mathrm{B}}T^2}\sum_n E_n^2 w_n.$$

Nyní jsou již úpravy jednoduché:

$$C_V = -\frac{S}{k_{\mathrm{B}}T}U - \frac{F}{k_{\mathrm{B}}T^2}U + \frac{1}{k_{\mathrm{B}}T^2} < E^2 > \quad \Rightarrow$$

$$C_V = \frac{-(F + TS)U + < E^2 >}{k_{\mathrm{B}}T^2} = \frac{-UU + < E^2 >}{k_{\mathrm{B}}T^2} = \frac{< E^2 > - < E >^2}{k_{\mathrm{B}}T^2}.$$

Rozptyl energie proto je

$$\text{var}\, E = k_B T^2 C_V \,. \qquad (3.189)$$

Po vztazích (3.187) a (3.188) jsme tedy dokázali další z fluktuačních vztahů. Tepelná kapacita je dána fluktuacemi energie systému! Kdyby energie nefluktuovala, systém by měl při stálém objemu nulovou tepelnou kapacitu.

Disperze dynamické proměnné *A*

Disperze je bezrozměrná charakteristika fluktuací (tzv. relativní fluktuace), jejíž kvadrát je definován vztahem

$$(\delta_A)^2 \equiv \frac{< A^2 > - < A >^2}{< A >^2} \,. \qquad (3.190)$$

V čitateli je variance A, ve jmenovateli kvadrát střední hodnoty. Pro disperzi energie snadno získáme vztah

$$(\delta_E)^2 \equiv \frac{< E^2 > - < E >^2}{< E >^2} = \frac{\text{var}\, E}{U^2} = \frac{k_B T^2 C_V}{U^2} \,. \qquad (3.191)$$

Určeme disperzi energie pro ideální plyn, kde pro počet stupňů volnosti f je $U = fNk_BT/2$ a $C_V = fNk_B/2$:

$$\delta_E \sim \frac{1}{\sqrt{N}} \,. \qquad (3.192)$$

Čím větší počet částic systém obsahuje, tím menší fluktuace vykazuje. Systémy s velkým počtem částic mají minimální relativní fluktuace celkové energie. Systémy s malým počtem částic mají velké relativní fluktuace energie.

Fluktuace fyzikálních veličin mají ve fyzice mimořádný význam. Sama příroda na nejelementárnější úrovni nutí veličiny fluktuovat. Malá fluktuace libovolné zobecněné souřadnice vede podle Heisenbergových relací neurčitosti na velkou fluktuaci odpovídající zobecněné hybnosti a naopak. I sama kvantová pole lze chápat jako zobecněné souřadnice, jimž přísluší zobecněné hybnosti. Ani u polí nelze fluktuace potlačit a jsou jim vlastní. Zodpovídají za tvorbu virtuálních párů ve vakuu i za samotnou složitou strukturu časoprostoru v malých měřítkách. Fluktuace mají význam také v teorii chyb, právě fluktuace totiž způsobují předpovídatelné chyby měření. Další význam fluktuací je v numerických simulacích. Sledováním fluktuací lze zjišťovat měrné teplo, susceptibilitu či kompresibilitu systému. Přestože jsme fluktuacím věnovali relativně malou část této učebnice, mají pro statistickou fyziku mimořádný význam.

◖ Příklad 62: Spektrální čára

Nalezněte profil spektrální čáry způsobený chaotickým pohybem atomů zdroje.

Řešení: Pohybuje-li se zdroj záření vzhledem k pozorovateli, mění se přijímaná frekvence podle Dopplerova jevu

$$\omega = \omega_0 \left(1 + \frac{v}{c}\cos\alpha\right) = \omega_0 \left(1 + \frac{v_z}{c}\right).$$

Je-li zdrojem záření například nějaký zahřátý plyn či obálka hvězdy, jednotlivé atomy se pohybují různými rychlostmi ve shodě s Maxwellovým-Boltzmannovým rozdělením. Pozorovatel vidí jednotlivé emisní akty frekvenčně posunuté a celkovým výsledkem je Dopplerovo rozšíření spektrální čáry. Ze vztahu pro Dopplerův jev určíme fluktuaci frekvence záření:

$$\blacktriangleright \quad \omega-\omega_0=\omega_0\frac{v_z}{c} \quad \Rightarrow \quad \Delta\omega^2=\omega_0^2\frac{v_z^2}{c^2} \quad \Rightarrow \quad \left\langle\Delta\omega^2\right\rangle=\omega_0^2\frac{\left\langle v_z^2\right\rangle}{c^2}=\omega_0^2\frac{k_\mathrm{B}T}{mc^2}\,.$$

Nalezli jsme tak kvadratickou fluktuaci (varianci, rozptyl) frekvence. Je úměrná kvadrátu základní frekvence a podílu tepelné energie a klidové energie jedné zářící částice. Čím chladnější plyn září, tím užší je spektrální čára. Nalezněme nyní přesný profil čáry. Intenzita čáry bude dána zářením, které přichází k pozorovateli od všech částic. Frekvenční závislost je způsobena Dopplerovým jevem. Částice s určitou projekcí rychlosti v_z do směru k pozorovateli budou přispívat k intenzitě na odpovídající frekvenci. Kanonickým rozdělením bude dáno množství částic s danou rychlostí (a tedy i intenzita na dané frekvenci):

$$\mathrm{d}I(v_z)=K\exp\left[-mv_z^2/2k_\mathrm{B}T\right]\mathrm{d}v_z\ .$$

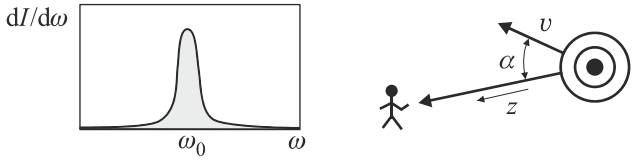
Rychlost v_z převedeme na frekvenci pomocí Dopplerova vztahu

$$\omega=\omega_0\left(1+v_z/c\right) \qquad \Rightarrow \qquad v_z=c\left(\omega-\omega_0\right)/\omega_0$$

a dosadíme do vztahu pro intenzitu:

$$\blacktriangleright \qquad \mathrm{d}I(\omega)=I_0\exp\left[-\frac{mc^2}{2k_\mathrm{B}T}\left(\frac{\omega-\omega_0}{\omega_0}\right)^2\right]\mathrm{d}\omega\ . \tag{3.193}$$

Spektrální čára získává vlivem Dopplerova jevu profil Gaussova balíku.



Obr. 119: Profil čáry způsobený chaotickým pohybem zdrojů.

◗

3.8.2 Entropie

Entropie je veličina, kterou jsme zavedli v termodynamice rovnovážných procesů jako diferenciál tepla vynásobený integračním faktorem. Entropie je úplnou diferenciální formou. Statistická fyzika nám poskytla další možnou (statistickou) definici entropie jako střední hodnotu logaritmu pravděpodobnosti (až na nepodstatnou konstantu):

$$\mathrm{d}S=\frac{\mathrm{d}Q}{T}\,; \qquad S=-k_\mathrm{B}\sum_n w_n\ln w_n\ .$$

Tím entropie souvisí s pravděpodobností realizace daného stavu systému. Pro entropii platí velmi zajímavé tvrzení:

> Entropie rovnovážného stavu je extremální ⇔ systém podléhá kanonickému, respektive grandkanonickému rozdělení ⇔ systém je v termodynamické rovnováze.

Termodynamickou rovnováhou nazýváme stav, ve kterém se systém už nijak nevyvíjí a neexistují žádné makroskopické toky (ty by byly svědectvím o procesech, jež teprve vedou k budoucí termodynamické rovnováze). V rovnováze platí kanonické (grandkanonické) rozdělení a podle předchozího tvrzení entropie dosahuje při rovnováze extrému (maxima). Nerovnovážné děje v uzavřeném izolovaném systému směřují k tomuto maximu a zvyšují neuspořádanost systému. A naopak, přijmeme-li extremálnost entropie v rovnovážném stavu jako výchozí princip, musí platit kanonické (grandkanonické) rozdělení. Dokažme tuto implikaci pro grandkanonické rozdělení:

$$S = -k_{\mathrm{B}} \sum_n w_n \ln w_n ,$$

$$\sum_n w_n = 1 ,$$

$$\sum_n E_n w_n = U ,$$

$$\sum_n N_n w_n = \bar{N} .$$

Jde o hledání extrému entropie za tří vazebních podmínek. Extrémy s vazebními podmínkami se hledají metodou Lagrangeových multiplikátorů. Zavedeme funkci:

$$F(w_l, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) =$$

$$= -k_{\mathrm{B}} \sum_n w_n \ln w_n + \lambda_1 \left(\sum_n w_n - 1 \right) + \lambda_2 \left(\sum_n E_n w_n - U \right) + \lambda_3 \left(\sum_n N_n w_n - \bar{N} \right).$$

Jde o entropii, k níž jsou přidány vazby (nulové výrazy) s multiplikátory λ. Nyní budeme zkoumat podmínku extremálnosti nově zavedené funkce tří proměnných.

$$\frac{\partial F}{\partial w_l} = 0 \quad \Rightarrow \quad -k_{\mathrm{B}} \ln w_l - k_{\mathrm{B}} + \lambda_1 + \lambda_2 E_l + \lambda_3 N_l \quad \Rightarrow \quad w_l = \mathrm{e}^{c_1 + c_2 E_l + c_3 N_l} .$$

Odvozená podmínka je skutečně grandkanonickým rozdělením. Grandkanonické rozdělení je tak přirozeným způsobem provázáno s extremálností entropie. V případě kanonického rozdělení je počet částic konstantní a extremálnost entropie zkoumáme jen za přítomnosti dvou vazeb. Výsledkem podobné úvahy pro konstantní počet částic je kanonické rozdělení.

Entropická síla

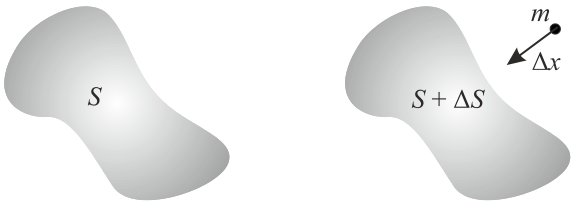
Předpokládejme, že v okolí systému je nějaká hmotná částice, která se pohne. Svým pohybem může způsobit nárůst entropie systému. Situace může být i opačná: změna entropie systému způsobí pohyb okolní částice, tedy situaci, při které na částici působí síla. Energetická bilance bude:

$$T\Delta S = F\Delta x\,, \tag{3.194}$$

resp.

$$\mathbf{F} = T\,\nabla S\,. \tag{3.195}$$

Takovou sílu nazýváme entropickou silou. Do kategorie entropických sil patří například pružnost gumičky, jež souvisí se změnou entropie při jejím natahování. V roce 2010 se holandský fyzik Erik Verlinde pokusil vysvětlit gravitační působení jako entropickou sílu způsobenou kvantovými projevy mikrosvěta. Ve své teorii se opíral jednak o nárůst entropie a jednak o holografický princip (tvrzení, že veškerá informace o systému může být zakódována na méněrozměrném útvaru – například entropie černé díry souvisí s jejím povrchem). Nakolik jsou Verlindeho úvahy utopií, nebo nadějnou hypotézou, není zatím známé.



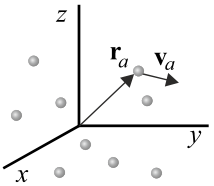
Obr. 120: Princip entropické síly.

O entropii se můžete dozvědět více v publikaci [45]. Verlindeho práce o gravitaci jako entropické síle je dostupná v archivu Cornellovy univerzity [46].

3.9 Magneticky aktivní systémy

3.9.1 Základní pojmy

Soustava nabitých částic



Obr. 121: Soustava nábojů v okolí počátku souřadnic.

Představme si systém složený z N nabitých částic, které jsou schopné reagovat na vnější elektrická a magnetická pole, vytvářet vlastní pole a vzájemně interagovat prostřednictvím těchto polí. Budeme-li chtít úlohu řešit v celé šíři, musíme počítat *pole* z Maxwellových rovnic doplněných o materiálové vztahy (vztahy popisující jak systém reaguje na přítomnost polí jako celek) a dále počítat *pohyby částic* z Lorentzovy pohybové rovnice. Označme polohu a-té částice $\mathbf{r}_a$ a rychlost a-té částice $\mathbf{v}_a$. Soustava částic vykazuje jako celek dipólový elektrický a magnetický moment. Zopakujme v této kapitole některé pojmy z elektřiny a magnetismu, které budeme ke statistickému popisu potřebovat.

Elektrický dipól

Elektrický dipólový moment $\mathbf{p}_\mathrm{E}$ soustavy částic je definován vztahem

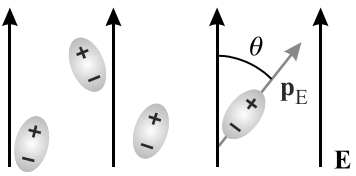
► $$\mathbf{p}_\mathrm{E} = \sum_a Q_a \mathbf{r}_a \,. \tag{3.196}$$

Pro dvojici částic s opačným nábojem a vzájemným polohovým vektorem $\mathbf{d}$ dá tato definice výraz (pro malá d hovoříme o elementárním dipólu)

$$\mathbf{p}_\mathrm{E} = +Q\mathbf{r}_+ - Q\mathbf{r}_- = Q(\mathbf{r}_+ - \mathbf{r}_-) = Q\,\mathbf{d}\,.$$

Interakce dipólu s vnějším elektrickým polem je dána energetickým předpisem

► $$W_\mathrm{int} = -\mathbf{p}_\mathrm{E}\cdot\mathbf{E}\,. \tag{3.197}$$



Obr. 122: Elektrický dipól v elektrickém poli.

Nejnižší interakční energii má dipól mířící ve směru intenzity elektrického pole. Za nízkých teplot nebo v silném poli bude soustava dipólů seřazena ve směru pole. Při vysokých teplotách a slabém poli bude naopak docházet k fluktuacím a poloha dipólu bude popsána odpovídajícím statistickým rozdělením.

◖ Příklad 63: elektrické dipóly

Nalezněte rozdělení souboru elektrických dipólů ve vnějším poli.

$$W_{\mathrm{int}} = -\mathbf{p}_{\mathrm{E}} \cdot \mathbf{E} = -p_{\mathrm{E}} E \cos\theta \qquad \Rightarrow$$

$$\mathrm{d}w(\varphi,\theta) = K \cdot \exp\left[\frac{p_{\mathrm{E}} E \cos\theta}{k_{\mathrm{B}} T}\right] \mathrm{d}\Omega \qquad \Rightarrow$$

$$\mathrm{d}w(\varphi,\theta) = K \cdot \exp\left[\frac{p_{\mathrm{E}} E \cos\theta}{k_{\mathrm{B}} T}\right] \sin\theta \,\mathrm{d}\varphi \,\mathrm{d}\theta \qquad \Rightarrow$$

$$\mathrm{d}w(\theta) = C \cdot \exp\left[\frac{p_{\mathrm{E}} E \cos\theta}{k_{\mathrm{B}} T}\right] \sin\theta \,\mathrm{d}\theta.$$

◗

Polarizací nazýváme hustotu elektrického dipólového momentu

► $$\mathbf{P} = \lim_{\Delta V \to 0} \frac{\Delta \mathbf{p}_{\mathrm{E}}}{\Delta V}. \tag{3.198}$$

Zatímco elektrický dipólový moment $\mathbf{p}_{\mathrm{E}}$ je aditivní veličina, vektor polarizace $\mathbf{P}$ je intenzivní veličina (hustota, jež nezávisí na počtu částic). Materiálový vztah mezi indukcí a intenzitou elektrického pole lze zapsat za pomoci polarizace (polarizace popisuje reakci systému na elektrické pole):

► $$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}(\mathbf{E}). \tag{3.199}$$

Pro slabá pole lze odezvu systému považovat za lineární a provést Taylorův rozvoj vektoru polarizace do prvního řádu (používáme sumační konvenci):

$$P_k = \frac{\partial P_k}{\partial E_l} E_l \equiv \varepsilon_0 \kappa_{kl} \, E_l \,; \tag{3.200}$$

$$\kappa_{kl} \equiv \frac{1}{\varepsilon_0} \frac{\partial P_k}{\partial E_l}. \tag{3.201}$$

Příslušná matice koeficientů se nazývá *tenzor elektrické susceptibility*. Permitivita vakua v definici zajišťuje bezrozměrnost susceptibility. Vektorově lze psát

$$\mathbf{P} = \varepsilon_0 \, \vec{\boldsymbol{\kappa}} \cdot \mathbf{E}. \tag{3.202}$$

Vztah mezi indukcí a intenzitou v limitě slabých polí dává

$$D_k = \varepsilon_{kl} \, E_l \,; \qquad \varepsilon_{kl} \equiv \varepsilon_0 (\delta_{kl} + \kappa_{kl}), \tag{3.203}$$

$$\mathbf{D} = \vec{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \mathbf{E}; \qquad \vec{\boldsymbol{\varepsilon}} = \varepsilon_0 \left(\vec{\mathbf{1}} + \vec{\boldsymbol{\kappa}}\right). \tag{3.204}$$

Matice ε_{kl} se nazývá *tenzor permitivity*. Pole **D** a **E** nemusí mířit ve stejném směru. V další kapitole uvidíme, že tenzor susceptibility, a tedy i permitivity, je symetrický. V homogenním izotropním prostředí je matice susceptibility dokonce diagonální a její všechny prvky na diagonále jsou stejné. V limitě slabých polí platí v tomto případě ještě jednodušší vztah

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E} \,. \tag{3.205}$$

Hustota vnitřní energie soustavy elektrických dipólů v elektrickém poli je dána vztahem (plyne z Maxwellových rovnic, v základních kurzech fyziky jde o hustotu energie kondenzátoru)

$$u_{\mathrm{E}} = \frac{1}{2} \mathbf{E} \cdot \mathbf{D} \,. \tag{3.206}$$

V první větě termodynamické budeme potřebovat jen diferenciál hustoty energie, proto se můžeme omezit na lineární rozvoj vektoru polarizace

$$u_{\mathrm{E}} = \frac{1}{2} \mathbf{E} \cdot \left(\varepsilon_0 \mathbf{E} + \varepsilon_0 \vec{\boldsymbol{\kappa}} \cdot \mathbf{E} \right) = \frac{\varepsilon_0 \mathbf{E}^2}{2} + \frac{\varepsilon_0}{2} \mathbf{E} \cdot \vec{\boldsymbol{\kappa}} \cdot \mathbf{E} \,, \tag{3.207}$$

$$\mathrm{d}u_{\mathrm{E}} = \varepsilon_0 \mathbf{E} \cdot \mathrm{d}\mathbf{E} + \varepsilon_0 \mathbf{E} \cdot \vec{\boldsymbol{\kappa}} \cdot \mathrm{d}\mathbf{E} = \varepsilon_0 \mathbf{E} \cdot \mathrm{d}\mathbf{E} + \mathbf{E} \cdot \mathrm{d}\mathbf{P} \,. \tag{3.208}$$

První člen souvisí s hustotou energie pole, druhý člen odpovídá reakci látky (v našem případě soustavy dipólů) na přiložené elektrické pole. Tato reakce souvisí s polarizací látky a koresponduje s vnitřní energií systému

► $$\mathrm{d}u = \mathbf{E} \cdot \mathrm{d}\mathbf{P} \,. \tag{3.209}$$

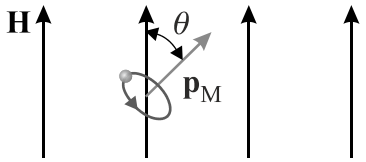
Obdobně jako u elektrického dipólu budeme nyní definovat základní vztahy pro interakci magnetického pole se soustavou magnetických dipólů.

Magnetický dipól

Magnetický dipólový moment soustavy částic je definován vztahem

► $$\mathbf{p}_{\mathrm{M}} = \frac{1}{2} \sum_a Q_a \, \mathbf{r}_a \times \mathbf{v}_a \,. \tag{3.210}$$

Představme si nyní nejjednodušší situaci – jednu nabitou částici obíhající po malé kružnici (tzv. elementární magnetický dipól).



Obr. 123: Magnetický dipól v magnetickém poli.

Pro velikost magnetického dipólového momentu (T označuje periodu oběhu, I proud způsobený oběhem náboje) bude podle (3.210) platit

$$p_{\mathrm{M}} = \frac{Q r v}{2} = \frac{Q r}{2} \frac{2\pi r}{T} = \frac{Q}{T} \pi r^2 = I S \,.$$

Magnetický dipólový moment systému stejných částic souvisí s celkovým momentem hybnosti **L** (hmotnost částice označíme m_0, aby se nepletla s magnetickým kvantovým číslem):

$$\mathbf{p}_{\mathrm{M}} = \frac{Q}{2}\sum_a \mathbf{r}_a \times \mathbf{v}_a = \frac{Q}{2m_0}\sum_a m_0\, \mathbf{r}_a \times \mathbf{v}_a = \frac{Q}{2m_0}\,\mathbf{L}\,. \tag{3.211}$$

Vzhledem k tomu, že je v mikrosvětě moment hybnosti kvantován, je odpovídajícím způsobem kvantován i magnetický moment. Interakce dipólu s vnějším magnetickým polem je dána energetickým předpisem

► $$W_{\mathrm{int}} = -\mathbf{p}_{\mathrm{M}} \cdot \mathbf{B} = -\mu_0\, \mathbf{p}_{\mathrm{M}} \cdot \mathbf{H}\,. \tag{3.212}$$

Magnetické dipóly, obdobně jako elektrické dipóly, mají snahu se seřadit ve směru magnetického pole, kdy mají nejnižší možnou energii. Hustotu magnetického dipólového momentu

► $$\mathbf{M} = \lim_{\Delta V \to 0} \frac{\Delta \mathbf{p}_{\mathrm{M}}}{\Delta V} \tag{3.213}$$

nazýváme *magnetizace*. Zatímco magnetický dipólový moment $\mathbf{p}_{\mathrm{M}}$ je aditivní veličina, vektor magnetizace **M** je intenzivní veličina (hustota, jež nezávisí na počtu částic). Materiálový vztah mezi indukcí a intenzitou magnetického pole lze zapsat s pomocí vektoru magnetizace (magnetizace popisuje reakci systému na magnetické pole):

► $$\mathbf{B} = \mu_0 \left[\mathbf{H} + \mathbf{M}(\mathbf{H})\right]. \tag{3.214}$$

Pro slabá pole lze odezvu systému považovat za lineární a provést Taylorův rozvoj vektoru magnetizace do prvního řádu (používáme sumační konvenci):

$$M_k = \frac{\partial M_k}{\partial H_l} H_l = \chi_{kl}\, H_l\,; \tag{3.215}$$

► $$\chi_{kl} \equiv \frac{\partial M_k}{\partial H_l}\,. \tag{3.216}$$

Příslušná matice koeficientů se nazývá *tenzor magnetické susceptibility*. Vektorově lze psát

$$\mathbf{M} = \vec{\vec{\chi}} \cdot \mathbf{H}\,. \tag{3.217}$$

Vztah mezi indukcí a intenzitou v limitě slabých polí dává

$$B_k = \mu_{kl}\, H_l\,; \qquad \mu_{kl} \equiv \mu_0(\delta_{kl} + \chi_{kl})\,. \tag{3.218}$$

$$\mathbf{B} = \vec{\vec{\mu}} \cdot \mathbf{H}\,; \qquad \vec{\vec{\mu}} = \mu_0 \left(\vec{\vec{1}} + \vec{\vec{\chi}}\right). \tag{3.219}$$

Matice μ_{kl} se nazývá tenzor permeability. Pole **B** a **H** nemusí mířit ve stejném směru. V další kapitole uvidíme, že tenzor susceptibility, a tedy i permeability, je symetrický. V homogenním izotropním prostředí je matice susceptibility dokonce diagonální a její všechny prvky na diagonále jsou stejné. V limitě slabých polí platí v tomto případě ještě jednodušší vztah

$$\mathbf{B} = \mu\, \mathbf{H}\,. \tag{3.220}$$

Hustota vnitřní energie soustavy elektrických dipólů v magnetickém poli je dána vztahem (plyne z Maxwellových rovnic, v základních kurzech fyziky jde o hustotu energie cívky)

$$u_{\mathrm{M}} = \frac{1}{2}\mathbf{H}\cdot\mathbf{B}\,. \tag{3.221}$$

V první větě termodynamické budeme potřebovat jen diferenciál hustoty energie, proto se můžeme omezit na lineární rozvoj vektoru magnetizace

$$u_{\mathrm{M}} = \frac{\mu_0}{2}\mathbf{H}\cdot\left(\mathbf{H}+\tilde{\boldsymbol{\chi}}\cdot\mathbf{H}\right) = \frac{\mu_0\mathbf{H}^2}{2} + \frac{\mu_0}{2}\mathbf{H}\cdot\tilde{\boldsymbol{\chi}}\cdot\mathbf{H}\,, \tag{3.222}$$

$$\mathrm{d}u_{\mathrm{M}} = \mu_0\mathbf{H}\cdot\mathrm{d}\mathbf{H} + \mu_0\mathbf{H}\cdot\tilde{\boldsymbol{\chi}}\cdot\mathrm{d}\mathbf{H} = \mu_0\mathbf{H}\cdot\mathrm{d}\mathbf{H} + \mu_0\,\mathbf{H}\cdot\mathrm{d}\mathbf{M}\,. \tag{3.223}$$

První člen souvisí s hustotou energie pole, druhý člen odpovídá reakci látky (v našem případě soustavy dipólů) na přiložené magnetické pole. Tato reakce souvisí s magnetizací látky a koresponduje s vnitřní energií systému

► $$\mathrm{d}u = \mu_0\,\mathbf{H}\cdot\mathrm{d}\mathbf{M}\,. \tag{3.224}$$

3.9.2 Magneticky aktivní materiály

První věta termodynamická a volná energie

Pro interakci elektrických a magnetických polí se systémem známe jen hustotu vnitřní energie. Proto budeme muset i první větu termodynamickou přepsat do hustot. Zaveďme

$$u = \frac{U}{V}\,;\qquad s = \frac{S}{V}\,;\qquad f = \frac{F}{V}\,;\qquad n = \frac{N}{V}\,. \tag{3.225}$$

Postupně jde o hustotu vnitřní energie, hustotu entropie, hustotu volné energie a koncentraci částic. Pozor na kolize tohoto zavedení. Písmen abecedy je žalostně málo, a tak v místech, kde je význam veličiny zřejmý, použijeme k označení i písmeno, které má již jiný význam (typické kolize: magnetické kvantové číslo – hmotnost, elektrický dipólový moment – hybnost, hustota volné energie – počet stupňů volnosti, hustota hmoty – hustota pravděpodobnosti atd.). Převeďme do hustot první větu termodynamickou (3.7) pro konstantní počet částic:

$$\mathrm{d}u = T\,\mathrm{d}s - \frac{1}{V}\,p\,\mathrm{d}V\,.$$

Objem není intenzivní veličinou a jeho výskyt ve vztahu pro hustotu energie je nepřijatelný, proto ho vyjádříme za pomoci hustoty hmoty:

$$\rho V = M \qquad \Rightarrow \qquad \rho\,\mathrm{d}V + V\,\mathrm{d}\rho = 0 \qquad \Rightarrow \qquad -\frac{\mathrm{d}V}{V} = \frac{\mathrm{d}\rho}{\rho}\,.$$

První věta termodynamická (zapsaná v hustotách) bude mít nyní tvar:

► $$\mathrm{d}u = T\,\mathrm{d}s + \frac{p}{\rho}\,\mathrm{d}\rho\,. \tag{3.226}$$

Nyní přejděme k elektricky a magneticky aktivním systémům. Na pravé straně přibudou vnitřní energie systému v elektrickém a magnetickém poli (3.209) a (3.224):

► $$\mathrm{d}u = T\,\mathrm{d}s + \frac{p}{\rho}\mathrm{d}\rho + \mathbf{E}\cdot\mathrm{d}\mathbf{P} + \mu_0\mathbf{H}\cdot\mathrm{d}\mathbf{M}\,. \tag{3.227}$$

V zákonu zachování energie se objevují další členy vyjadřující, že systém může konat práci elektricky a magneticky. Nezapomeňte, že poslední členy jsou skalárním součinem, tj. každý z nich je součtem tří členů. Proveďme zúplnění diferenciálů prvního, třetího a čtvrtého členu na pravé straně:

$$\mathrm{d}(u - Ts - \mathbf{E}\cdot\mathbf{P} - \mu_0\mathbf{H}\cdot\mathbf{M}) \;=\; -s\,\mathrm{d}T + \frac{p}{\rho}\mathrm{d}\rho - \mathbf{P}\cdot\mathrm{d}\mathbf{E} - \mu_0\mathbf{M}\cdot\mathrm{d}\mathbf{H}\,.$$

Získáváme tak vztah pro hustotu volné energie a její diferenciál:

$$f = u - Ts - \mathbf{E}\cdot\mathbf{P} - \mu_0\mathbf{H}\cdot\mathbf{M}\,;$$

$$\mathrm{d}f = -s\,\mathrm{d}T + \frac{p}{\rho}\mathrm{d}\rho - \mathbf{P}\cdot\mathrm{d}\mathbf{E} - \mu_0\mathbf{M}\cdot\mathrm{d}\mathbf{H}\,; \tag{3.228}$$

$$f = f(T,\rho,\mathbf{E},\mathbf{H})\,.$$

Derivace hustoty volné energie podle jejích proměnných dají jednotlivé koeficienty diferenciálu:

$$s = -\frac{\partial f}{\partial T}\,; \qquad p = \rho\frac{\partial f}{\partial \rho}\,; \qquad \mathbf{P} = -\frac{\partial f}{\partial \mathbf{E}}\,; \qquad \mathbf{M} = -\frac{1}{\mu_0}\frac{\partial f}{\partial \mathbf{H}}\,. \tag{3.229}$$

Znalost hustoty volné energie umožňuje zjistit hustotu entropie, stavovou rovnici, vektor polarizace a vektor magnetizace, tedy reakce vyvolané v systému vnějšími poli. Poslední dvě relace jsou vektorové, ve složkách mají tvar

$$P_k = -\frac{\partial f}{\partial E_k}\,; \qquad M_k = -\frac{1}{\mu_0}\frac{\partial f}{\partial H_k}\,.$$

Pomocí vztahů (3.201) a (3.216) můžeme z hustoty volné energie určit i tenzory elektrické a magnetické susceptibility

$$\kappa_{kl} = -\frac{1}{\varepsilon_0}\frac{\partial^2 f}{\partial E_k\,\partial E_l}\,; \qquad \chi_{kl} = -\frac{1}{\mu_0}\frac{\partial^2 f}{\partial H_k\,\partial H_l} \tag{3.230}$$

a samozřejmě podle vztahů (3.203) a (3.218) i tenzory permitivity a permeability:

$$\varepsilon_{kl} \equiv \varepsilon_0\delta_{kl} - \frac{\partial^2 f}{\partial E_k\,\partial E_l}\,; \qquad \mu_{kl} \equiv \mu_0\delta_{kl} - \frac{\partial^2 f}{\partial H_k\,\partial H_l}\,. \tag{3.231}$$

Na první pohled je patrné, že obě susceptibility, permitivita i permeabilita jsou symetrické tenzory, jak jsme již dříve avizovali. Znalost hustoty volné energie nám umožní výpočet základních charakteristik systému, a to jak termodynamických, tak elektrických a magnetických.

Střední kvadratická fluktuace magnetizace

Uvažujme jen magneticky aktivní materiál. Odvození provedeme diskrétně, magnetizace souvisí s momentem hybnosti částic a ten je kvantovaný. Jednotlivé možné stavy magnetizace budeme indexovat indexem *n*.

$$w_n = \exp\left[\beta(F - W_{\text{int}})\right] = \exp\left[\beta(F + \mu_0 V\, \mathbf{M}_n \cdot \mathbf{H})\right]. \tag{3.232}$$

Střední hodnota magnetizace bude dána vztahem

$$< \mathbf{M} > \equiv \sum_n \mathbf{M}_n w_n \ . \tag{3.233}$$

Nalezněme susceptibilitu, pro jednoduchost jen v jednorozměrném problému:

$$\chi = \frac{\partial < M >}{\partial H} = \frac{\partial}{\partial H}\left(\sum_n M_n \exp\left[\beta f(T,H) V + \beta \mu_0 M_n V H\right] \right);$$

$$\chi = \sum_n \left(M_n \beta \left(\frac{\partial f}{\partial H} V + \mu_0 V M_n \right) \exp[\ \cdots\ ] \right).$$

Podobně jako jsme postupovali u odvození fluktuace energie, oddělíme jednotlivé členy a vytkneme ze součtu veličiny, přes které se nesčítá:

$$\chi = \sum_n \left(M_n \beta \left(-\mu_0 < M > V + \mu_0 M_n V \right) w_n \right);$$

$$\chi = -\beta\mu_0 < M > V \sum_n M_n w_n \ + \ \beta\mu_0 V \sum_n M_n^2 w_n \ ;$$

$$\chi = -\beta\mu_0 V < M >^2 \ + \ \beta\mu_0 V < M^2 > ;$$

$$\chi = \beta\mu_0 V \left(< M^2 > - < M >^2 \right).$$

Získali jsme tak jednoduchý vztah mezi susceptibilitou a fluktuací magnetizace:

► $$\chi = \beta\mu_0 V \left(< M^2 > - < M >^2 \right) = \beta\mu_0 V \operatorname{var} M \ . \tag{3.234}$$

Dokázali jsme tak další z velmi důležitých fluktuačních vztahů.

Zdroje magnetického momentu, Landéův faktor

Zdrojem magnetického momentu částice může být jak orbitální (**L**), tak spinový (**S**) moment hybnosti částice. Jak se vůbec v kvantové teorii sčítají dva momenty hybnosti? Uveďme jen přehled výsledků pro dva momenty označené **L** a **S** bez ohledu na to, co znamenají:

L	$L = \sqrt{l(l+1)}\ \hbar$	$L_3 = m_L \hbar$;	$m_L = -l, -l+1, \ldots, l-1, l$
S	$S = \sqrt{s(s+1)}\ \hbar$	$S_3 = m_S \hbar$;	$m_S = -s, -s+1, \ldots, s-1, s$
$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$	$J = \sqrt{j(j+1)}\ \hbar$;	$J_3 = m_J \hbar$;	$m_J = -j, -j+1, \ldots, j-1, j$

samo výsledné kvantové číslo j může nabývat hodnot $j = |\, l - s \,|, \ldots, l + s$.

I neutrální částice (například neutron) může být zdrojem magnetického dipólového momentu, za který odpovídá nenulový spin. Magnetický dipólový moment (3.211) je modifikován takto:

$$\mathbf{p}_{\mathrm{M}} = g \frac{Q}{2m_0} \mathbf{J} \,. \tag{3.235}$$

Veličina **J** je celkový moment částice a faktor g je charakteristický pro konkrétní částici:

$$g = -2\,; \qquad \text{elektron},$$
$$g = +5{,}68\,; \qquad \text{proton},$$
$$g = -3{,}86\,; \qquad \text{neutron}.$$

Trochu složitější je situace v takovém systému, jakým je celý atom. Zde dochází k *LS* vazbě – interakci kolektivních orbitálních a spinových stupňů volnosti celého systému. Výsledek je shodný se vztahem (3.235), jen faktor g je dán složitější formulí

$$g = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \tag{3.236}$$

a nazývá se *Landéův faktor*. Pro zájemce zde naznačíme odvození tohoto faktoru. V kvantově mechanickém Hamiltoniánu popisuje interakci atomu s vnějším polem člen

$$\hat{H}_{\mathrm{int}} = \mathrm{const}\,(\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}) \cdot \mathbf{H} \,.$$

Koeficient 2 u spinového momentu je dán anomálním magnetickým momentem elektronu. V časovém průměru přispívají k interakci z orbitální i spinové části jen složky rovnoběžné s celkovým momentem **J**. Nalezněme proto projekci kombinace vektorů **L**+2**S** do celkového momentu **J**:

$$P_{\mathbf{J}}(\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) = \frac{|\mathbf{J}\rangle\langle\mathbf{J}|\mathbf{L} + 2\mathbf{S}\rangle}{\langle\mathbf{J}|\mathbf{J}\rangle} = \frac{\mathbf{J} \cdot (\mathbf{L} + 2\mathbf{S})}{J^2} \mathbf{J} \,.$$

Tuto projekci se pokusíme převést na kvadráty velikostí základních momentů J^2, L^2, S^2:

$$P_{\mathbf{J}}(\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) = \frac{\mathbf{J} \cdot (\mathbf{J} + \mathbf{S})}{J^2} \mathbf{J} = \frac{J^2 + \mathbf{J} \cdot \mathbf{S}}{J^2} \mathbf{J} = \frac{J^2 + (\mathbf{L} + \mathbf{S}) \cdot \mathbf{S}}{J^2} \mathbf{J} = \frac{J^2 + S^2 + \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}}{J^2} \mathbf{J} \,.$$

Člen **LS** určíme z rovnosti $J^2 = (\mathbf{L}+\mathbf{S})^2 = L^2 + 2\mathbf{LS} + S^2$. Výsledek je

$$P_{\mathbf{J}}(\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) = \frac{J^2 + S^2 + (J^2 - L^2 - S^2)/2}{J^2} \mathbf{J} = \frac{3J^2 + S^2 - L^2}{2J^2} \mathbf{J} = \left(1 + \frac{J^2 + S^2 - L^2}{2J^2}\right) \mathbf{J} \,.$$

Využijeme-li nyní kvantování těchto veličin, máme výsledek

$$P_{\mathbf{J}}(\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \;=\; \left(1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}\right) \mathbf{J} \,.$$

Faktor v závorce je právě Landéův faktor, který multiplikativně modifikuje celkový moment hybnosti **J** v důsledku *LS* vazby.

Interakce magnetických momentů

Energie interakce magnetického momentu s vnějším polem je dána vztahem

$$W_{\text{int}} = -\,\mathbf{p}_{\text{M}} \cdot \mathbf{B} = -\,g\,\frac{Q}{2m_0}\,\mathbf{J}\cdot\mathbf{B}\,. \tag{3.237}$$

Moment **J** bude mít snahu orientovat se buď ve směru vnějšího pole, nebo proti směru pole, podle znaménka faktoru g. Celý výraz se často píše v podobě

$$W_{\text{int}} = -\,g\,\frac{Q}{2m_0}\,J_z B = -\,g\,\frac{Q}{2m_0}\,m_J\,\hbar\,B = -\,m_J\,g\,\frac{Q\hbar}{2m_0}\,B\,.$$

Zlomek ve výrazu se nazývá *Bohrův magneton* μ_{B} (předpokládáme, že jde o elementární náboj $Q = e$) – znaménko je nepodstatné, protože magnetické kvantové číslo m_J probíhá záporné i kladné hodnoty.

► $$W_{\text{int}} = m_J g \mu_{\text{B}} B\,; \quad \mu_{\text{B}} \equiv \frac{e\hbar}{2m_0}\,, \quad m_J = -j, -j+1, \ldots, j-1, j\,. \tag{3.238}$$

Pro systém magnetických momentů musíme uvážit i interakci momentů mezi sebou a namísto indukce magnetického pole je výhodná intenzita pole, která souvisí s volnou energií systému:

$$W_{\text{int}} = \sum_{a,b} W_0(\mathbf{p}_a, \mathbf{p}_b) - g\mu_0\,\frac{Q}{2m_0}\sum_a \mathbf{J}_a \cdot \mathbf{H}\,. \tag{3.239}$$

Zeemanův jev

Ve vnějším magnetickém poli se původně jedna energetická hladina rozštěpí podle vztahu (3.238) na $2j+1$ podhladin. To vede na štěpení spektrálních čar nazývané *Zeemanův jev*. Rozdíl energie dvou sousedních podhladin je $\Delta E = g\mu_{\text{B}}B$, z tohoto vztahu můžeme snadno určit vzdálenost mezi rozštěpenými čarami.

Magnetická rezonance

Systém magnetických dipólů ve vnějším magnetickém poli je schopen pohlcovat kvanta elektromagnetického záření, která odpovídají rozdílu energetických hladin interakce dipólu s vnějším polem. Procházející elektromagnetické pole vlastně způsobuje přeskoky magnetického dipólu mezi stavy s různým m_J. Energetické spektrum (3.238) je ekvidistantní a rezonanční (pohlcované) fotony tak musí splňovat relaci:

$$\hbar\omega_{\text{rez}} = g\mu_{\text{B}}B\,.$$

Snadno dopočteme rezonanční frekvenci

$$f_{\text{rez}} = K\,B\,; \qquad K = \begin{cases} 1{,}44\ \text{MHz}\,\text{T}^{-1} & \text{pro atom,} \\ 0{,}76\ \text{kHz}\,\text{T}^{-1} & \text{pro jádro.} \end{cases} \tag{3.240}$$

Magnetická rezonance se využívá jako úspěšná zobrazovací metoda. Předmět je vnořen do pole B a ozářen elektromagnetickým zářením rezonanční frekvence. Rezonance na celých atomech (respektive jejich obalech) se nazývá *elektronová magnetická rezonance* (EMR) a rezonance na částicích jádra *jaderná magnetická rezonance* (NMR – *Nuclear Magnetic Resonation*).

Curieův zákon

Uvažujme nyní nejjednodušší možný systém složený z N elementárních magnetických dipólů, které mohou mít jen dvě projekce magnetického dipólového momentu $\pm\mu_B/2$ (jsou například tvořeny částicemi se spinem ½). Interakce jednoho dipólu s vnějším magnetickým polem má jen dvě možné energetické hodnoty:

$$W_{\text{int}} = -\mathbf{p}_{\text{M}} \cdot \mathbf{B} = \pm\frac{\mu_{\text{B}}}{2} B = \pm\frac{\mu_0 \mu_{\text{B}} H}{2} .$$

Ve skalárním součinu se uplatnila jen projekce magnetického dipólového momentu do směru pole, tedy jedna ze dvou možných hodnot. Partiční suma jednoho dipólu bude mít jen dva členy:

$$z = \exp\left[+\frac{\mu_0 \mu_{\text{B}} H}{2k_{\text{B}}T}\right] + \exp\left[-\frac{\mu_0 \mu_{\text{B}} H}{2k_{\text{B}}T}\right] = 2\,\text{ch}\left[\frac{\mu_0 \mu_{\text{B}} H}{2k_{\text{B}}T}\right].$$

Partiční suma soustavy N vzájemně neinteragujících dipólů bude

$$Z_N = z^N = \left(2\,\text{ch}\left[\frac{\mu_0 \mu_{\text{B}} H}{2k_{\text{B}}T}\right]\right)^N .$$

Standardním způsobem určíme hustotu volné energie a z ní magnetizaci, susceptibilitu a permeabilitu:

$$f = -\frac{1}{V} k_{\text{B}}T \ln Z_N = -\frac{Nk_{\text{B}}T}{V} \ln\left[2\,\text{ch}\left(\frac{\mu_0 \mu_{\text{B}} H}{2k_{\text{B}}T}\right)\right],$$

$$M = -\frac{1}{\mu_0}\frac{\partial f}{\partial H} = n\,\frac{\mu_{\text{B}}}{2}\,\text{th}\left[\frac{\mu_0 \mu_{\text{B}} H}{2k_{\text{B}}T}\right], \tag{3.241}$$

$$\chi = -\frac{1}{\mu_0}\frac{\partial^2 f}{\partial H^2} = n\,\frac{\mu_0 \mu_{\text{B}}^2}{4k_{\text{B}}T}\cosh^{-2}\left[\frac{\mu_0 \mu_{\text{B}} H}{2k_{\text{B}}T}\right], \tag{3.242}$$

$$\mu \equiv \mu_0 - \frac{\partial^2 f}{\partial H^2} = \mu_0 + n\,\frac{\mu_0^2 \mu_{\text{B}}^2}{4k_{\text{B}}T}\cosh^{-2}\left[\frac{\mu_0 \mu_{\text{B}} H}{2k_{\text{B}}T}\right]. \tag{3.243}$$

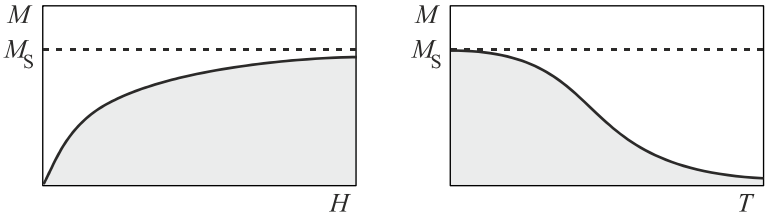
I takto jednoduchý systém (dvě možnosti orientace elementárních magnetů) má nelineární chování. Magnetizace není lineární funkcí intenzity pole, ale obecnou funkcí $M = M(H)$. Magnetizace vykazuje při vysoké intenzitě pole a nízké teplotě saturaci (získá maximální hodnotu nezávislou na velikosti intenzity pole). Všechny spiny jsou za těchto podmínek zorientovány ve směru pole. Hodnota saturace je

$$M_{\text{S}} = n\,\mu_{\text{B}}/2 .$$

Provedeme-li linearizaci vztahu pro slabá pole, dostáváme

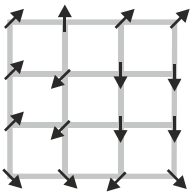
$$M = \chi H\,; \qquad \chi \equiv \left.\frac{\partial M}{\partial H}\right|_{H=0} = \frac{n\mu_0\mu_B^2}{4k_B T}\ . \tag{3.244}$$

Susceptibilita je nepřímo úměrná teplotě magnetika. Tento vztah se nazývá *Curieův zákon* a platí jen v limitě slabých polí. Je pojmenován podle francouzského fyzika Pierra Curieho (1859–1906).



Obr. 124: Závislost magnetizace na magnetickém poli a na teplotě.

3.9.3 Mřížové modely



Připustíme-li více možných hodnot spinů a jejich interakci navzájem, je výpočet partiční sumy většinou nepřekonatelným problémem. Proto se často využívá relativně jednoduchý model spinů lokalizovaných ve vrcholech pravoúhlé mříže, který v mnoha případech svým chováním velmi dobře odpovídá skutečným materiálům. Zpravidla se předpokládá, že spolu vzájemně interagují jen nejbližší spiny v sousedních vrcholech mříže, takové sousední vrcholy označujeme $<a, b>$. Interakční předpis je analogický výrazu (3.239), jen součet vzájemné interakce probíhá přes nejbližší sousedy:

$$W_{\text{int}} = \sum_{<a,b>} W_0(\boldsymbol{\sigma}_a, \boldsymbol{\sigma}_b) \ - \ K \sum_a \boldsymbol{\sigma}_a \cdot \mathbf{H}. \tag{3.245}$$

Veličiny $\boldsymbol{\sigma}$ charakterizují spinový moment a jsou úměrné magnetickému momentu. Podle typu vzájemné interakce W_0 rozlišujeme jednotlivé modely.

Isingův model

Jde o nejjednodušší možný model. Spiny mohou nabývat jen dvou hodnot (například „nahoru“ a „dolů“) a interakční energie je dána předpisem (veškeré koeficienty a konstanty jsou zahrnuty do interakčních konstant J a K)

$$W_{\text{int}} = -J \sum_{<a,b>} \sigma_a \sigma_b - K \sum_a \sigma_a H; \qquad \sigma \in \{-1, +1\}\,. \tag{3.246}$$

Hodnota +1 označuje spin mířící vzhůru, hodnota –1 spin mířící dolů. Pro $J > 0$ přispějí dva sousední shodně orientované spiny k energii hodnotou $-J$, dva opačně orientované spiny hodnotou $+J$. Při nízkých teplotách má systém snahu zaujmout co nejnižší energii a vznikají proto domény souhlasně orientovaných spinů (*Weissovy domény*). Jejich teorii rozpracoval francouzský fyzik Pierre-Ernest Weiss (1865–1940). Při vysokých teplotách jsou spiny orientovány náhodně. Již tento jednoduchý model vykazuje pro $J > 0$ základní vlastnosti *feromagnetik*. Při nízkých teplotách existuje *uspořádaná fáze*, při vysokých teplotách *chaotická fáze*. Mezi oběma fázemi nastává fázový přechod při tzv. Curieově teplotě T_C. Pro $J < 0$ jsou při nízkých teplotách preferovány nesouhlasně orientované spiny a systém vykazuje *antiferomagnetické* vlastnosti. V jednorozměrném problému je nalezení partiční sumy i za přítomnosti vnějších polí triviální záležitostí. Úlohu analyticky vyřešil v rámci své disertační práce Ernst Ising (1900–1998) v roce 1925. Ukázal, že v lineárním řetězci spinů je situace natolik jednoduchá, že nedochází k fázovému přechodu. Ve dvou dimenzích vyřešil problém s pomocí vytříbených grafických metod Lars Onsager (1903–1976) v roce 1944. Ve 2D Isingově modelu již Curieův fázový přechod existuje. Obecné analytické řešení ve třech dimenzích není známé a partiční suma, magnetizace a susceptibilita se dohledávají numericky.

Isingův výpočet v jedné dimenzi (1925)

Předpokládejme jednorozměrný řetězec N spinů na mříži s periodickými okrajovými podmínkami, tedy platí

$$\sigma_{N+1} = \sigma_1 \,. \tag{3.247}$$

Pro partiční sumu bude platit

$$Z_N = \sum_{\sigma} \mathrm{e}^{\left[\beta J \sum_{a=1}^{N} \sigma_a \sigma_{a+1} \; + \; \beta K \sum_{a=1}^{N} \sigma_a H \right]} . \tag{3.248}$$

Nyní provedeme symetrizaci druhé části výrazu

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\sigma} \mathrm{e}^{\left[\beta J \sum_{a=1}^{N} \sigma_a \sigma_{a+1} \; + \; \beta K \frac{1}{2} \sum_{a=1}^{N} (\sigma_a + \sigma_{a+1}) H \right]} = \\ &= \sum_{\sigma} \prod_{a=1}^{N} \mathrm{e}^{\left[\beta J \sigma_a \sigma_{a+1} \; + \; \frac{1}{2} \beta K (\sigma_a + \sigma_{a+1}) H \right]} . \end{aligned} \tag{3.249}$$

Zavedeme-li matici ($\sigma_a = \pm 1$)

$$T_{\sigma_a \sigma_b} = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{\beta J + \beta K H}, & \mathrm{e}^{-\beta J} \\ \mathrm{e}^{-\beta J}, & \mathrm{e}^{\beta J - \beta K H} \end{pmatrix} . \tag{3.250}$$

můžeme partiční sumu přepsat do tvaru

$$Z_N = \sum_{\sigma} \prod_{a=1}^{N} T_{\sigma_a \sigma_{a+1}} = \sum_{\sigma_k = \pm 1} T_{\sigma_1 \sigma_2} T_{\sigma_2 \sigma_3} \cdots T_{\sigma_N \sigma_1} = \mathrm{Tr}\left(T^N \right) . \tag{3.251}$$

Stopa je invariantem a je stejná v jakékoli bázi. V bázi z vlastních vektorů bude mít matice T na diagonále vlastní čísla, ostatní prvky budou nulové, tj.

$$T = \begin{pmatrix} \lambda_1, & 0 \\ 0, & \lambda_2 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \tag{3.252}$$

$$Z_N = \mathrm{Tr}\, T^N = \lambda_1^N + \lambda_2^N . \tag{3.253}$$

Předpokládejme, že vlastní čísla jsou seřazena tak, že první z nich je větší. Potom pro velká N bude platit

$$Z_N = \mathrm{Tr}\, T^N = \lambda_1^N \left[1 + (\lambda_2/\lambda_1)^N \right] \approx \lambda_1^N . \tag{3.254}$$

Klíčovou veličinou je opět volná energie, kterou už snadno určíme:

$$\begin{aligned} F &= -k_\mathrm{B} T \ln \lambda_1^N = -N k_\mathrm{B} T \ln \lambda_1 ; \\ f(n,T,H) &= -n k_\mathrm{B} T \ln \lambda_1(T,H) . \end{aligned} \tag{3.255}$$

Dále už standardním postupem určíme další veličiny, zejména magnetizaci $M = -\partial f/\partial H$, susceptibilitu $\chi = -\partial^2 f/\partial H^2$, tepelnou kapacitu atd. Magnetizace roste z nulové hodnoty do maximální (nasycené) hodnoty a její průběh odpovídá klasickému feromegnetiku. Výpočet vlastních čísel matice (3.250) je přímočarý, vyjde

$$\lambda_{1,2} = \mathrm{e}^{\beta J} \,\mathrm{ch}(\beta K) \pm \sqrt{\mathrm{e}^{2\beta J} \,\mathrm{ch}^2(\beta K) - 2\,\mathrm{sh}(2\beta J)} . \tag{3.256}$$

Pottsův model

Jde o Q stavový model s podobným interakčním předpisem jako Isingův model:

$$W_\mathrm{int} = -\sum_{<a,b>} J \delta_{\sigma_a \sigma_b} ; \qquad \sigma \in \{1, \ldots, Q\} . \tag{3.257}$$

Spiny se mohou orientovat do Q směrů, sousední souhlasně orientované spiny přispějí k energii hodnotou $-J$, ostatní k energii nepřispějí. Model má opět uspořádanou nízkoteplotní fázi, ve které se vyskytují domény souhlasně orientovaných spinů, a vysokoteplotní chaotickou fázi. Obě fáze jsou odděleny Curieovým fázovým přechodem, který probíhá při Curieově teplotě T_C. Model je pojmenován podle australského fyzika Renfreye Pottse (1925–2005).

Z_Q model

Jde o Q stavový model s interakcí danou kosinem vzájemného úhlu mezi spiny:

$$W_\mathrm{int} = -\sum_{<a,b>} J \cos(\alpha_a - \alpha_b) ; \qquad \alpha = \frac{2\pi}{Q}\sigma ; \qquad \sigma \in \{1, \ldots, Q\} . \tag{3.258}$$

Model má pro velké hodnoty Q tři fáze: 1) nízkoteplotní uspořádanou fázi s typickými doménami; 2) „soft“ fázi při středních teplotách, při které se sousední spiny svou orientací liší jen velmi málo – vznikají charakteristické víry nebo spinové vlny; 3) vysokoteplotní chaotickou fázi. Fázový přechod z nízkoteplotní fáze k „soft“ fázi se nazývá Curieův přechod (T_C), fázový přechod ze „soft“ fáze do vysokoteplotní fáze se nazývá Kosterlitzův-Thoulessův přechod (T_K). Jde o přechod, při kterém je susceptibilita spojitá. Ke ztrátě uspořádanosti při přechodu ze „soft“ do chaotické fáze dochází díky příčným fluktuacím (tzv. Goldstoneovým modům). Přechod opačným směrem (od

neuspořádané k „soft“ fázi) lze chápat jako narušení rotační symetrie, při kterém se objeví Goldstoneovy mody fluktuací. Přechod je nazván podle amerického fyzika Johna Michaela Kosterlitze a skotského fyzika Davida Thoulesse (1934).

Heisenbergův model

Jde o spojitý model, který připouští veškeré orientace spinů. Energetický předpis interakce je:

$$W_{\text{int}} = -\sum_{<a,b>} J\cos(\alpha_a - \alpha_b)\,; \qquad \alpha \in <0, 2\pi)\,. \tag{3.259}$$

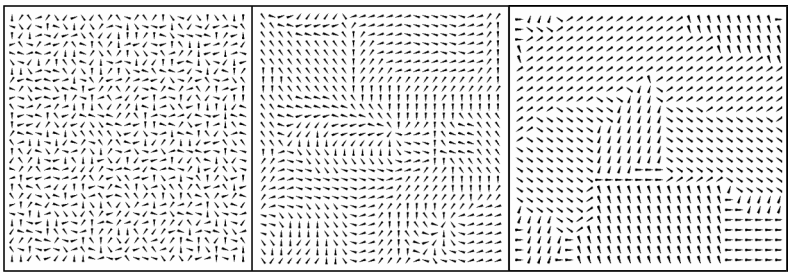
Třírozměrná varianta se nazývá Heisenbergův model, dvojrozměrná varianta se nazývá XY model. Modely mají jen dvě fáze: pro nízkoteplotní „soft“ fázi jsou charakteristické dvojice vírů a spinové vlny; vysokoteplotní fáze má spiny orientovány chaoticky. Obě fáze jsou oddělené Kosterlitzovým-Thoulessovým přechodem. U materiálů tohoto typu neexistuje fáze s doménami. K Heisenbergovým magnetům patří například materiál označovaný GSO s chemickým složením $Gd_2Sn_2O_7$.

Spinová skla

Jde o materiály, u kterých se vazbová konstanta J liší od dvojice spinů ke dvojici. Často má náhodný charakter. Energetický předpis je

$$W_{\text{int}} = -\sum_{<a,b>} J_{ab}\, f(\sigma_a, \sigma_b)\ . \tag{3.260}$$

V takovém materiálu neexistuje korelace na velké vzdálenosti. Pro spinová skla je charakteristická existence mnoha metastabilních stavů, jejichž experimentální studium je mimořádně obtížné. Numerické simulace umožňují alespoň rámcové studium těchto zajímavých materiálů. Ke spinovým sklům patří například materiál s chemickým složením $LiHo_xY_{1-x}F_4$. Pro vysoký podíl holmia jde o feromagnetikum, pro $x < 0{,}25$ jde o spinové sklo. Magnetické momenty holmia interagují téměř výhradě dipólově, energetický předpis je obdobný Isingovu modelu, ale s chaotickým chováním interakční konstanty. Jiným velice zajímavým materiálem je sloučenina $PrAu_2Si_2$. Přestože jde o dobře uspořádanou krystalickou strukturu, při nízkých teplotách vykazuje vlastnosti spinových skel. Mechanizmem vzniku je tzv. dynamická frustrace – jev, při kterém dynamické fluktuace v krystalu znemožní korelace magnetických momentů na větší vzdálenosti. K frustraci dochází tím, že existuje mnoho neslučitelných základních stavů (s nejnižší energií) a jednotlivé silové interakce „soutěží“ o dosažení některého z nich. Výsledkem je vytuhnutí materiálu ve stavu spinového skla s chaotickými vazebními konstantami.



Obr. 126: Monte Carlo simulace Z_Q modelu Metropolisovou metodou. Nalevo je vysokoteplotní chaotická fáze, uprostřed „soft“ fáze a napravo nízkoteplotní domény.

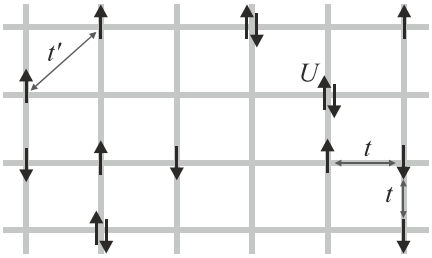
Hubbardův model

Ani bouřlivě se rozvíjející výpočetní technika neumožňuje simulace elektronových systémů s mnoha (například 10^{23}) elektrony. V takových situacích se pokoušíme sledovaný systém rozumně zjednodušit. Natolik rozumně, aby ještě popisoval vlastnosti skutečné látky, kterou chceme zkoumat. Představme si, že elektrony mohou být lokalizovány jen v určitých místech, například ve vrcholech pravidelné mříže. Tak je tomu třeba v krystalických látkách, kde je elektron v blízkosti určitého iontu. Nicméně modely elektronů na mříži mají mnohem širší uplatnění a lze pomocí nich obecně modelovat systémy se silně korelovanými elektrony, například vysokoteplotní supravodiče.

K nejjednodušším modelům tohoto typu patří tzv. Hubbardův model. Elektrony jsou kreovány a anihilovány ve vrcholech mříže tak, aby jejich chování odpovídalo energii systému při dané teplotě. Energie systému se skládá ze dvou odlišných členů:

$$W_{\mathrm{int}} = -t \sum_{<a,b>,\sigma} \left(\hat{\mathbf{a}}^{\dagger}_{a\sigma} \hat{\mathbf{a}}_{b\sigma} + \hat{\mathbf{a}}^{\dagger}_{b\sigma} \hat{\mathbf{a}}_{a\sigma} \right) + U \sum_{a} n_{a\uparrow} n_{a\downarrow} \; ; \quad n_{a\sigma} \equiv \hat{\mathbf{a}}^{\dagger}_{a\sigma} \hat{\mathbf{a}}_{a\sigma} \, . \qquad (3.261)$$

První člen je dán interakcí nejbližších sousedů (součet přes všechny dvojice nejbližších vrcholů). Vazební konstanta této interakce je označena t, symbol $\mathbf{a}^{\dagger}$ označuje kreační operátor elektronu se spinem σ v daném vrcholu, symbol **a** anihilační operátor. Tento člen umožňuje „přeskakování“ či „tunelování“ elektronů z jednoho vrcholu mříže do druhého. Druhá část energie je součtem přes všechny vrcholy, symbol $n_{a\sigma}$ znamená počet jedinců se spinem σ v daném vrcholu. Kladná vazební konstanta U znamená repulzi elektronů na malých vzdálenostech. Pokud je ve vrcholu jeden elektron se spinem ↑ a jeden elektron se spinem ↓, přispějí k celkové energetické bilanci kladnou hodnotou U, pokud je ve vrcholu jediný elektron, přispěje tento vrchol nulovou hodnotou. Za nízkých teplot jsou preferovány stavy s co možná nejnižší energií, tedy jediný elektron ve vrcholu mříže. Oba energetické členy znamenají v jistém smyslu párovou interakci. První člen se týká interakce elektronů ve dvou nejbližších vrcholech mříže. Druhý se týká interakce dvojice elektronů v jednom jediném vrcholu (coulombická repulze). V reálných materiálech je podíl vazebních konstant U/t mezi 10 až 50.



Obr. 127: Hubbardův model.

Model navrhl anglický fyzik John Hubbard (1931–1980) v roce 1963 k popisu chování elektronů v pevných látkách. Pomocí Hubbardova modelu lze snadno simulovat přechod látky mezi vodivým a nevodivým stavem. Dnes se model využívá k popisu chování ultrachladných atomů zachycených v optické mříži (pravidelně se střídající minima a maxima elektrického potenciálu, jež vznikla interferencí dvou nebo více laserových svazků). Původní model byl navržen pro dva fermiony, později se objevila i bosonová varianta Hubbardova modelu a různé další užitečné modifikace. Modely se

nemusí omezovat na pravoúhlou mříž, interakce nemusí probíhat jen mezi nejbližšími sousedy, ale například i mezi sousedy na úhlopříčce s vazební konstantou *t'*, uvažují se modely v mnoha dimenzích atd.

t-J model

V roce 1977 polský fyzik Józef Spałek (*1945) upravil Hubbardův model pro velké hodnoty interakční konstanty U do podoby se dvěma párovými interakcemi mezi nejbližšími vrcholy mříže:

$$W_{\text{int}} = -t \sum_{<a,b>,\sigma} \left(\hat{\mathbf{c}}^{\dagger}_{a\sigma} \hat{\mathbf{c}}_{b\sigma} + \hat{\mathbf{c}}^{\dagger}_{b\sigma} \hat{\mathbf{c}}_{a\sigma} \right) + J \sum_{a} \left(\mathbf{S}_a \cdot \mathbf{S}_b - n_a n_b / 4 \right);$$

$$\hat{\mathbf{c}}_{a\sigma} \equiv \hat{\mathbf{a}}_{a\sigma} (1 - n_{a\bar{\sigma}}); \qquad n_a = n_{a\uparrow} + n_{a\downarrow}; \qquad J = \frac{2t^2}{U}; \tag{3.262}$$

$$\mathbf{S}_a \equiv \left(\hat{\mathbf{a}}^{\dagger}_{a\uparrow} \hat{\mathbf{a}}_{b\downarrow}, \hat{\mathbf{a}}^{\dagger}_{a\downarrow} \hat{\mathbf{a}}_{b\uparrow}, (n_{a\uparrow} - n_{a\downarrow})/2 \right)$$

Model byl nazván podle označení vazebních konstant těchto interakcí jako tzv. t-J model. Člen s vazební konstantou t je podobný prvnímu členu Hubbardova modelu. Druhý člen s vazební konstantou $J = 2t^2/U$ obsahuje skalární součin dvou sousedních spinů, obdobně jako Heisenbergův model. Operátory $\mathbf{c}$ a $\mathbf{c}^{\dagger}$ vystupující v modelu se nazývají projekce anihilačního a kreačního operátoru. Pomocí tohoto modelu se podařilo vysvětlit chování Mottových izolátorů včetně jejich feromagnetizmu. Mottovy izolátory jsou nevodivé materiály, které by podle standardní pásové teorie měly být vodiči. Nevodivost je způsobena párovými interakcemi elektron-elektron, které pásová teorie neuvažuje. Jev se vyskytuje za nízkých teplot například u NiO nebo CoO. Později se t-J model stal úspěšným i při vysvětlení vysokoteplotní supravodivosti keramických materiálů, například $La_{2-x}Sr_xCuO_4$, kterou objevili Karl Allex Müller a Johannes George Bednorz v roce 1986.

Více se o modelech magnetických systémů můžete dozvědět z publikace [47]. Statistická fyzika je mimořádně rozsáhlou fyzikální oblastí a její početné aplikace jsou za hranicemi možností této učebnice.

Dodatky



Dodatek A – Einsteinova sumační konvence a její použití

A1 Einsteinova sumační konvence

Vyskytnou-li se ve výrazu dva stejné indexy, potom přes ně automaticky sčítáme. Sčítací indexy budeme označovat malými písmeny abecedy (*i*, *j*, *k*, ...):

$$a_1 b_1 + a_2 b_2 + \cdots + a_N b_N = \sum_{k=1}^{N} a_k b_k = a_k b_k \,. \tag{A.1}$$

Na označení sčítacího indexu nezáleží, můžeme ho libovolně měnit:

$$a_k b_k = a_l b_l = a_n b_n = a_1 b_1 + a_2 b_2 + \cdots + a_N b_N \,. \tag{A.2}$$

V následujících ukázkách si pečlivě prohlédněte používání sumační konvence. Současně si přitom zopakujete některé jednoduché pojmy z matematiky. Záměrně v různých ukázkách používáme různé označení sčítacích indexů, jedině tak si na tuto užitečnou symboliku zvyknete.

Skalární součin dvou vektorů

$$\begin{aligned} &\mathbf{a} = (a_1, a_2, \ldots, a_N)\,; \quad \mathbf{b} = (b_1, b_2, \ldots, b_N)\,; \\ &\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \equiv a_1 b_1 + a_2 b_2 + \cdots + a_N b_N = a_j b_j \,. \end{aligned} \tag{A.3}$$

Divergence

$$\begin{aligned} &\mathbf{T} \;\equiv\; (T_1\,,\, T_2\,,T_3)\;; \\ &\operatorname{div} \mathbf{T} = \frac{\partial T_1}{\partial x_1} + \frac{\partial T_2}{\partial x_2} + \frac{\partial T_3}{\partial x_3} = \frac{\partial T_i}{\partial x_i} \,. \end{aligned} \tag{A.4}$$

Maticové násobení

$$\begin{aligned} &\mathbf{A} \;=\; \left\{ a_{i\,j} \right\}\;; \qquad \mathbf{B} \;=\; \left\{ b_{i\,j} \right\}; \\ &\left\{ \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} \right\}_{i\,j} \;=\; \sum_{k=1}^{N} a_{\,i\,k}\, b_{k\,j} \;=\; a_{\,i\,k}\, b_{k\,j} \,. \end{aligned} \tag{A.5}$$

Volné indexy jsou indexy, které se nacházejí na obou stranách rovnosti (zde *i*, *j*). Přes volný index se nesčítá. *Němý* (*vázaný*, *sčítací*) index je dvojice stejných indexů v jednom matematickém členu, přes který se sčítá (zde *k*).

Malý konečný přírůstek funkce jedné proměnné

Mějme funkci jedné reálné proměnné $f(q)$, která hodnotě q přiřadí hodnotu f:

► $$f(q): \quad q \to f\,; \qquad \text{potom } \Delta f \cong \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}q}\Delta q\,. \tag{A.6}$$

V matematice platnost této aproximace přesně definuje tzv. Lagrangeova věta o přírůstku. Ukažme si její použití na příkladu koule o poloměru r, jejíž objem je

$$V(r) = \frac{4}{3}\pi r^3\,. \tag{A.7}$$

Poloměr koule změníme o Δr. Její objem se pro malá Δr přibližně změní o hodnotu

$$\Delta V \cong \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\Delta r = 4\pi r^2 \Delta r\,. \tag{A.8}$$

Interpretace je zřejmá: $4\pi r^2$ je plocha koule o poloměru r a Δr je tloušťka této plochy. Součin představuje změnu objemu koule.

Malý konečný přírůstek funkce více proměnných

Mějme funkci více reálných proměnných $f(q_1, q_2, \ldots q_N)$, která hodnotám **q** přiřadí hodnotu f:

$$f(q_1,\ldots,q_N): \qquad q_1,\ldots,q_N \to f\,. \tag{A.9}$$

Lagrangeovu větu o přírůstku této funkce můžeme jednoduše zapsat (bez členů vyššího řádu)

► $$\Delta f \cong \frac{\partial f}{\partial q_1}\Delta q_1 + \frac{\partial f}{\partial q_2}\Delta q_2 + \cdots + \frac{\partial f}{\partial q_N}\Delta q_N = \frac{\partial f}{\partial q_k}\Delta q_k \tag{A.10}$$

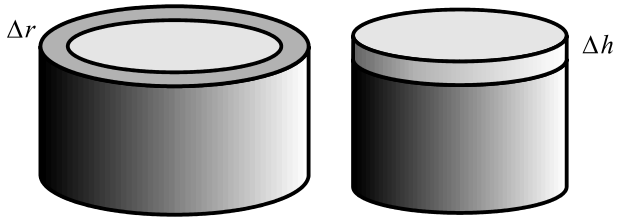
V zápisu jsme na závěr použili Einsteinovu sumační konvenci. Ukažme si, jak tato věta funguje na změně objemu válce. Samotný objem válce je funkcí dvou proměnných (poloměru podstavy a výšky):

$$V(r,h) = \pi r^2 h\,. \tag{A.11}$$

Pro přírůstek snadno spočítáme

$$\Delta V \cong \frac{\partial f}{\partial q_k}\Delta q_k = \frac{\partial V}{\partial r}\Delta r + \frac{\partial V}{\partial h}\Delta h = 2\pi r h \Delta r + \pi r^2 \Delta h\,. \tag{A.12}$$

První příspěvek je od změny poloměru podstavy, druhý od změny výšky válce.



Obr. A1: K větě o přírůstku

Infinitezimální (nekonečně malý) přírůstek funkce více proměnných

Zavedeme-li infinitezimální změny namísto malých přírůstků, dostaneme tzv. první diferenciál funkce

$$\mathrm{d}f = \frac{\partial f}{\partial q_1}\cdot \mathrm{d}q_1 + \cdots + \frac{\partial f}{\partial q_N}\cdot \mathrm{d}q_N = \frac{\partial f}{\partial q_j}\cdot \mathrm{d}q_j \,. \tag{A.13}$$

Poznámka: předchozí vztahy lze precizněji formulovat pomocí Lagrangeovy věty o přírůstku a věty o prvním diferenciálu. Pro naše účely však postačí si zapamatovat, že Lagrangeova věta se týká konečného přírůstku a jde o vztah přibližný, zatímco první diferenciál se týká nekonečně malého přírůstku a jde o vztah přesný.

Derivace složené funkce:

Jestliže vnitřní proměnné q_i závisí na čase, potom má úplná časová derivace tvar:

$$f = f(q_1, q_2, \cdots, q_N)\,;$$

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial f}{\partial q_1}\cdot\frac{\mathrm{d}q_1}{\mathrm{d}t} + \cdots + \frac{\partial f}{\partial q_N}\cdot\frac{\mathrm{d}q_N}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial f}{\partial q_k}\cdot\frac{\mathrm{d}q_k}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial f}{\partial q_k}\cdot\dot{q}_k \,. \tag{A.14}$$

Jak první diferenciál, tak derivaci složené funkce si ukážeme na transformačním vztahu mezi polárními a kartézskými souřadnicemi:

$$\begin{aligned} x(t) &= r(t)\cos\varphi(t)\,,\\ y(t) &= r(t)\sin\varphi(t)\,; \end{aligned} \tag{A.15}$$

$$\begin{aligned} \mathrm{d}x &= \frac{\partial x}{\partial r}\mathrm{d}r + \frac{\partial x}{\partial \varphi}\mathrm{d}\varphi = \cos\varphi\,\mathrm{d}r - r\sin\varphi\;\mathrm{d}\varphi\,,\\ \mathrm{d}y &= \frac{\partial y}{\partial r}\mathrm{d}r + \frac{\partial y}{\partial \varphi}\mathrm{d}\varphi = \sin\varphi\,\mathrm{d}r + r\;\cos\varphi\,\mathrm{d}\varphi\,; \end{aligned} \tag{A.16}$$

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \dot{r}\cos\varphi - r\dot{\varphi}\sin\varphi,\\ \dot{y} &= \dot{r}\sin\varphi + r\dot{\varphi}\cos\varphi\,. \end{aligned} \tag{A.17}$$

K symbolice v kartézských souřadnicích

Věnujme se nyní různým způsobům zápisu jednoho a téhož výrazu. Není důležité váhat nad volbou způsobu zápisu, ale vědět, co zápisy znamenají. Například vektor se v tištěných publikacích značí tučným řezem písma, ale na tabuli, kde to není možné, se používá šipka nad symbolem:

$$\mathbf{x} \equiv \vec{x}\,; \qquad \mathbf{a}\cdot\mathbf{b} \equiv \vec{a}\cdot\vec{b}\,. \tag{A.18}$$

Pro $f = f(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ zapisujeme gradienty (prostorový a rychlostní) také mnoha způsoby:

$$\nabla f \equiv \nabla_{\mathbf{x}} f \equiv \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} \equiv \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} \equiv \left(\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z}\right);$$
$$\nabla_{\mathbf{v}} f \equiv \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} \equiv \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} \equiv \left(\frac{\partial f}{\partial v_x}, \frac{\partial f}{\partial v_y}, \frac{\partial f}{\partial v_z}\right). \tag{A.19}$$

Prostorový gradient se často zapisuje jen v komponentách:

$$\frac{\partial f}{\partial x_k} \equiv \partial_k f \equiv f_{,k} \ . \tag{A.20}$$

Druhou mocninu velikosti vektoru, například rychlosti lze také zapsat mnoha způsoby:

$$v^2 = \mathbf{v}^2 = \mathbf{v}\cdot\mathbf{v} = v_j v_j = v_1^2 + v_2^2 + v_3^2 \ . \tag{A.21}$$

Nalezněme nyní rychlostní gradient tohoto výrazu ($f(\mathbf{v}) = \mathbf{v}^2$):

$$\frac{\partial f}{\partial v_i} = \frac{\partial}{\partial v_i} v_j v_j = \delta_{ji} v_j + v_j \delta_{ji} = v_i + v_i = 2 v_i \ . \tag{A.22}$$

Často se volí rychlejší, symbolický zápis (jako bychom derivovali podle symbolu **v**):

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = \frac{\partial \mathbf{v}^2}{\partial \mathbf{v}} = 2\mathbf{v} \ . \tag{A.23}$$

Poznámka 1: Operace gradient míří ve směru největšího nárůstu dané funkce a je kolmá na izoplochy (plochy konstantní hodnoty funkce). To je patrné z rozpisu.

$$f(\mathbf{x}) = \text{const} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial f}{\partial x_k} \mathrm{d}x_k = 0 \quad \Rightarrow \quad \nabla f \cdot \mathrm{d}\mathbf{x} = 0 \ . \tag{A.24}$$

Vektor $\mathrm{d}\mathbf{x}$ míří v izoploše a vektor ∇f je na něho kolmý.

Poznámka 2: Symbol ∇ se nazývá „nabla“. Název zavedl skotský matematický fyzik Peter Guthrie Tait (1831–1901) podle trojúhelníkového tvaru asyrské harfy ze 7. století př. n. l. Asýrie byla v severní Mezopotámii. Slovo nabla (Nbl) je z aramejštiny, která ho upravila z hebrejského Nev(b)el. Stejný nástroj už ale znali Sumerové v období 3 100 př. n. l. James Clerk Maxwell razil pro tento operátor název „slope“ z anglického slova znamenajícího spád či sklon. Návrh Taita ale zvítězil.

Poznámka 3: Skalární součin operátoru nabla s vektorovým polem se nazývá *divergence pole*; div $\mathbf{K} \equiv \nabla\cdot\mathbf{K} = \partial K_k/\partial x_k$. Jde o jednoduchý test, zda má pole v daném bodě zdroj. Pro div K > 0 pole v daném bodě vyvěrá, pro div $\mathbf{K} < 0$ pole v daném místě mizí a pro div $\mathbf{K} = 0$ pole daným bodem jen prochází.

Poznámka 4: Vektorový součin operátoru nabla s vektorovým polem se nazývá *rotace pole*; rot $\mathbf{K} \equiv \nabla\times\mathbf{K}$. Jde o jednoduchý test, zda je v daném místě střed víru. Musí jít o vektorový test – tedy tři testy, které souvisí s pohledem na vír ze směru souřadnicových os. Pokud je jediná složka rot **K** nenulová, je v daném místě střed víru a jeho osa rotace má směr vektoru rot **K**.

A2 Délkový element

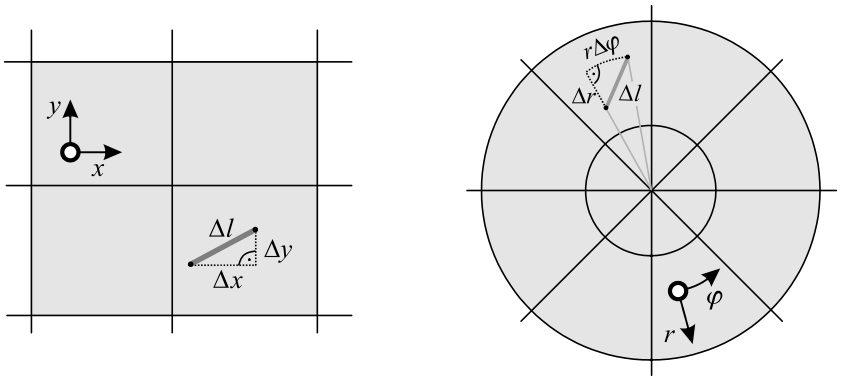
Délkovým elementem nazýváme kvadrát infinitezimální vzdálenosti dvou bodů. V kartézském souřadnicovém systému platí Pythagorova věta a je jedno, zda je vzdálenost konečná nebo infinitezimální, v obou případech platí přesný vztah:

$$\begin{aligned} \Delta l^2 &= \Delta x^2 + \Delta y^2 \ ; \\ \mathrm{d}l^2 &= \mathrm{d}x^2 + \mathrm{d}y^2 \ . \end{aligned} \tag{A.25}$$

V polární souřadnicové soustavě je situace jiná. Pro konečné přírůstky platí jen přibližný vztah, neboť jsme jednu odvěsnu pravoúhlého trojúhelníku nahradili obloukem (viz obr. A2):

$$\begin{aligned} \Delta l_{\mathrm{pol}}^2 &\doteq \Delta r^2 + r^2 \Delta\varphi^2 \ ; \\ \mathrm{d}l_{\mathrm{pol}}^2 &= \mathrm{d}r^2 + r^2 \mathrm{d}\varphi^2 \ ; \end{aligned} \tag{A.26}$$

Pro infinitezimálně malé vzdálenosti přejdou přibližné rovnosti opět v přesné rovnosti.



Obr. A2: Délkový element v kartézské a polární souřadnicové soustavě.

V ortogonálních systémech (souřadnicové sítě jsou vzájemně kolmé) lze délkový element vyjádřit obecně vztahem

► $$\mathrm{d}l^2 = g_{11}\mathrm{d}q_1^2 + g_{22}\mathrm{d}q_2^2 + g_{33}\mathrm{d}q_3^2 \ , \tag{A.27}$$

v neortogonálních obecně platí, že délkový element je kvadratickou funkcí přírůstků:

► $$\mathrm{d}l^2 = g_{ij}\mathrm{d}q_i\mathrm{d}q_j \ . \tag{A.28}$$

Poznamenejme, že platí sumační konvence. Koeficienty g_{ij} se nazývají *metrika* nebo *metrický tenzor*. Při jejich určování lze postupovat buď geometricky (viz horní obrázek) nebo z diferenciálů transformačních vztahů pro souřadnice. Pro polární souřadnice jde o vztahy (A.16). Analogicky postupujeme i pro další souřadnicové systémy:

Polární souřadnice:

$$\begin{aligned} x &= r\cos\varphi \\ y &= r\sin\varphi \end{aligned} \quad ; \qquad \mathrm{d}l^2 = \mathrm{d}r^2 + r^2\mathrm{d}\varphi^2 \,. \tag{A.29}$$

Sférické souřadnice:

$$\begin{aligned} x &= r\cos\varphi\sin\theta \\ y &= r\sin\varphi\sin\theta \\ z &= r\cos\theta \end{aligned} \quad ; \qquad \mathrm{d}l^2 = \mathrm{d}r^2 + r^2\mathrm{d}\theta^2 + r^2\sin^2\theta\,\mathrm{d}\varphi^2 \,. \tag{A.30}$$

Válcové souřadnice:

$$\begin{aligned} x &= r\cos\varphi \\ y &= r\sin\varphi \\ z &= z \end{aligned} \quad ; \qquad \mathrm{d}l^2 = \mathrm{d}r^2 + r^2\mathrm{d}\varphi^2 + \mathrm{d}z^2 \,. \tag{A.31}$$

Kinetickou energii systému pak můžeme snadno v zobecněných souřadnicích určit za pomoci délkového elementu ze vztahu:

$$T(\mathbf{q},\dot{\mathbf{q}}) = \frac{1}{2}\, m\frac{\mathrm{d}l^2}{\mathrm{d}t^2} = \frac{1}{2} m\, g_{ij}\,\frac{\mathrm{d}q_i\,\mathrm{d}q_j}{d\,t^2} = \frac{1}{2}\, m\, g_{ij}\;\dot{q}_i\,\dot{q}_j \,. \tag{A.32}$$

Speciálně pro předchozí souřadnice tedy platí:

► (A.33)

Kartézské $\quad T(\dot{x},\dot{y},\dot{z}) = \frac{1}{2} m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2)$

Polární $\quad T(r,\dot{r},\dot{\varphi}) = \frac{1}{2} m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2)$

Sférické $\quad T(r,\theta,\dot{r},\dot{\varphi},\dot{\theta}) = \frac{1}{2} m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 + r^2\sin^2\theta\,\dot{\varphi}^2)$

Válcové $\quad T(r,\dot{r},\dot{\varphi},\dot{z}) = \frac{1}{2} m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2 + \dot{z}^2)$

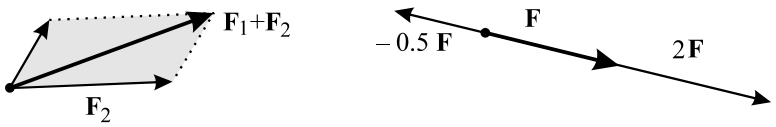
V jednotlivých souřadnicích se kinetická energie rozpadá na součet členů odpovídajících jednotlivým stupňům volnosti. Například v polárních souřadnicích se kinetická energie skládá z radiální části T_r a rotační části T_φ.

Poznámka: velikost kinetické energie nemůže záviset na volbě souřadnicového systému, kinetická energie je skalární funkcí zobecněných souřadnic. Další skalární funkcí je například potenciální energie.

Dodatek B – Lieova algebra

B1 Lineární vektorový prostor

S pojmem vektoru jste se pravděpodobně setkali poprvé ve fyzice (například rychlost, síla). Zde jste vystačili s představou úseček opatřených na jednom konci šipkou, se kterými lze provádět dvě operace: skládání vektorů (*sčítání*) a natahování vektorů (*násobení skalárem*). Tato představa byla v matematice zobecněna i na další objekty.



Obr. B1: Operace s vektory.

Stačí pro ně definovat sčítání a násobení skalárem tak, aby tyto operace zachovávaly základní vlastnosti skládání a natahování vektorů. Množina takových objektů se nazývá *lineární vektorový prostor*. Připomeňme si nyní jeho definici ze základního kurzu matematiky:

Označme A lineární vektorový prostor, nechť $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z} \in A$; $R(C)$ množinu reálných (komplexních) čísel, nechť $\alpha, \beta, \gamma \in R(C)$.

Lineární vektorový prostor

Řekneme, že A je lineární vektorový prostor nad množinou reálných (komplexních) čísel, jsou-li pro prvky tohoto prostoru definovány operace

označení	odkud kam	název	zápis
$+$	$A\times A \to A$	sčítání (skládání) vektorů	$\mathbf{z} = \mathbf{x} + \mathbf{y}$
$\cdot$	$A\times R(C) \to A$	násobení vektoru skalárem	$\mathbf{z} = \alpha\,\mathbf{x}$

které mají následující vlastnosti:

1) $\mathbf{x} + \mathbf{y} = \mathbf{y} + \mathbf{x}$, $\quad \mathbf{x} + (\mathbf{y} + \mathbf{z}) = (\mathbf{x} + \mathbf{y}) + \mathbf{z}$,
2) $\alpha\,(\mathbf{x} + \mathbf{y}) = \alpha\,\mathbf{x} + \alpha\,\mathbf{y}$, $\quad (\alpha + \beta)\,\mathbf{x} = \alpha\,\mathbf{x} + \beta\,\mathbf{x}$,
3) $\alpha\,(\beta\,\mathbf{x}) = (\alpha\,\beta)\,\mathbf{x}$, $\quad 1\mathbf{x} = \mathbf{x}$,
4) $\mathbf{x} + \mathbf{y} = \mathbf{x} + \mathbf{z} \;\Rightarrow\; \mathbf{y} = \mathbf{z}$.

První operace říká, že platí komutativnost (záměnnost) a asociativnost (sdružování), druhá operace definuje linearitu. Na první pohled je jasné, že tyto vlastnosti mají fyzikální vektory (například síla), které umíme natahovat a skládat a umíme si je představit jako orientované úsečky nebo špičaté tyče. Na druhou stranu mohou mít podobné vlastnosti i zcela jiné objekty (matice, řešení rovnic), pokud pro ně tyto operace vhodně zavedeme. Důležité jsou vlastnosti objektů, nikoli objekty samotné.

Poznámka 1: Operace "+" přiřazuje dvěma prvkům prostoru A opět prvek prostoru A. Pro N-tici čísel může být operace "+" definována takto:

$$\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_N), \quad \mathbf{y} = (y_1, \dots, y_N); \quad \mathbf{x} + \mathbf{y} \equiv (x_1 + y_1, \dots, x_N + y_N) .$$

Poznámka 2: Operace "·" přiřazuje prvku prostoru A a reálnému (komplexnímu) číslu opět prvek prostoru A. Pro N-tici čísel může být operace "·" definována takto:

$$\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_N), \quad \alpha \cdot \mathbf{x} \equiv (\alpha x_1, \dots, \alpha x_N) .$$

Poznámka 3: V lineárním vektorovém prostoru lze zvolit skupinu lineárně nezávislých vektorů (bázi) tak, že každý prvek prostoru lze napsat jako lineární kombinaci prvků báze:

$$\blacktriangleright \qquad \mathbf{x} = \sum_{l=1}^{N} x_l \mathbf{e}_l \quad ; \qquad \{\mathbf{e}_l\}_{l=1}^{N} \quad \cdots \quad \text{prvky báze} . \tag{B.1}$$

Veličiny x_l jsou koeficienty lineární kombinace, nazýváme je *souřadnice* prvku $\mathbf{x}$ v bázi $\{\mathbf{e}_l\}$. Počet prvků báze nazýváme *dimenze prostoru*. Báze musí být úplná, tj. žádný její prvek nesmí chybět, jde o maximální množinu lineárně nezávislých vektorů.

B2 Lieova algebra

Lineární vektorový prostor s operacemi "+" a "·" nazveme Lieovou algebrou, je-li v něm navíc definována ještě jedna operace

označení	**odkud kam**	**název**	**zápis**
[,]	$A \times A \to A$	Lieova operace	$\mathbf{z} = [\mathbf{x}, \mathbf{y}]$

s vlastnostmi:

1)	$[\mathbf{x}, \mathbf{y}] = -[\mathbf{y}, \mathbf{x}]$	antisymetrie	(B.2)
2)	$[\mathbf{x} + \mathbf{y}, \mathbf{z}] = [\mathbf{x}, \mathbf{z}] + [\mathbf{y}, \mathbf{z}]$	linearita	(B.3)
3)	$[\alpha \mathbf{x}, \mathbf{y}] = \alpha [\mathbf{x}, \mathbf{y}]$	linearita	(B.4)
4)	$[\mathbf{x}, [\mathbf{y}, \mathbf{z}]] + [\mathbf{y}, [\mathbf{z}, \mathbf{x}]] + [\mathbf{z}, [\mathbf{x}, \mathbf{y}]] = 0$	Bianciho identita	(B.5)

Jde o další zobrazení, při kterém dvojici vektorů přiřadíme vektor. Z antisymetrie a linearity v prvním argumentu plyne linearita ve druhém argumentu.

◖ Příklad B1: množina uspořádaných trojic

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3), \quad \mathbf{y} = (y_1, y_2, y_3); \qquad x_i, y_i \in C(R) \qquad \alpha \in C(R)$$

$$\begin{aligned} + \quad &: \quad \mathbf{x} + \mathbf{y} \equiv (x_1 + y_1, x_2 + y_2, x_3 + y_3) , \\ \cdot \quad &: \quad \alpha \cdot \mathbf{x} \equiv (\alpha x_1, \alpha x_2, \alpha x_3) , \\ [\,,\,] \quad &: \quad [\mathbf{x}, \mathbf{y}] \equiv \mathbf{x} \times \mathbf{y} . \end{aligned}$$

Za Lieovu algebru na uspořádaných trojicích můžeme považovat vektorový součin. Ověřte, že vektorový součin splňuje všechny vlastnosti Lieovy algebry (B.2) až (B.5).

◗

◖ Příklad B2: množina čtvercových matic

Pro konkrétnost budeme uvažovat matice 2×2 a operace skládání, natahování a Lieovu operaci budeme pro matice **A**, **B** definovat podle předpisů

$$+ \quad : \quad \mathbf{A}+\mathbf{B} \equiv \begin{pmatrix} a_{11}+b_{11} & a_{12}+b_{12} \\ a_{21}+b_{21} & a_{22}+b_{22} \end{pmatrix} ,$$

$$\cdot \quad : \quad \alpha \cdot \mathbf{A} \equiv \begin{pmatrix} \alpha a_{11} & \alpha a_{12} \\ \alpha a_{21} & \alpha a_{22} \end{pmatrix} ,$$

$$[\,,\,] \quad : \quad [\mathbf{A},\mathbf{B}] \equiv \mathbf{AB} - \mathbf{BA} .$$

Lieova algebra je definována za pomoci maticového násobení jako tzv. komutátor. Je-li **AB** = **BA**, matice komutují a komutátor je roven nule. Ověřte, že komutátor splňuje všechny vlastnosti Lieovy algebry (B.2) až (B.5).

◗

B3 Strukturní koeficienty Lieovy algebry

Rozvineme-li prvky prostoru do příslušné báze, můžeme psát:

$$[\,\mathbf{x},\mathbf{y}\,] = [\,x_k\,\mathbf{e}_k\,,\,y_l\,\mathbf{e}_l\,] = x_k y_l\,[\,\mathbf{e}_k,\mathbf{e}_l\,]. \tag{B.6}$$

K určení Lieovy operace postačí znát výsledek operace jen pro prvky báze. Je zřejmé, že výsledek operace $[\mathbf{e}_k, \mathbf{e}_l\,]$ je prvek prostoru a můžeme ho proto opět rozvinout do báze $\{\mathbf{e}_m\}$. Koeficienty rozvoje (souřadnice) c^m budou ale záviset na tom, pro které dva prvky báze Lieovu operaci provádíme:

$$[\mathbf{e}_k,\mathbf{e}_l\,] = c_{kl}^m\,\mathbf{e}_m . \tag{B.7}$$

Veličiny c_{kl}^m se nazývají strukturní koeficienty Lieovy algebry. Výsledek Lieovy operace lze nyní zapsat ve tvaru

$$[\,\mathbf{x},\mathbf{y}\,] = c_{kl}^m\,x_k y_l\,\mathbf{e}_m . \tag{B.8}$$

Zadáním strukturních koeficientů je určena celá Lieova algebra. Z antisymetrie Lieovy operace (B.2) plyne antisymetrie strukturních koeficientů

$$c_{kl}^m = -c_{lk}^m . \tag{B.9}$$

◖ Příklad B1: množina uspořádaných trojic (pokračování)

Na uspořádaných trojicích lze zvolit bázi

$$\mathbf{e}_1 = (1,0,0)\,; \qquad \mathbf{e}_2 = (0,1,0)\,; \qquad \mathbf{e}_3 = (0,0,1)\,.$$

Nyní určíme strukturní koeficienty z vektorového součinu (Lieovy operace), který musíme provést pro všechny kombinace prvků báze:

$$[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2] = \mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2 = \mathbf{e}_3 ,$$
$$[\mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3] = \mathbf{e}_2 \times \mathbf{e}_3 = \mathbf{e}_1 ,$$
$$[\mathbf{e}_3, \mathbf{e}_1] = \mathbf{e}_3 \times \mathbf{e}_1 = \mathbf{e}_2 .$$

Ostatní kombinace jsou nulové. Nenulové strukturní koeficienty tedy jsou

$$c_{12}^3 = c_{23}^1 = c_{31}^2 = 1 \quad ; \quad c_{21}^3 = c_{32}^1 = c_{13}^2 = -1 \quad .$$

◗

◖ **Příklad B2: množina čtvercových matic (pokračování)**

Na komplexních maticích 2×2 lze zvolit bázi

$$\boldsymbol{\sigma}_0 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad \boldsymbol{\sigma}_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \boldsymbol{\sigma}_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \boldsymbol{\sigma}_3 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Matice $\boldsymbol{\sigma}_0$ je jednotková matice (až na normovací konstantu 1/2); $\boldsymbol{\sigma}_k$ $k = 1,2,3$ jsou tzv. Pauliho matice, v kvantové teorii uvidíme, že mají význam operátoru spinu. Snadno vypočteme (ověřte!)

$$[\boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2] = \boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2 - \boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_1 = \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_3 ,$$
$$[\boldsymbol{\sigma}_2, \boldsymbol{\sigma}_3] = \boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_3 - \boldsymbol{\sigma}_3\boldsymbol{\sigma}_2 = \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1 ,$$
$$[\boldsymbol{\sigma}_3, \boldsymbol{\sigma}_1] = \boldsymbol{\sigma}_3\boldsymbol{\sigma}_1 - \boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_3 = \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_2 ,$$
$$[\boldsymbol{\sigma}_0, \boldsymbol{\sigma}_1] = [\boldsymbol{\sigma}_0, \boldsymbol{\sigma}_2] = [\boldsymbol{\sigma}_0, \boldsymbol{\sigma}_3] = 0 .$$

Jednotková matice komutuje s každou maticí. Nenulové strukturní koeficienty jsou

$$c_{12}^3 = c_{23}^1 = c_{31}^2 = \mathrm{i} ; \qquad c_{21}^3 = c_{32}^1 = c_{13}^2 = -\mathrm{i} .$$

Pro matice (i jiné objekty, u kterých je definováno násobení mezi objekty) platí ještě další důležité relace:

$$[\mathbf{AB}, \mathbf{C}] = \mathbf{A}[\mathbf{B}, \mathbf{C}] + [\mathbf{A}, \mathbf{C}]\mathbf{B} , \tag{B.10}$$

$$[\mathbf{A}, \mathbf{BC}] = \mathbf{B}[\mathbf{A}, \mathbf{C}] + [\mathbf{A}, \mathbf{B}]\mathbf{C} . \tag{B.11}$$

Důkaz:

$$\mathbf{A}[\mathbf{B}, \mathbf{C}] + [\mathbf{A}, \mathbf{C}]\mathbf{B} = \mathbf{A}(\mathbf{BC} - \mathbf{CB}) + (\mathbf{AC} - \mathbf{CA})\mathbf{B} =$$
$$= \mathbf{ABC} - \mathbf{ACB} + \mathbf{ACB} - \mathbf{CAB} = \mathbf{ABC} - \mathbf{CAB} = [\mathbf{AB}, \mathbf{C}] .$$

Analogicky dokážeme i druhou relaci. Pomocí těchto vztahů můžeme určit Lieovu operaci i pro mocniny matic, například:

$$[\mathbf{A}^2, \mathbf{B}] = [\mathbf{AA}, \mathbf{B}] = \mathbf{A}[\mathbf{A}, \mathbf{B}] + [\mathbf{A}, \mathbf{B}]\mathbf{A} .$$

Podobně lze ze znalosti základní operace $[\mathbf{A}, \mathbf{B}]$ a vztahů (B.10), (B.11) určit postupně výsledek operace $[\mathbf{A}^k, \mathbf{B}^l]$.

Dodatek C – Tenzory

C1 Kovariantní a kontravariantní indexy

Předpokládejme, že máme lineární vektorový prostor opatřený bází $\{\mathbf{e}_k\}$. Vektor **A** můžeme v této bázi rozvinout do výrazu

► $$\mathbf{A} = \sum_{k=1}^{N} A^k \mathbf{e}_k = A^k \mathbf{e}_k \,. \tag{C.1}$$

Čísla A^k nazýváme složky (souřadnice, koeficienty rozvoje) vektoru, objekty $\mathbf{e}_k$ prvky báze. Různá poloha indexů naznačuje, že se složky vektorů transformují jinak než prvky báze. Nadále budeme využívat *sumační konvenci*, ale sčítání bude vždy probíhat přes jeden index dolní (transformuje se jako prvky báze) a jeden index horní (transformuje se jako složky vektorů). Přes dvojici stejného horního a dolního indexu se automaticky sčítá, jde o tzv. němé indexy. Poloha volných indexů (přes které se nesčítá) musí zůstat na obou stranách rovnosti vždy stejná. Přejděme od jedné báze k nějaké jiné, vlnkované bázi:

$$\{\mathbf{e}_k\} \quad \rightarrow \quad \{\tilde{\mathbf{e}}_k\} \,. \tag{C.2}$$

Vektor **A** je objekt, jehož vyjádření nemůže záviset na volbě báze, tj. musí platit

$$\mathbf{A} = \tilde{A}^k \tilde{\mathbf{e}}_k = A^k \mathbf{e}_k \,. \tag{C.3}$$

Složky vektorů se mezi dvěma bázemi budou transformovat za pomoci nějaké matice **S**:

$$\tilde{A}^k = S^k{}_l A^l \,. \tag{C.4}$$

Všimněte si, že se sčítá přes němý index l (jeden je nahoře a druhý dole). Volný index k je na obou stranách rovnosti nahoře. I u matic tak musíme rozlišovat horní a dolní indexy. Transformační matici prvků báze označme **U**:

$$\tilde{\mathbf{e}}_k = U^l{}_k \mathbf{e}_l \,. \tag{C.5}$$

Vyzkoušejte si, že jde o jedinou možnost, při které se sčítá přes jeden horní a jeden dolní index, volný index k má stejnou polohu na obou stranách rovnosti a transformační matice U má stejně jako matice S první index nahoře a druhý dole. Zjistěme nyní, jaký je vztah mezi oběma transformačními maticemi **S** a **U**. Vyjděme z vyjádření vektoru **A** v nové bázi (C.5):

$$\mathbf{A} = \tilde{A}^k \tilde{\mathbf{e}}_k = S^k{}_l A^l \; U^n{}_k \mathbf{e}_n = U^n{}_k S^k{}_l A^l \mathbf{e}_n \,.$$

Je zřejmé, že v nové bázi musí být výsledek $A^l\mathbf{e}_l$ nebo $A^n\mathbf{e}_n$, chcete-li. Toho lze ale dosáhnout jediným způsobem: v posledním výrazu musí platit

$$U^n{}_k S^k{}_l = \delta^n{}_l \,, \tag{C.6}$$

kde jsme označili $\delta^n{}_l$ Kroneckerovo delta. V maticovém zápise tato podmínka říká, že

$$\mathbf{U}\cdot\mathbf{S}=\mathbf{1}. \tag{C.7}$$

Je zřejmé, že matice **U** a **S** jsou navzájem inverzní. To je patrné již přímo z rozkladu vektoru **A** (C.3) do obou bází. Má-li být výsledek stejný, musí se složky vektorů (horní indexy) transformovat „opačně“ než prvky báze (dolní indexy). Jedině tak dají kombinace (C.3) výsledek nezávislý na volbě báze (vektor **A**). Horní indexy budeme nazývat *kontravariantní*. Tyto indexy se transformují stejně jako složky vektoru, tj. pomocí transformační matice **S**. Dolní indexy budeme nazývat *kovariantní*. Tyto indexy se transformují stejně jako prvky báze, tj. pomocí transformační matice **U**. Indexů může být i více, například ze složek dvou vektorů můžeme sestavit výraz

$$T^{kl}\equiv A^k B^l\ ;\qquad \tilde{T}^{kl}\equiv S^k{}_o S^l{}_p T^{op}\ , \tag{C.8}$$

který se musí transformovat jako součin složek vektorů. Za pomoci T^{kl} ,můžeme vytvořit opět objekt nezávislý na souřadnicové soustavě, tzv. tenzor druhého řádu:

$$\ddot{\mathbf{T}}\equiv T^{kl}\mathbf{e}_k\otimes\mathbf{e}_l\ . \tag{C.9}$$

Symbol $\mathbf{e}_k\otimes\mathbf{e}_l$ nazýváme tenzorový (diadický) součin, jde o uspořádanou dvojici prvků báze. Výraz $\mathbf{A}\otimes\mathbf{B}$ tak chápeme jako objekt se složkami, které tvoří matici A^kB^l:

► $$\mathbf{A}\otimes\mathbf{B}=A^kB^l\mathbf{e}_k\otimes\mathbf{e}_l\ . \tag{C.10}$$

C2 Skalární součin, zvyšování a snižování indexů

Předpokládejme, že je na našem lineárním vektorovém prostoru definován skalární součin dvou vektorů $\mathbf{A}\cdot\mathbf{B}$, který splňuje základní vlastnosti skalárního součinu. Rozvineme-li oba vektory do báze, získáme

$$\mathbf{A}\cdot\mathbf{B}=A^kB^l\ \mathbf{e}_k\cdot\mathbf{e}_l=g_{kl}A^kB^l, \tag{C.11}$$

kde jsme označili

$$g_{kl}\equiv\mathbf{e}_k\cdot\mathbf{e}_l \tag{C.12}$$

tzv. metrické koeficienty (metriku). Vidíme, že výsledek skalárního součinu dvou libovolných vektorů můžeme určit, pokud známe metrické koeficienty, tj. výsledek skalárních součinů všech prvků báze mezi sebou.

Označme inverzní matici k metrice

$$g^{kl}\equiv\left(g_{kl}\right)^{-1}\ ;\qquad g^{kl}g_{lm}=\delta^k{}_m\ . \tag{C.13}$$

Zaveďme nyní pomocné (duální) objekty

$$\mathbf{e}^k\equiv g^{kl}\mathbf{e}_l\ ;\qquad A_k\equiv g_{kl}A^l\ . \tag{C.14}$$

Nejde o skutečné prvky báze ani o skutečné komponenty vektoru, ale o formální lineární kombinace dané metrikou. Vždy platí, že index nahoře znamená transformaci pomocí stejné matice, jakou se transformují složky vektorů, a index dole znamená transformaci pomocí stejné matice, jakou se transformují prvky báze. Za pomoci metriky tak

můžeme indexy libovolně snižovat nebo zvyšovat, stačí jen dodržet pravidlo, že sčítáme přes jeden horní a jeden dolní index (to zajistí invarianci součtu vzhledem k transformaci báze). Volné indexy zachovávají vždy svou polohu. Uveďme příklad:

$$g_{lo}T^{klm} = T^{k}{}_{o}{}^{m}.$$

Prostřední index jsme snížili za pomoci metriky. Skalární součin nyní můžeme zapsat několika způsoby:

$$\mathbf{A}\cdot\mathbf{B} = g_{kl}A^{k}B^{l} = A^{k}B_{k},$$

kde jsme druhý index snížili za pomocí metriky. Mohli jsme ale také snížit první index:

$$\mathbf{A}\cdot\mathbf{B} = g_{kl}A^{k}B^{l} = A_{l}B^{l} = A_{k}B^{k}.$$

Platí tedy

► $$\mathbf{A}\cdot\mathbf{B} = g_{kl}A^{k}B^{l} = A^{k}B_{k} = A_{k}B^{k}. \qquad \text{(C.15)}$$

Kontravariantní (horní) složka je skutečnou složkou vektoru, kovariantní (dolní) v sobě obsahuje metriku. Definici inverzní metriky (C.13) můžeme chápat také jako snižování či zvyšování indexů:

$$\left.\begin{aligned} g^{kl}g_{lm} &= \delta^{k}{}_{m}\,; \\ g^{kl}g_{lm} &= g^{k}{}_{m}\,; \end{aligned}\right\} \quad\Rightarrow\quad g^{k}{}_{m} = \delta^{k}{}_{m}\,. \qquad \text{(C.16)}$$

Metrika a Kroneckerovo delta jsou tak jediným objektem. Pokud jsou oba indexy dole, jde o metrické koeficienty. Pokud jsou oba indexy nahoře, jde o inverzní matici k metrickým koeficientům a pokud jsou indexy smíšené, jde o Kroneckerovo delta, tedy prvky jednotkové matice. Metrika tak není nic jiného než jednotková matice s patřičně posunutými indexy. Za pomoci tenzorového zápisu můžeme psát

$$\mathbf{1} = \delta^{k}{}_{l}\mathbf{e}_{k}\otimes\mathbf{e}^{l} = g_{kl}\mathbf{e}^{k}\otimes\mathbf{e}^{l} = g^{kl}\mathbf{e}_{k}\otimes\mathbf{e}_{l}\,. \qquad \text{(C.17)}$$

C3 Čtyřvektory, Minkowského metrika

Ve speciální relativitě nazýváme každou čtveřici veličin, jež se transformuje Lorentzovou transformací, čtyřvektor. K základním čtveřicím patří *událost* (časová a prostorová souřadnice události), *čtyřhybnost* (energie a hybnost), *vlnový čtyřvektor* (úhlová frekvence a vlnový vektor), *čtyřpotenciál elektromagnetického pole* (skalární a vektorový potenciál), *čtyřtok* (zdrojové členy Maxwellových rovnic – hustota a tok náboje) nebo čtyřgradient. V soustavě SI musíme zajistit, aby všechny 4 složky měly stejný rozměr. To můžeme učinit nejjednodušeji vynásobením nebo vydělením časové složky univerzální konstantou c (rychlostí světla ve vakuu):

► $$\begin{aligned} x^{\mu} &\equiv \begin{pmatrix} ct \\ \mathbf{x} \end{pmatrix}; \qquad p^{\mu} \equiv \begin{pmatrix} E/c \\ \mathbf{p} \end{pmatrix}; \qquad k^{\mu} \equiv \begin{pmatrix} \omega/c \\ \mathbf{k} \end{pmatrix}; \\ A^{\mu} &\equiv \begin{pmatrix} \phi/c \\ \mathbf{A} \end{pmatrix}; \qquad j^{\mu} \equiv \begin{pmatrix} \rho c \\ \mathbf{j} \end{pmatrix}; \qquad \partial_{\mu} \equiv \begin{pmatrix} \partial/\partial ct \\ \partial/\partial\mathbf{x} \end{pmatrix}. \end{aligned} \qquad \text{(C.18)}$$

Poznámka 1: Řeckými indexy budeme značit zásadně jen čtyřvektory (index 0 odpovídá časové části, indexy 1, 2, 3 prostorové části).

Poznámka 2: U čtyřgradientu jde o kovariantní (dolní) index, protože

$$\partial_\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x^\mu},$$

tedy skutečné složky vektorů jsou ve jmenovateli, pokud zapisujeme index v čitateli, musí mít opačnou polohu, neboť se transformační matice změní na inverzní!

Poznámka 3: Metrika ve speciální relativitě se nazývá Minkowského metrika. Je diagonální a v časové části má minus. Totéž platí i pro inverzní matici (metriku s horními indexy). Metrika se smíšenými indexy je jednotková matice, tj. její prvky jsou Kroneckerovo delta:

$$\blacktriangleright \quad g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & +1 \end{pmatrix}; \qquad g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & +1 \end{pmatrix};$$

$$g^{\mu}{}_{\nu} = \begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & +1 \end{pmatrix}; \qquad g_{\mu}{}^{\nu} = \begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & +1 \end{pmatrix}. \qquad \text{(C.19)}$$

Zjednodušeně se často Minkowského metrika píše jako $g_{\mu\nu} = \mathrm{diag}(-1, 1, 1, 1)$, někdy se označuje symbolem $\eta^{\mu\nu}$. Za pomoci metriky nyní snadno určíme kovariantní složky běžných čtyřvektorů a kontravariantní složku čtyřgradientu:

$$\blacktriangleright \quad x_\mu \equiv \begin{pmatrix} -ct \\ \mathbf{x} \end{pmatrix}; \qquad p_\mu \equiv \begin{pmatrix} -E/c \\ \mathbf{p} \end{pmatrix}; \qquad k_\mu \equiv \begin{pmatrix} -\omega/c \\ \mathbf{k} \end{pmatrix};$$

$$A_\mu \equiv \begin{pmatrix} -\phi/c \\ \mathbf{A} \end{pmatrix}; \qquad j_\mu \equiv \begin{pmatrix} -\rho c \\ \mathbf{j} \end{pmatrix}; \qquad \partial^\mu \equiv \begin{pmatrix} -\partial/\partial ct \\ \partial/\partial \mathbf{x} \end{pmatrix}. \qquad \text{(C.20)}$$

Jako ukázku práce s indexy nalezněme některé typické skalární součiny, začněme s vlnovým vektorem a událostí:

$$k \cdot x = k^\mu x_\mu = k^0(-x_0) + k^1 x_1 + k^2 x_2 + k^3 x_3 = -\omega t + \mathbf{k} \cdot \mathbf{x},$$

nalevo je součin čtyřvektorů, poslední člen napravo je běžný součin v R^3. Obdobně určíme výsledky dalších ukázek

$$\mathrm{d}s^2 \equiv \mathrm{d}x_\mu \mathrm{d}x^\mu = -c^2\mathrm{d}t^2 + \mathrm{d}x^2 + \mathrm{d}y^2 + \mathrm{d}z^2;$$

$$j \cdot A \equiv j_\mu A^\mu = -\rho\phi + \mathbf{j} \cdot \mathbf{A};$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathrm{div}\,\mathbf{j} = 0 \qquad \Leftrightarrow \qquad \partial_\mu j^\mu = 0;$$

$$\Box f = 0 \qquad \Leftrightarrow \qquad \partial_\mu \partial^\mu f = 0 \,.$$

Často se používá zkrácený zápis, při kterém se derivace píše za čárku. Indexy před čárkou jsou skutečnými indexy, indexy za čárkou jsou derivacemi:

$$\frac{\partial A^\mu}{\partial x^\nu} \equiv \partial_\nu A^\mu \equiv A^\mu{}_{,\nu} \,.$$

Jde vlastně o nejúspornější zápis derivace vůbec, ze kterého je zřejmé na první pohled, jak se derivace transformuje. Uveďme další příklady:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x_\mu} \equiv \partial^\mu \varphi \equiv \varphi_{,}{}^{\mu} \;;$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x^\mu} \equiv \partial_\mu \varphi \equiv \varphi_{,\mu} \;;$$

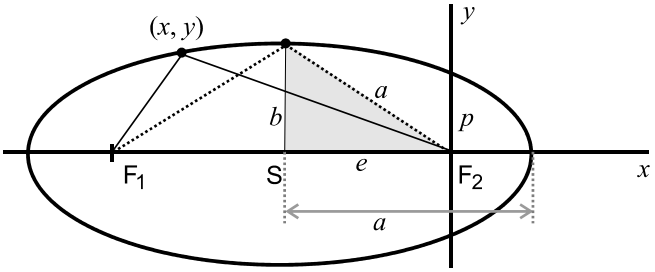
$$\frac{\partial^2 T^\alpha{}_\beta}{\partial x^\mu \partial x_\nu} \equiv \partial_\mu \partial^\nu T^\alpha{}_\beta \equiv T^\alpha{}_{\beta,\mu}{}^{\nu} \;;$$

$$\Box f \equiv \partial_\mu \partial^\mu f \equiv f_{,\mu}{}^{\mu} \,.$$

Dodatek D – kuželosečky

D1 Elipsa

Elipsa je množina bodů v rovině, které mají stejný součet vzdáleností od dvou pevně zvolených bodů, tzv. ohnisek.



Obr. D1: Elipsa.

V kartézské souřadnicové soustavě má rovnice elipsy tvar (osa *y* vede jedním z ohnisek)

$$\left(\frac{x+e}{a}\right)^2+\left(\frac{y}{b}\right)^2=1\,. \tag{D.1}$$

Veličina *e* se nazývá excentricita, *a* je velká poloosa, *b* je malá poloosa. Mezi těmito parametry existuje jednoduchý vztah (viz obrázek)

$$a^2=e^2+b^2\,. \tag{D.2}$$

Přepišme tuto rovnici do polárních souřadnic

$$\begin{aligned} x&=r\cos\varphi\,;\\ y&=r\sin\varphi\,. \end{aligned} \tag{D.3}$$

Po dosazení (D.3) do (D.1) získáme kvadratickou rovnici pro *r*, která má řešení

$$r=\frac{-b^2e\cos\varphi\pm b^2\sqrt{e^2\cos^2\varphi+b^2\cos^2\varphi+a^2\sin^2\varphi}}{b^2\cos^2\varphi+a^2\sin^2\varphi}\,.$$

Řešení s minus je nepřijatelné, neboť by vedlo na zápornou hodnotu radiální vzdálenosti. Ze vztahu vyloučíme malou poloosu *b* za pomoci vztahu (D.2):

$$r=\frac{-(a^2-e^2)e\cos\varphi+(a^2-e^2)a}{a^2-e^2\cos^2\varphi}=\frac{(a^2-e^2)(a-e\cos\varphi)}{(a-e\cos\varphi)(a+e\cos\varphi)}=$$

$$=\frac{a^2-e^2}{a+e\cos\varphi}=\frac{a[1-(e/a)^2]}{1+(e/a)\cos\varphi}\,.$$

Výsledná rovnice elipsy tedy je

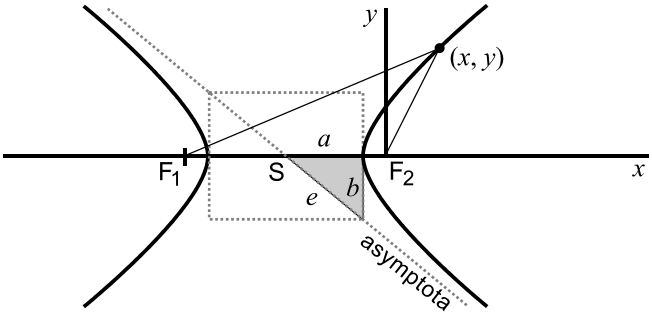
$$r = \frac{p}{1+\varepsilon\cos\varphi}; \qquad \varepsilon \equiv e/a = \sqrt{1-(b/a)^2}\,; \qquad p \equiv a\left(1-\varepsilon^2\right). \tag{D.4}$$

Pro elipsu je $\varepsilon < 1$, $p > 0$. Veličina ε se nazývá numerická excentricita a jde o bezrozměrný parametr charakterizující protáhlost elipsy. Obsah elipsy získáme přeškálováním souřadnicových os tak, aby poloosy byly stejně veliké a elipsa se stala kružnicí:

$$S = \pi ab\,. \tag{D.5}$$

D2 Hyperbola

Hyperbola je množina bodů v rovině, které mají stejný rozdíl vzdáleností od dvou pevně zvolených bodů, tzv. ohnisek.



Obr. D2: Hyperbola.

V kartézské souřadnicové soustavě má rovnice hyperboly tvar (osa y vede jedním z ohnisek hyperboly)

$$\left(\frac{x+e}{a}\right)^2 - \left(\frac{y}{b}\right)^2 = 1\,. \tag{D.6}$$

Veličina e se nazývá excentricita, a je velká poloosa, b je malá poloosa. Mezi těmito parametry existuje jednoduchý vztah (viz obrázek)

$$a^2 + b^2 = e^2\,. \tag{D.7}$$

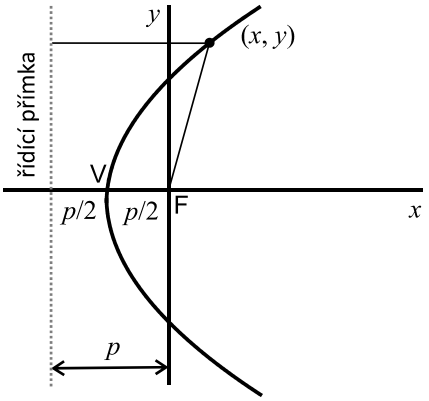
Postupem zcela analogickým jako u elipsy odvodíme rovnici hyperboly v polárních souřadnicích. Výsledná rovnice hyperboly je

$$r = \frac{p}{1+\varepsilon\cos\varphi}; \qquad \varepsilon \equiv e/a = \sqrt{1+(b/a)^2}\,; \qquad p \equiv a\left(1-\varepsilon^2\right). \tag{D.8}$$

Pro hyperbolu je $\varepsilon > 1$, $p < 0$. Veličina ε se nazývá numerická excentricita a jde o bezrozměrný parametr charakterizující tvar hyperboly. Pokud budeme požadovat, aby platilo $p > 0$, tj. zavedeme $p = |a(1–\varepsilon^2)|$, bude ve jmenovateli namísto +1 hodnota –1.

D3 Parabola

Parabola je množina všech bodů v rovině, které mají stejnou vzdálenost od ohniska a od řídící přímky.



Obr. D3: Parabola.

V kartézské souřadnicové soustavě má rovnice paraboly tvar (osa y vede ohniskem)

► $$y^2 = 2p\left(x + \frac{p}{2}\right). \tag{D.9}$$

Postupem analogickým jako u elipsy a hyperboly odvodíme rovnici paraboly v polárních souřadnicích. Výsledná rovnice paraboly je

► $$r = \frac{p}{1 + \varepsilon \cos\varphi}; \qquad \varepsilon = \pm 1. \tag{D.10}$$

Znaménko „+“ platí pro parabolu symetrickou kolem svislé osy y, znaménko „–„ pro parabolu symetrickou kolem vodorovné osy x. Rovnice všech kuželoseček mají tedy stejný tvar:

► $$r = \frac{p}{1 + \varepsilon \cos\varphi}; \qquad \begin{cases} |\varepsilon| < 1 & \text{elipsa,} \\ |\varepsilon| > 1 & \text{hyperbola,} \\ |\varepsilon| = 1 & \text{parabola.} \end{cases} \tag{D.11}$$

Dodatek E – Diracova symbolika a operátory v kvantové teorii

V této kapitole se budeme zabývat nejdůležitější matematikou potřebnou v kvantové teorii. Veškeré úvahy jsou z důvodu jednoduchosti provedeny pro případ, kdy vlastní čísla operátorů jsou navzájem různá a tvoří spočetnou množinu. Obecnější případy vícenásobných vlastních čísel a spojitého spektra jsou v tomto dodatku diskutovány jen okrajově.

E1 Unitární prostory (prostory se skalárním součinem)

V dodatku B jsme rozšířili pojem vektoru na obecnější objekty než jsou uspořádané trojice a zavedli lineární vektorový prostor. Pozorně si znovu tuto pasáž přečtěte! Nyní analogicky rozšíříme pojem skalárního součinu pro různé lineární vektorové prostory. Budeme důsledně používat Diracovu symboliku, kterou zavedl Paul Adrien Maurice Dirac pro kvantovou teorii. Prvky lineárních vektorových prostorů jsou značeny symboly $|\mathbf{f}>, |\mathbf{x}>, |\mathbf{a}>$ a skalární součiny $<\mathbf{f}|\mathbf{g}>, <\mathbf{x}|\mathbf{y}>, <\mathbf{a}|\mathbf{b}>$ atd.

Prostor reálných trojic $\mathcal{R}^3$

Prvky vektorového prostoru budeme označovat

$$|\mathbf{f}> = (f_1, f_2, f_3); \qquad |\mathbf{g}> = (g_1, g_2, g_3)$$

a jejich skalární součin je zaveden standardním způsobem:

$$<\mathbf{f}|\mathbf{g}> \equiv f_1 g_1 + f_2 g_2 + f_3 g_3 = f_k g_k. \tag{E.1}$$

Norma vektoru (velikost) se definuje vztahem

$$||\mathbf{f}|| \equiv \sqrt{<\mathbf{f}|\mathbf{f}>} \overset{\text{pro } \mathcal{R}^3}{=} \sqrt{f_1^2 + f_2^2 + f_3^2}\,. \tag{E.2}$$

Pro reálné trojice znázorněné jako úsečky opatřené šipkami je norma vektoru rovna délce úsečky a platí $<\mathbf{f}|\mathbf{g}> = ||\mathbf{f}|| \cdot ||\mathbf{g}|| \cdot \cos\alpha$, kde α je úhel sevřený oběma vektory. Z tohoto vztahu plyne okamžitě *Schwartzovo lemma*:

► $$|<\mathbf{f}|\mathbf{g}>| \leq ||\mathbf{f}|| \cdot ||\mathbf{g}||. \tag{E.3}$$

Výsledkem operace skalárního součinu je číslo, v případě lineárního vektorového prostoru $\mathcal{R}^3$ reálné číslo, v obecném případě bude výhodné uvažovat i o čísle komplexním. Norma vektoru (velikost) musí ale vždy být nezáporné reálné číslo.

Prostor reálných *N*-tic $\mathcal{R}^N$

Prvky tohoto prostoru jsou nyní reálné *N*-tice

$$|\mathbf{f}> = (f_1,\dots,f_N), \qquad |\mathbf{g}> = (g_1,\dots,g_N); \qquad f_l, g_l \in \mathcal{R},$$

definici skalárního součinu rozšíříme přirozeným způsobem:

$$\blacktriangleright \qquad <\mathbf{f}|\mathbf{g}> \equiv f_1 g_1 + \cdots + f_N g_N = \sum_{k=1}^{N} f_k g_k = f_k g_k . \tag{E.4}$$

V platnosti zůstává definice normy i Schwartzovo lemma.

Prostor komplexních N-tic C^N

Prvky tohoto prostoru jsou nyní komplexní *N*-tice

$$|\mathbf{f}> = (f_1,\dots,f_N), \qquad |\mathbf{g}> = (g_1,\dots,g_N);. \qquad f_l, g_l \in C.$$

Skalární součin definujeme v jednom z argumentů komplexně sdružený (v této učebnici bude komplexně sdružený levý argument):

$$\blacktriangleright \qquad <\mathbf{f}|\mathbf{g}> \equiv f_1^* g_1 + \cdots + f_N^* g_N = \sum_{k=1}^{N} f_k^* g_k = f_k^* g_k . \tag{E.5}$$

Pro komplexní číslo $z = a + i\,b$ je velikost (norma) čísla dána vztahem

$$\|z\| = \sqrt{z^* z}\,.$$

Právě proto, aby pro komplexní čísla zůstalo v platnosti, že norma vektoru je odmocnina skalárního součinu vektoru se sebou samým, je v definici skalárního součinu komplexní sdružení v jednom z argumentů. Při výše uvedené definici skalárního součinu bude výsledkem sice komplexní číslo, ale norma vektoru zůstane reálná nezáporná:

$$\|f\| = \sqrt{\langle f|f\rangle} = \sqrt{f_1^* f_1 + \cdots + f_N^* f_N} = \sqrt{\left|f_1^2\right| + \cdots + \left|f_N^2\right|} \geq 0 .$$

Opět platí Schwartzovo lemma.

Prostor komplexních posloupností (*N*-tice s $N \to \infty$) ℓ^2

Nyní již nepůjde o *N*-tice, ale o celé posloupnosti komplexních čísel:

$$|\mathbf{f}> = \{f_1, \dots, f_n, \dots\} = \{f_l\}_{l=1}^{\infty}, \qquad |\mathbf{g}> = \{g_l\}_{l=1}^{\infty}; \qquad f_l, g_l \in C .$$

Pokusme se skalární součin definovat obdobně, jako v předchozích příkladech:

$$\blacktriangleright \qquad <\mathbf{f}|\mathbf{g}> \equiv f_1^* g_1 + \cdots + f_n^* g_n + \cdots = \sum_{k=1}^{\infty} f_k^* g_k = f_k^* g_k . \tag{E.6}$$

Takto definovaný skalární součin má smysl jen pro konvergentní posloupnosti. Do prostoru l^2 můžeme zahrnout jen takové prvky $|\mathbf{f}>$, pro které je $\|\mathbf{f}\| < \infty$, tj. požadujeme

$$\sum_{k=1}^{\infty} f_k^* f_k = \sum_{k=1}^{\infty} |f_k|^2 < \infty \qquad \text{pro } \forall\, |\mathbf{f}> \in l^2 . \tag{E.7}$$

Potom je

$$|<\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}>| = |\sum_{k=1}^{\infty} f_k^* g_k| \le ||\mathbf{f}|| \cdot ||\mathbf{g}|| < \infty \qquad \text{pro } \forall\, |\mathbf{f}>, |\mathbf{g}> \in l^2 ,$$

tj. Schwartzovo lemma platí i v případě nekonečných posloupností.

Prostor komplexních funkcí reálné proměnné $\mathcal{L}^2$ $(-\infty, \infty)$

Při dalším zobecnění prostoru l^2 si můžeme index k představit spojitý. Místo k budeme psát x: f_x. Výraz f_x není ale nic jiného než komplexní funkce reálné proměnné (spojitého indexu), kterou je zvykem zapisovat ve tvaru $f(x)$, tj. prvky našeho prostoru budou

$$|\mathbf{f}> \equiv f_x \equiv f(x), \qquad |\mathbf{g}> \equiv g_x \equiv g(x); \qquad x \in \mathcal{R}, \quad f, g \in C.$$

Součet ve skalárním součinu se stane integrálem:

► $$<\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}> \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x)\, g(x)\, \mathrm{d}x . \tag{E.8}$$

Analogicky jako v l^2 je třeba do prostoru $\mathcal{L}^2$ zahrnout jen prvky s $||\mathbf{f}|| < \infty$, tj. požadujeme, aby

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x)\, f(x)\, \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2\, \mathrm{d}x < \infty \qquad \text{pro } \forall\, f(x) \in \mathcal{L}^2 . \tag{E.9}$$

Potom je

$$|<\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}>| = |\int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x)\, g(x)\, \mathrm{d}x| \le ||\mathbf{f}|| \cdot ||\mathbf{g}|| < \infty \qquad \text{pro } \forall\, |\mathbf{f}>, |\mathbf{g}> \in \mathcal{L}^2$$

a skalární součin má smysl. Schwartzovo lemma platí i pro integrály. $\mathcal{L}^2$ se někdy nazývá *prostor funkcí integrovatelných s kvadrátem*. Lze ho definovat i pro jiný definiční obor než celou reálnou osu $(-\infty, \infty)$, potom píšeme $\mathcal{L}^2(\mathcal{M})$, kde $\mathcal{M}$ je definiční obor funkcí $f(x) \in \mathcal{L}^2(\mathcal{M})$.

Nyní můžeme přistoupit k obecné definici prostorů se skalárním součinem.

Unitární prostor

Unitárním prostorem (neboli prostorem se skalárním součinem) nazveme lineární vektorový prostor $\mathcal{V}$ (s operací $+ : \mathcal{V} \times \mathcal{V} \to \mathcal{V}$ a operací $\cdot : C \times \mathcal{V} \to \mathcal{V}$), na kterém je definována další operace

$$< \,|\, > \; : \qquad \mathcal{V} \times \mathcal{V} \to C$$

(tzv. skalární součin) s vlastnostmi

1) $\langle \mathbf{f} \,|\, \mathbf{g}+\mathbf{h} \rangle = \langle \mathbf{f} \,|\, \mathbf{g} \rangle + \langle \mathbf{f} \,|\, \mathbf{h} \rangle$,
2) $\langle \mathbf{f} \,|\, \alpha\, \mathbf{g} \rangle = \alpha \langle \mathbf{f} \,|\, \mathbf{g} \rangle$,
3) $\langle \mathbf{g} \,|\, \mathbf{f} \rangle = \langle \mathbf{f} \,|\, \mathbf{g} \rangle^*$ $\qquad (\Rightarrow \langle \alpha\, \mathbf{f} \,|\, \mathbf{g} \rangle = \alpha^* \langle \mathbf{f} \,|\, \mathbf{g} \rangle)$,
4) $\langle \mathbf{f} \,|\, \mathbf{f} \rangle \geq 0 \quad ; \quad \langle \mathbf{f} \,|\, \mathbf{f} \rangle = 0 \quad \Leftrightarrow \quad |\, \mathbf{f} \rangle = 0.$

Poznámka 1: Přidáním operace [,] z lineárního vektorového prostoru získáme Lieovu algebru, přidáním operace < | > získáme unitární prostor.

Poznámka 2: První dvě operace v definici znamenají linearitu v pravém argumentu. Z třetí operace plyne antilinearita v levém argumentu (aditivnost + vytknutí komplexně sdružené konstanty).

Poznámka 3: Symbolika zápisu pochází od P. A. M. Diraca. Nazývá se také braketová symbolika nebo brakety (z anglického bracket = závorka).

< | > „braket“;

< | „bra“ (lze přesně definovat, naznačená operace skalárního součinu);

| > „ket“ (vektor z $\mathcal{V}$).

Poznámka 4: Pro komplexní N-tice lze interpretovat $|\, \mathbf{f} \rangle$ jako sloupcovou matici, $\langle \mathbf{f} \,|$ jako transponovanou komplexně sdruženou matici:

$$|\, \mathbf{f} \rangle = \begin{pmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_N \end{pmatrix}; \qquad \langle \mathbf{f} \,| = \begin{pmatrix} f_1^* & \cdots & f_N^* \end{pmatrix}.$$

Potom je skalární součin

$$\langle \mathbf{f} \,|\, \mathbf{g} \rangle = \begin{pmatrix} f_1^* & \cdots & f_N^* \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} g_1 \\ \vdots \\ g_N \end{pmatrix} = f_k^* g_k$$

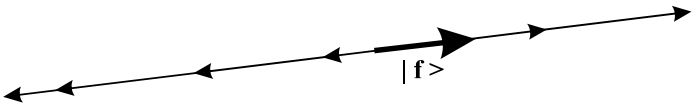
definován za pomoci maticového násobení. Pro jiné prostory než N-tice není pro naše účely třeba jednotlivé části skalárního součinu $\langle \mathbf{f} \,|\, \mathbf{g} \rangle$ nějak interpretovat.

Poznámka 5: Pro $\mathcal{L}^2$ lze chápat $\langle \mathbf{f} \,| = \int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x) \cdots \mathrm{d}x$ jako naznačenou operaci skalárního součinu. Je jen třeba doplnit patřičnou funkci, na kterou operace působí. Podobná situace je u derivování, napíšeme-li jen $\mathrm{d}/\mathrm{d}x$.

Poznámka 6: Diracova symbolika mimořádně zjednodušila většinu zápisů v kvantové teorii. Matematikové k ní z počátku byli nedůvěřiví, nicméně ji po určité době akceptovali. Dnes si nedokážeme zápis dějů probíhajících v mikrosvětě bez této symboliky představit. Zejména zápisy projekčních operátorů, věty o úplnosti nebo věty o spektrálním rozvoji by bez této symboliky byly mimořádně nepřehledné a kostrbaté.

Paprsek

Nechť $\mathcal{V}$ je unitární prostor a $|\mathbf{f}>$ jeho nenulový prvek. Paprskem nataženým na $|\mathbf{f}>$ nazveme množinu prvků $\{|\mathbf{g}>;\ |\mathbf{g}>=\alpha|\mathbf{f}>;\quad \alpha \in C\setminus\{0\},\qquad |\mathbf{f}>,|\mathbf{g}>\in\mathcal{V}\}$.



Obr. E1: Paprsek.

Hilbertův prostor

Hilbertův prostor je úplný unitární prostor (hranice prostoru je jeho součástí).

Separabilní Hilbertův prostor

Separabilní Hilbertův prostor je Hilbertův prostor se spočetnou bází.

E2 Operátory

Operátorem rozumíme zobrazení

$$\hat{\mathbf{A}}:\quad \mathcal{V}\to\mathcal{V},$$

které prvku $|\mathbf{f}>$ prostoru $\mathcal{V}$ přiřazuje prvek $|\mathbf{g}>$ tohoto prostoru:

$$\hat{\mathbf{A}}|\mathbf{f}>=|\mathbf{g}>.$$

V platnosti zůstává běžné názvosloví používané pro zobrazení (*vzor, obraz, definiční obor, obor hodnot*…).

◖ Příklad E1: prostor $\mathcal{R}^3$

Operátorem na $\mathcal{R}^3$ může být libovolná matice 3×3, například

$$\hat{\mathbf{A}}=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&1\end{pmatrix};\qquad |\mathbf{f}>=\begin{pmatrix}1\\2\\1\end{pmatrix}\quad\Rightarrow$$

$$\hat{\mathbf{A}}|\mathbf{f}>=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&1\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}1\\2\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\1\\3\end{pmatrix}=|\mathbf{g}>,\qquad \text{obecně}$$

$$\hat{\mathbf{A}}|\mathbf{f}>=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&1\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}f_1\\f_2\\f_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}f_1\\f_3\\f_2+f_3\end{pmatrix}.$$

◗

◖ Příklad E2: prostor $\mathcal{L}^2$ (– ∞ , ∞)

Za typický operátor na prostoru funkcí můžeme považovat derivaci funkce. Vždy musíme ale vybírat funkce integrovatelné s kvadrátem a zkontrolovat, zda si i po derivování tuto vlastnost ponechaly:

$$\hat{\mathbf{D}} \equiv \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}; \qquad |\mathbf{f}> = x\,\mathrm{e}^{-x} \qquad \Rightarrow$$

$$\hat{\mathbf{D}}|\mathbf{f}> = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(x\,\mathrm{e}^{-x}\right) = (1-x)\,\mathrm{e}^{-x} = |\mathbf{g}>.$$

◗

Jednotkový operátor

Jednotkový operátor je definován předpisem

► $$\hat{\mathbf{1}}|\mathbf{f}> \equiv |\mathbf{f}>. \tag{E.10}$$

Pro *N*-tice je jednotkovým operátorem diagonální matice s jednotkami na diagonále (jednotková matice) – ověřte!

Kvadrát operátoru

Druhou mocninu operátoru můžeme definovat, je-li obor funkčních hodnot operátoru podmnožinou jeho definičního oboru, potom lze psát

$$\hat{\mathbf{A}}^2|\mathbf{f}> \equiv \hat{\mathbf{A}}\left(\hat{\mathbf{A}}|\mathbf{f}>\right). \tag{E.11}$$

◖ Příklad E3: druhá mocnina derivace

Druhá mocnina derivace je podle předchozí definice druhou derivací dané funkce:

$$\hat{\mathbf{D}} \equiv \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}; \qquad |\mathbf{f}> = \mathrm{e}^{-x^2} \qquad \Rightarrow$$

$$\hat{\mathbf{D}}^2|\mathbf{f}> \equiv \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\mathrm{e}^{-x^2}\right) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(-2x\,\mathrm{e}^{-x^2}\right) = (-2+4x^2)\,\mathrm{e}^{-x^2}.$$

◗

Mocnina operátoru

Mocninu operátoru definujeme indukcí (předpokládáme znalost druhé mocniny a to, že obor funkčních hodnot je podmnožinou definičního oboru operátoru):

► $$\hat{\mathbf{A}}^n|\mathbf{f}> \equiv \hat{\mathbf{A}}\left(\hat{\mathbf{A}}^{n-1}|\mathbf{f}>\right). \tag{E.12}$$

Funkce operátoru

Nechť $f(x)$ je analytická funkce s Taylorovým rozvojem

► $$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^k. \tag{E.13}$$

Potom můžeme definovat funkci operátoru předpisem

$$f(\hat{\mathbf{A}}) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \hat{\mathbf{A}}^k \quad . \tag{E.14}$$

Připomeňme si zde rozvoje některých důležitých funkcí:

$$\frac{1}{1-x} = 1 + x + x^2 + x^3 + x^4 + x^5 + \cdots \quad ,$$

$$\mathrm{e}^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \cdots \quad ,$$

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \frac{x^9}{9!} + \cdots \quad ,$$

$$\cos x = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \frac{x^8}{8!} - \cdots \quad ,$$

$$\sinh x = x + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} + \frac{x^7}{7!} + \frac{x^9}{9!} + \cdots \quad ,$$

$$\cosh x = 1 + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} + \frac{x^6}{6!} + \frac{x^8}{8!} + \cdots \quad .$$

◖ Příklad E4: exponenciála z matice

Na prostoru $\mathcal{C}^2$ je zadán maticový operátor $\hat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}$. Určete $\exp(\hat{\mathbf{A}})$.

$$\hat{\mathbf{A}}^2 = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{\mathbf{1}},$$

$$\hat{\mathbf{A}}^3 = \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{A}}^2 = \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{1}} = \hat{\mathbf{A}},$$

$$\hat{\mathbf{A}}^4 = \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{A}}^3 = \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{A}}^2 = \hat{\mathbf{1}},$$

$$\vdots$$

$$\hat{\mathbf{A}}^{2n-1} = \hat{\mathbf{A}}, \qquad \hat{\mathbf{A}}^{2n} = \hat{\mathbf{1}}, \qquad n = 1, 2, \ldots .$$

Nyní již snadno nalezneme hledanou funkci matice:

$$\exp(\hat{\mathbf{A}}) = 1 + \hat{\mathbf{A}} + \frac{\hat{\mathbf{A}}^2}{2!} + \frac{\hat{\mathbf{A}}^3}{3!} + \frac{\hat{\mathbf{A}}^4}{4!} + \cdots =$$

$$= \left(1 + \frac{1}{2!} + \frac{1}{4!} + \frac{1}{6!} + \cdots\right) \hat{\mathbf{1}} + \left(1 + \frac{1}{3!} + \frac{1}{5!} + \frac{1}{7!} + \cdots\right) \hat{\mathbf{A}} =$$

$$= \cosh(1)\, \hat{\mathbf{1}} + \sinh(1)\, \hat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} \cosh 1 & -\mathrm{i} \sinh 1 \\ \mathrm{i} \sinh 1 & \cosh 1 \end{pmatrix}.$$

Takto získají smysl například i výrazy typu sin (d/dx) a podobně. Později se naučíme funkci operátoru nalézt pomocí spektrálního rozvoje operátoru, viz vztah (E.47). Jde o efektivnější způsob než je Taylorův rozvoj. ◗

Inverzní operátor

Inverzním operátorem k $\hat{\mathbf{A}}$ nazveme takový operátor $\hat{\mathbf{A}}^{-1}$, že pro něho platí

► $$\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{A}}^{-1} = \hat{\mathbf{A}}^{-1} \cdot \hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{1}}. \tag{E.15}$$

K danému operátoru $\hat{\mathbf{A}}$ může být nalezení inverzního operátoru značně obtížné, někdy inverzní operátor neexistuje vůbec.

Sdružený operátor

Sdruženým operátorem k $\hat{\mathbf{A}}$ nazveme takový operátor $\hat{\mathbf{A}}^{\dagger}$, že pro něho platí

► $$< \mathbf{f} \,|\, \hat{\mathbf{A}}\mathbf{g} > \; = \; < \hat{\mathbf{A}}^{\dagger}\mathbf{f} \,|\, \mathbf{g} >. \tag{E.16}$$

Působení původního operátoru v pravé straně skalárního součinu dopadne stejně jako působení k němu sdruženého operátoru v levé části skalárního součinu. Sdružený operátor nemusí vždy existovat.

◖ **Příklad E5: inverzní a sdružený operátor k matici 2×2**

Dokažte, že k zadané matici mají inverzní a sdružený operátor tvar daný vztahy:

$$\hat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} 1 & 2\mathrm{i} \\ 0 & \mathrm{i} \end{pmatrix} \;; \qquad \hat{\mathbf{A}}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ 0 & -\mathrm{i} \end{pmatrix} \;; \qquad \hat{\mathbf{A}}^{\dagger} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -2\mathrm{i} & -\mathrm{i} \end{pmatrix} .$$

Stačí dosadit do definičních vztahů (E.15) a (E.16):

$$\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{A}}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 2\mathrm{i} \\ 0 & \mathrm{i} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ 0 & -\mathrm{i} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{\mathbf{1}},$$

$$\hat{\mathbf{A}}^{-1} \cdot \hat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ 0 & -\mathrm{i} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 2\mathrm{i} \\ 0 & \mathrm{i} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{\mathbf{1}};$$

$$\hat{\mathbf{A}} \,|\, \mathbf{g} > = \begin{pmatrix} 1 & 2\mathrm{i} \\ 0 & \mathrm{i} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_1 + 2\mathrm{i}\, g_2 \\ \mathrm{i}\, g_2 \end{pmatrix},$$

$$\hat{\mathbf{A}}^{\dagger} \,|\, \mathbf{f} > = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -2\mathrm{i} & -\mathrm{i} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ -2\mathrm{i}\, f_1 - \mathrm{i}\, f_2 \end{pmatrix} \;\Rightarrow$$

$$< \mathbf{f} \,|\, \hat{\mathbf{A}}\mathbf{g} > = \begin{pmatrix} f_1^* & f_2^* \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} g_1 + 2\mathrm{i}\, g_2 \\ \mathrm{i}\, g_2 \end{pmatrix} = f_1^* g_1 + 2\mathrm{i}\, f_1^* g_2 + \mathrm{i}\, f_2^* g_2 \,,$$

$$< \hat{\mathbf{A}}^{\dagger}\mathbf{f} \,|\, \mathbf{g} > = \begin{pmatrix} f_1^* & 2\mathrm{i}\, f_1^* + \mathrm{i}\, f_2^* \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \end{pmatrix} = f_1^* g_1 + 2\mathrm{i}\, f_1^* g_2 + \mathrm{i}\, f_2^* g_2 \,.$$

◗

Poznámka: Nalézt sdružený operátor pro matice je velmi snadné, původní matici stačí komplexně sdružit a poté transponovat (překlopit kolem diagonály), tj.

$$\hat{\mathbf{A}}^{\dagger} = (\hat{\mathbf{A}}^{*})^{T}.$$

Uveďme nyní velmi užitečné vztahy pro výpočet inverzního a sdruženého operátoru pro součin dvou operátorů:

$$(\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}})^{-1} = \hat{\mathbf{B}}^{-1}\,\hat{\mathbf{A}}^{-1}\,, \tag{E.17}$$

$$(\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}})^{\dagger} = \hat{\mathbf{B}}^{\dagger}\hat{\mathbf{A}}^{\dagger}\,. \tag{E.18}$$

Jejich důkaz je triviální přímo z definice inverzního a sdruženého operátoru:

$$(\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}})^{-1}\cdot\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}} = \hat{\mathbf{1}} \qquad / \quad \hat{\mathbf{B}}^{-1} \quad \text{zprava}\,,$$
$$(\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}})^{-1}\cdot\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{B}}^{-1} \qquad / \quad \hat{\mathbf{A}}^{-1} \quad \text{zprava}\,,$$
$$(\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}})^{-1} = \hat{\mathbf{B}}^{-1}\,\hat{\mathbf{A}}^{-1}\,.$$

Analogicky postupujeme i pro sdružený operátor:

$$<(\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}})^{\dagger}\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}> = <\mathbf{f}\,|\,\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}}\mathbf{g}> = <\hat{\mathbf{A}}^{\dagger}\mathbf{f}\,|\hat{\mathbf{B}}\mathbf{g}> = <\hat{\mathbf{B}}^{\dagger}\hat{\mathbf{A}}^{\dagger}\,\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}>\,.$$

Komutativita operátorů

Pro operátory je obecně $\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}} \neq \hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{A}}$. Říkáme, že operátory nekomutují. Míru nekomutativnosti můžeme posoudit za pomoci tzv. *komutátoru*

► $$[\hat{\mathbf{A}},\hat{\mathbf{B}}] \equiv \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}} - \hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{A}}\,. \tag{E.19}$$

Je-li komutátor operátorů $\hat{\mathbf{A}}$, $\hat{\mathbf{B}}$ nulový, operátory komutují, je-li různý od nuly nekomutují. Výsledkem komutátoru je opět operátor. Uveďme nejdůležitější vlastnosti komutátorů (zkuste je dokázat)

1) $[\hat{\mathbf{A}},\hat{\mathbf{B}}] = -[\hat{\mathbf{B}},\hat{\mathbf{A}}]$,
2) $[\hat{\mathbf{A}}+\hat{\mathbf{B}},\hat{\mathbf{C}}] = [\hat{\mathbf{A}},\hat{\mathbf{C}}]+[\hat{\mathbf{B}},\hat{\mathbf{C}}]$,
3) $[\alpha\cdot\hat{\mathbf{A}},\hat{\mathbf{B}}] = \alpha\cdot[\hat{\mathbf{A}},\hat{\mathbf{B}}]$,
4) $[\hat{\mathbf{A}},[\hat{\mathbf{B}},\hat{\mathbf{C}}]]+[\hat{\mathbf{B}},[\hat{\mathbf{C}},\hat{\mathbf{A}}]]+[\hat{\mathbf{C}},[\hat{\mathbf{A}},\hat{\mathbf{B}}]] = 0$.

To jsou ale právě definiční vlastnosti Lieovy algebry (B.2) až (B.5). Komutátory tvoří Lieovu algebru na prostoru operátorů.

◖ Příklad E6: komutační relace [d/dx, x]

Mějme na $\mathcal{L}^2$ dva operátory: $\hat{\mathbf{D}} = \mathrm{d}/\mathrm{d}x$ a $\hat{\mathbf{X}} = x$, například na prvek $|x^5>$ působí takto

$$\hat{\mathbf{D}}\,|x^5> = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}x^5 = 5x^4\,, \qquad \hat{\mathbf{X}}\,|x^5> = x\cdot x^5 = x^6\,.$$

Určeme jejich komutátor

$$[\hat{\mathbf{D}},\hat{\mathbf{X}}]\,|\,\mathbf{f}> = (\hat{\mathbf{D}}\hat{\mathbf{X}} - \hat{\mathbf{X}}\hat{\mathbf{D}})\,|\,\mathbf{f}> = \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}x - x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)f(x) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\big(x\,f(x)\big) - x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f(x) =$$
$$= f(x) + x\,f'(x) - x\,f'(x) = f(x) = |\,\mathbf{f}> \quad \Rightarrow$$

$$[\hat{\mathbf{D}},\hat{\mathbf{X}}]\,|\,\mathbf{f}>=|\,\mathbf{f}>= \quad \text{pro}\ \forall\ |\,\mathbf{f}>\in \mathcal{L}^2 \qquad \Rightarrow$$

$$[\hat{\mathbf{D}},\hat{\mathbf{X}}] = \hat{\mathbf{1}}.$$

Podobně můžeme určovat i další komutační relace.

◗

V celém tomto textu se budeme zabývat ***lineárními operátory***, tj. operátory s lineární odezvou:

$$\hat{\mathbf{A}}(\alpha\,|\,\mathbf{f}>+\beta\,|\,\mathbf{g}>)=\alpha\,\hat{\mathbf{A}}\,|\,\mathbf{f}>+\beta\,\hat{\mathbf{A}}\,|\,\mathbf{g}>.$$

Všechny dosud uvedené operátory byly lineární. V kvantové teorii se setkáme především se dvěma druhy lineárních operátorů – operátory *unitárními* a operátory *Hermitovými*. Uveďme nyní definice těchto operátorů.

Unitární operátory

Definice: unitární operátor zachovává skalární součin, tj.

► $$<\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}>=<\hat{\mathbf{U}}\,\mathbf{f}\,|\,\hat{\mathbf{U}}\mathbf{g}>. \tag{E.20}$$

Skalární součin se před a po působení unitárního operátoru nezmění.

Věta: Pro unitární operátory je sdružený a inverzní operátor totožný, tj.

► $$\hat{\mathbf{U}}^{\dagger}=\hat{\mathbf{U}}^{-1}. \tag{E.21}$$

Důkaz: Z definice sdruženého operátoru víme, že

$$<\hat{\mathbf{U}}\mathbf{f}\,|\,\hat{\mathbf{U}}\mathbf{g}>=<\hat{\mathbf{U}}^{\dagger}\hat{\mathbf{U}}\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}>.$$

Pro zachování skalárního součinu (definice unitárního operátoru) je nutné, aby

$$\hat{\mathbf{U}}^{\dagger}\hat{\mathbf{U}}=\hat{\mathbf{1}},$$

to ale podle definice inverzního operátoru právě znamená, že

$$\hat{\mathbf{U}}^{\dagger}=\hat{\mathbf{U}}^{-1}.$$

◖ **Příklad E7: operátor $\hat{\mathbf{U}}\equiv \mathrm{e}^{\mathrm{i}x}$**

Ukážeme, že operátor $\hat{\mathbf{U}}\equiv \mathrm{e}^{\mathrm{i}x}$ na prostoru $\mathcal{L}^2$ je unitární:

$$|\,\mathbf{f}>=f(x), \qquad \hat{\mathbf{U}}|\,\mathbf{f}>=\mathrm{e}^{\mathrm{i}x}\,f(x),$$

$$|\,\mathbf{g}>=g(x), \qquad \hat{\mathbf{U}}|\,\mathbf{g}>=\mathrm{e}^{\mathrm{i}x}\,g(x),$$

$$<\hat{\mathbf{U}}\mathbf{f}\,|\,\hat{\mathbf{U}}\mathbf{g}>=\int\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}x}\,f(x)\right)^{*}\mathrm{e}^{\mathrm{i}x}\,g(x)\,\mathrm{d}x=\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}x}\,f^{*}(x)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}x}\,g(x)\,\mathrm{d}x=$$

$$=\int f^{*}(x)\,g(x)\,\mathrm{d}x=<\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}>.$$

◗

Hermitovy operátory

Definice: Hermitův operátor působí v obou částech skalárního součinu stejně, tj.

$$\blacktriangleright \qquad <\hat{\mathbf{A}}\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}> = <\mathbf{f}\,|\,\hat{\mathbf{A}}\mathbf{g}>. \tag{E.22}$$

Věta: Pro Hermitův operátor je sdružený operátor roven původnímu, je *samosdružený*:

$$\blacktriangleright \qquad \hat{\mathbf{A}}^{\dagger} = \hat{\mathbf{A}}. \tag{E.23}$$

Důkaz: Plyne okamžitě z definice sdruženého operátoru.

Poznámka: V přesné matematice se definice samosdruženého a Hermitova operátoru nepatrně liší požadavky na definiční obor, pro naše účely nebudeme samosdružené a Hermitovy operátory rozlišovat. Vzhledem k tomu, že Hermitův operátor působí v obou částech skalárního součinu stejně, často se píše

$$<\hat{\mathbf{A}}\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}> = <\mathbf{f}\,|\,\hat{\mathbf{A}}\mathbf{g}> = <\mathbf{f}\,|\,\hat{\mathbf{A}}\,|\,\mathbf{g}>.$$

Centrální pozice $\hat{\mathbf{A}}$ naznačuje, že podle vlastního uvážení můžeme operátorem zapůsobit vlevo či vpravo. Tato struktura se někdy nazývá Diracův sendvič.

◖ Příklad E8: operátor $\hat{\mathbf{B}} \equiv \mathrm{i}\,\mathrm{d}/\mathrm{d}x$

Ukážeme, že operátor $\hat{\mathbf{B}} = \mathrm{i}\,\mathrm{d}/\mathrm{d}x$ na prostoru $\mathcal{L}^2(-\infty, \infty)$ je hermitovský:

$$<\hat{\mathbf{B}}\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}> = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} f(x)\right)^{*} g(x)\,\mathrm{d}x =$$

$$= -\mathrm{i}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}f^{*}(x)}{\mathrm{d}x} g(x)\,\mathrm{d}x \overset{\text{p. partes}}{=}$$

$$= -\mathrm{i}\left[f^{*}(x)\,g(x)\right]_{-\infty}^{\infty} + \mathrm{i}\int_{-\infty}^{\infty} f^{*}(x)\frac{\mathrm{d}g(x)}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x =$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^{*}(x)\left(\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}g(x)}{\mathrm{d}x}\right)\mathrm{d}x = <\mathbf{f}\,|\,\hat{\mathbf{B}}\mathbf{g}>.$$

Výraz v hranaté závorce je nulový, neboť funkce z $\mathcal{L}^2(-\infty, \infty)$ jsou integrovatelné s kvadrátem na $(-\infty, \infty)$, a proto musí platit

$$\lim_{x\to\pm\infty} f(x) = \lim_{x\to\pm\infty} g(x) = 0 \quad \text{pro } \forall\, f, g \in \mathcal{L}^2.$$

Samotný operátor derivace $\hat{\mathbf{D}} = \mathrm{d}/\mathrm{d}x$ hermitovský není, při provedení integrace per partes by se zaměnilo znaménko a platilo by

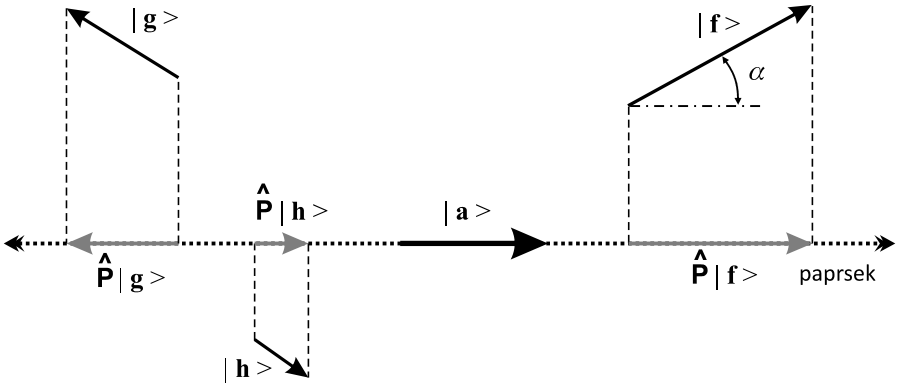
$$<\hat{\mathbf{D}}\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}> = -<\mathbf{f}\,|\,\hat{\mathbf{D}}\mathbf{g}>.$$

◗

E3 Projekční operátory

Cílem této kapitoly bude naučit se nacházet projekce vektorů do předem zadaného paprsku. Jde o úlohu, která má prvořadý význam nejen pro kvantovou teorii. Rozvoje do různých typů řad (například Fourierova řada) nejsou nic jiného než hledání projekcí zadané funkce do vektorů nějaké báze, které reprezentují paprsek v prostoru.

Z celého paprsku stačí vzít jediný vektor, který paprsek zcela popíše. Vybereme tento „reprezentativní" vektor jednotkový, tj. tak, aby $\langle \mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle = 1$, tj. $\|\mathbf{a}\| = 1$. Snadno představitelná je situace v $\mathcal{R}^2$. Na obrázku vidíme jednotkový vektor $|\mathbf{a}\rangle$ reprezentující paprsek a vektory $|\mathbf{f}\rangle$, $|\mathbf{g}\rangle$, $|\mathbf{h}\rangle$, které do tohoto paprsku budeme promítat.



Obr. E2. Projekce vektorů do zadaného směru.

Projekce libovolného vektoru $|\mathbf{f}\rangle$ má velikost $\|\mathbf{f}\|\cdot\cos\alpha$ a směr $|\mathbf{a}\rangle / \|\mathbf{a}\|$. Znaménko funkce cos ve velikosti projekce určuje, zda promítaný vektor míří ve směru $|\mathbf{a}\rangle$ nebo ve směru opačném. Projekci lze napsat jako součin její velikosti a směru:

$$\hat{\mathbf{P}}|\mathbf{f}\rangle = \|\mathbf{f}\|\cdot\cos\alpha\,\frac{|\mathbf{a}\rangle}{\|\mathbf{a}\|} = \|\mathbf{f}\|\cdot\frac{\langle\mathbf{a}|\mathbf{f}\rangle}{\|\mathbf{a}\|\cdot\|\mathbf{f}\|}\cdot\frac{|\mathbf{a}\rangle}{\|\mathbf{a}\|} = \frac{\langle\mathbf{a}|\mathbf{f}\rangle}{\|\mathbf{a}\|\cdot\|\mathbf{a}\|}|\mathbf{a}\rangle = \frac{\langle\mathbf{a}|\mathbf{f}\rangle}{\langle\mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle}|\mathbf{a}\rangle .$$

Povšimněte si, že při úpravách výrazů v Diracově symbolice můžeme libovolně stěhovat čísla (normy vektorů a skalární součiny). Výraz pro projekci se skládá z koeficientu, který určuje velikost projekce a vektoru $|\mathbf{a}\rangle$. Zapíšeme-li formálně koeficient až za vektor, získáme operátorový tvar:

$$\hat{\mathbf{P}}|\mathbf{f}\rangle = |\mathbf{a}\rangle\frac{\langle\mathbf{a}|\mathbf{f}\rangle}{\langle\mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle} = \frac{|\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{a}|\mathbf{f}\rangle}{\langle\mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle} .$$

Označme

$$\hat{\mathbf{P}} \equiv \frac{|\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{a}|}{\langle\mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle} . \qquad \text{(E.24)}$$

Tento výraz se nazývá projekčním operátorem. Sám o sobě význam nemá, jde o naznačenou operaci skalárního součinu, která musí být vykonána. Teprve zapůsobením projekčního operátoru na nějaký vektor $|\mathbf{f}\rangle$ dostaneme smysluplný výraz – projekci vektoru danou koeficientem $\langle\mathbf{a}|\mathbf{f}\rangle / \langle\mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle$ a směrem vektoru $|\mathbf{a}\rangle$. Situace je podobná

operátoru d/dx, také jde jen o naznačenou derivaci, která musí být vykonána na konkrétní funkci. Bude-li vektor $|\mathbf{a}>$ jednotkový, výrazy se ještě zjednoduší:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{P}} &\equiv |\mathbf{a}><\mathbf{a}|, \\ \hat{\mathbf{P}}\,|\mathbf{f}> &\equiv |\mathbf{a}><\mathbf{a}|\mathbf{f}>. \end{aligned} \tag{E.25}$$

Koeficient projekce je $<\mathbf{a}|\mathbf{f}>$ a směr je $|\mathbf{a}>$.

◖ Příklad E9: projekce v rovině

Nalezněte projekci vektoru $|\mathbf{f}>$ do vektorů $|\mathbf{a}>$ a $|\mathbf{b}>$. Vektory jsou dány takto:

$$|\mathbf{f}>=\begin{pmatrix}1\\3\end{pmatrix}; \qquad |\mathbf{a}>=\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}; \qquad |\mathbf{b}>=\begin{pmatrix}-1\\+1\end{pmatrix}.$$

Řešení: Nejprve nalezneme projekční operátory:

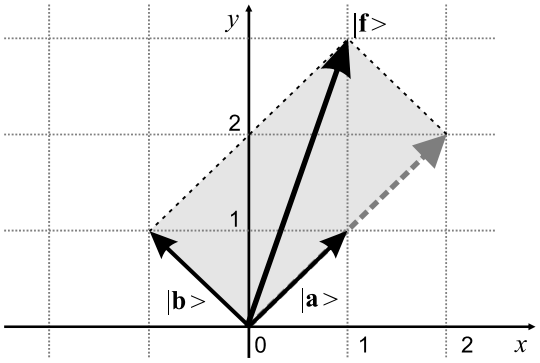
$$\hat{\mathbf{P}}_a \equiv \frac{|\mathbf{a}><\mathbf{a}|}{<\mathbf{a}|\mathbf{a}>} = \frac{\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}1 & 1\end{pmatrix}}{\begin{pmatrix}1 & 1\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}} = \frac{\begin{pmatrix}1 & 1\\1 & 1\end{pmatrix}}{2} = \begin{pmatrix}1/2 & 1/2\\1/2 & 1/2\end{pmatrix},$$

$$\hat{\mathbf{P}}_b \equiv \frac{|\mathbf{b}><\mathbf{b}|}{<\mathbf{b}|\mathbf{b}>} = \frac{\begin{pmatrix}-1\\+1\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}-1 & +1\end{pmatrix}}{\begin{pmatrix}-1 & +1\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}-1\\+1\end{pmatrix}} = \frac{\begin{pmatrix}+1 & -1\\-1 & +1\end{pmatrix}}{2} = \begin{pmatrix}1/2 & -1/2\\-1/2 & 1/2\end{pmatrix}.$$

Nyní snadno nalezneme hledané projekce:

$$\hat{\mathbf{P}}_a\,|\mathbf{f}> = \begin{pmatrix}1/2 & 1/2\\1/2 & 1/2\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}1\\3\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}2\\2\end{pmatrix},$$

$$\hat{\mathbf{P}}_b\,|\mathbf{f}> = \begin{pmatrix}1/2 & -1/2\\-1/2 & 1/2\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}1\\3\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-1\\+1\end{pmatrix}.$$



Obr. E3: Projekce vektoru $|\mathbf{f}>$ do dvou kolmých směrů.

◗

Využijme nyní tohoto příkladu a vyzkoušejte si, že platí jednoduché a užitečné relace. Výpočty jsou natolik snadné, že zde uvedeme jen výsledky:

$$\begin{aligned} &1. \quad \hat{\mathbf{P}}_a^{\dagger} = \hat{\mathbf{P}}_a\,; \qquad \hat{\mathbf{P}}_b^{\dagger} = \hat{\mathbf{P}}_b\,. \\ &2. \quad \hat{\mathbf{P}}_a^2 = \hat{\mathbf{P}}_a\,; \qquad \hat{\mathbf{P}}_b^2 = \hat{\mathbf{P}}_b\,. \\ &3. \quad \hat{\mathbf{P}}_a + \hat{\mathbf{P}}_b = \hat{\mathbf{1}}. \end{aligned} \tag{E.26}$$

První relace znamená, že projekční operátory jsou hermitovské. Pro matice je význam jednoduchý: Matice se po překlopení kolem hlavní diagonály a následném komplexním sdružení nezmění. Druhá relace má také velmi jednoduchý význam: Projekce dvakrát provedená po sobě (kvadrát operátoru) je shodná s projekcí provedenou jednou. Obě vlastnosti jsou pro projekční operátory charakteristické a většinou se považují za definici projekčního operátoru:

Projekční operátor

Projekčním operátorem nazveme takový lineární operátor, který je hermitovský a platí

$$\blacktriangleright \qquad \hat{\mathbf{P}}^2 = \hat{\mathbf{P}}\,. \tag{E.27}$$

Snadno lze ukázat, že obě vlastnosti jsou splněny pro definici (E.24), například pro druhou vlastnost máme:

$$\hat{\mathbf{P}}^2 = \frac{|\mathbf{a}><\mathbf{a}|}{<\mathbf{a}|\mathbf{a}>}\cdot\frac{|\mathbf{a}><\mathbf{a}|}{<\mathbf{a}|\mathbf{a}>} = \frac{|\mathbf{a}><\mathbf{a}|\mathbf{a}><\mathbf{a}|}{<\mathbf{a}|\mathbf{a}><\mathbf{a}|\mathbf{a}>} = \frac{|\mathbf{a}><\mathbf{a}|}{<\mathbf{a}|\mathbf{a}>} = \hat{\mathbf{P}}\quad .$$

V prostředním výrazu jsme zkrátili skalární součin v čitateli (uprostřed) s jedním ze skalárních součinů ve jmenovateli. Jde o prostá komplexní čísla, která lze vytknout před výrazy a krátit.

Význam třetí relace (E.26) je také snadno pochopitelný: Vektory $|\mathbf{a}>$, $|\mathbf{b}>$ jsou navzájem kolmé a v rovině tvoří ortogonální bázi (bázi složenou z kolmých vektorů). Projekce do těchto vektorů nejsou ničím jiným než rozkladem původního vektoru do této báze. Zkuste si obě projekce sečíst. Dostanete původní vektor. Právě matematickým vyjádřením faktu, že součet všech projekcí dá původní vektor je třetí relace:

$$\hat{\mathbf{P}}_a + \hat{\mathbf{P}}_b = \hat{\mathbf{1}} \quad \Rightarrow \quad \hat{\mathbf{P}}_a\,|\mathbf{f}> + \hat{\mathbf{P}}_b\,|\mathbf{f}> = |\mathbf{f}>. \tag{E.28}$$

Někdy se této relaci říká relace úplnosti. Pokud je daná báze úplná (nechybí v ní žádný vektor), potom je součet všech projekčních operátorů roven jednotkovému operátoru. To znamená, že součet všech projekcí libovolného vektoru dá původní vektor.

E4 Rozvoj prvku do báze

Mějme v unitárním prostoru spočetnou bázi (maximální množinu lineárně nezávislých vektorů) $\{|\mathbf{e}_k>\}$. Vhodnou lineární kombinací jednotlivých prvků můžeme vždy zajistit, aby prvky báze byly navzájem kolmé a měly jednotkovou velikost. Takové prvky budeme označovat jen pořadovým číslem: $|k>$. Báze složená z vektorů $|k>$ má dvě základní vlastnosti:

► $$< k \mid l > \; = \; \delta_{kl} \quad , \tag{E.29}$$

► $$\sum_k | \, k >< k \, | \; = \; \hat{\mathbf{1}} \quad . \tag{E.30}$$

Vlastnost (E.29) je vyjádřením ortonormality. Skalární součin dvou různých vektorů je nulový (jsou navzájem kolmé) a dvou stejných je roven jedné (vektory báze mají jednotkovou velikost). Vlastnost (E.30) je relací úplnosti báze. Součet všech projekčních operátorů dá jednotkový operátor, tj. součet všech projekcí libovolného vektoru dá původní vektor. V relaci úplnosti je možné vynechat sumaci a využít Einsteinovu sumační konvenci. V případě neseparabilních prostorů s nespočetnou bází mají obě relace tvar:

$$< x \mid y > \; = \; \delta(y - x) \, , \tag{E.31}$$

$$\int | \, x >< x \, | dx \; = \; \hat{\mathbf{1}} . \tag{E.32}$$

Na pravé straně relace ortonormality je místo Kroneckerova symbolu Diracova δ distribuce a v relaci úplnosti je místo sumace projekčních operátorů integrace.

Rozvoj prvku do báze je v Diracově symbolice mimořádně jednoduchý. Stačí před prvek vsunout relaci úplnosti v podobě jednotkového operátoru:

$$| \mathbf{f} > \; = \; \hat{\mathbf{1}} | \mathbf{f} > \; = \; \sum_k | \, k >< k \, | \mathbf{f} > \; = \; \sum_k c_k \, | \, k > \quad , \qquad c_k \equiv < k \mid \mathbf{f} > \quad . \tag{E.33}$$

Koeficienty rozvoje jsou dány skalárním součinem rozvíjeného vektoru s prvkem báze.

◖ Příklad E10: Fourierova řada

Uvažujme prostor $\mathcal{L}^2(0, 2\pi)$ periodických funkcí integrovatelných s kvadrátem. Díky požadavku $f(0) = f(2\pi)$ tvoří v tomto prostoru úplnou bázi soustava funkcí (důkaz naleznete v základních učebnicích matematiky):

$$| \, f_k > = \mathrm{e}^{\mathrm{i} k x} \quad , \qquad k = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \quad . \tag{E.34}$$

Tyto funkce jsou sice navzájem kolmé, ale nejsou jednotkové:

$$< f_k \mid f_l > = \int_0^{2\pi} \mathrm{e}^{-\mathrm{i} k x} \mathrm{e}^{\mathrm{i} l x} \, \mathrm{d}x \; = \; \int_0^{2\pi} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(l-k)x} \, \mathrm{d}x \; = \; \begin{cases} 0 & \text{pro } l \neq k \\ 2\pi & \text{pro } l = k \end{cases} \; = \; 2\pi \, \delta_{k\,l} \, .$$

Nulovost skalárního součinu pro $l \neq k$ plyne z periodičnosti trigonometrických funkcí na intervalu <0, 2π>. Vydělíme-li prvky báze jejich velikostí, získáme ortonormální bázi

$$| \, k > = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \, \mathrm{e}^{\mathrm{i} k x} \quad , \qquad k = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \quad , \tag{E.35}$$

pro kterou platí relace ortonormality (E.29) a relace úplnosti (E.30). Rozvoj libovolné funkce z našeho prostoru je potom

$$| \mathbf{f} > \; = \; \sum_k c_k \, | \, k > , \qquad c_k \equiv < k \mid \mathbf{f} > , \tag{E.36}$$

neboli zapsáno v běžné symbolice

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_k c_k \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} , \qquad c_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \, f(x) \, \mathrm{d}x , \tag{E.37}$$

což jsou známé vztahy pro Fourierovu řadu. Nezapomeňte, že skalární součin je v levém argumentu komplexně sdružený, proto je v koeficientu c_k minus.

◗

Reprezentace

V dané bázi můžeme snadno přepsat operátorovou rovnici $\hat{\mathbf{A}} \,|\, \mathbf{f} > = |\, \mathbf{g} >$. Vložíme před vektor jednotkový operátor.

$$\hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{1}} \,|\, \mathbf{f} > = |\, \mathbf{g} > \qquad \Rightarrow$$

$$\sum_l \hat{\mathbf{A}} \,|\, l >< l \,|\, \mathbf{f} > = |\, \mathbf{g} > \qquad / < k \,| \quad \text{zleva} \quad \Rightarrow$$

$$\sum_l < k \,|\, \hat{\mathbf{A}} \,|\, l >< l \,|\, \mathbf{f} > = < k \,|\, \mathbf{g} > . \tag{E.38}$$

Získaný výraz není ale nic jiného než maticové násobení

$$\begin{pmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1n} & \cdots \\ \vdots & \ddots & & \\ A_{n1} & & A_{nn} & \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_n \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_1 \\ \vdots \\ g_n \\ \vdots \end{pmatrix}, \qquad \begin{aligned} &\hat{\mathbf{A}} \to A_{kl} \equiv < k \,|\, \hat{\mathbf{A}} \,|\, l > , \\ &|\, \mathbf{f} > \to f_n \equiv < n \,|\, \mathbf{f} > , \\ &|\, \mathbf{g} > \to g_n \equiv < n \,|\, \mathbf{g} > , \end{aligned}$$

neboli

$$\sum_l A_{kl} f_l = g_k \, . \tag{E.39}$$

Jestliže operátoru přiřadíme čtvercovou matici

$$\hat{\mathbf{A}} \to A_{kl} \equiv < k \,|\, \hat{\mathbf{A}} \,|\, l > \tag{E.40}$$

a vektoru sloupcovou matici

$$|\, \mathbf{f} > \to f_l \equiv < l \,|\, \mathbf{f} > , \tag{E.41}$$

můžeme s operátorovými výrazy zacházet jako s obyčejným násobením matic. Hovoříme o tom, že jsme zvolili *reprezentaci* daného prostoru. Ve skutečnosti nejde o nic jiného než o volbu konkrétní báze. Má-li báze nekonečný, ale spočetný počet členů, budou vektorům odpovídat posloupnosti a operátorům nekonečné matice. Vidíme, že v libovolném separabilním Hilbertově prostoru existuje jednoznačné zobrazení prvků na prostor posloupností l^2 (izomorfismus). V případě neseparabilních prostorů s nespočetnou bází získáme obdobnou relaci:

$$\int < x \,|\, \hat{\mathbf{A}} \,|\, y >< y \,|\, \mathbf{f} > \mathrm{d}y = < x \,|\, \mathbf{g} > , \tag{E.42}$$

což není nic jiného než integrální transformace

$$\int A(x,y)f(y)\,\mathrm{d}y = g(x)\,;$$
$$A(x,y) \equiv <x|\hat{\mathbf{A}}|y>, \qquad f(y) \equiv <y|\mathbf{f}>, \qquad g(x) \equiv <x|\mathbf{g}> \tag{E.43}$$

s jádrem $A(x, y)$. Veličiny x, y hrají úlohu spojitého indexu.

Přechod mezi bázemi

Máme-li k dispozici dvě sady bázových vektorů $\{|k>\}$ a $\{|k'>\}$, bude mezi koeficienty rozvojů platit jednoduchý vztah, který opět odvodíme jen vložením relace úplnosti:

$$f'_k \equiv <k'|\underset{\uparrow}{\mathbf{f}}> = \sum_k <k'|k><k|\mathbf{f}> = \sum_k S_{k'k} f_k\,, \qquad S_{k'k} \equiv <k'|k>. \tag{E.44}$$

Matice **S** se nazývá matice přechodu.

E5 Spektrální teorie

V teorii operátorů patří k základním úlohám nalézt směry, ve kterých se působení daného operátoru projevuje jako komplexní natahování:

$$\hat{\mathbf{A}}|\mathbf{f}> = \lambda|\mathbf{f}>; \qquad \lambda \in C\,. \tag{E.45}$$

Vektor $|\mathbf{f}>$ se nazývá *vlastním vektorem* (charakteristickým vektorem) operátoru $\hat{\mathbf{A}}$ a koeficient natahování λ *vlastním číslem* (charakteristickým číslem). Například u tenzoru setrvačnosti leží vlastní vektory ve směru os, ve kterých těleso při rotaci „nehází“. U lineárních operátorů je i každý násobek vlastního vektoru vlastním vektorem se stejným vlastním číslem. Jde tedy o celý paprsek v Hilbertově prostoru, neboli *vlastní směr*. Takových vlastních směrů a čísel může existovat u lineárních operátorů celá řada, jejich maximální počet je roven *dimenzi prostoru* (počtu prvků báze). U separabilních prostorů můžeme tedy úlohu nalezení vlastních čísel a vektorů formulovat rovnicemi:

$$\hat{\mathbf{A}}|\mathbf{f}_k> = \lambda_k|\mathbf{f}_k>; \qquad k = 1,2,\ldots; \quad \lambda_k \in C\,. \tag{E.46}$$

Množina všech vlastních čísel $\{\lambda_1, \ldots, \lambda_n, \ldots\}$ se nazývá *spektrum operátoru* $\hat{\mathbf{A}}$ Nalezneme-li spektrum operátoru a jeho vlastní vektory, můžeme relativně snadno řešit rovnice obsahující tento operátor. Pomocí vlastních čísel a vektorů lze například řešit soustavy obyčejných lineárních diferenciálních rovnic (viz kapitola 1.5).

Vlastní čísla a vektory hermitovského operátoru

Věta: Hermitovský operátor má reálná vlastní čísla a vlastní vektory dvou různých vlastních čísel jsou navzájem kolmé.

Důkaz: Při výpočtu skalárního součinu využijeme hermitovosti a působíme operátorem v pravé i v levé části skalárního součinu. Výsledek musí být stejný:

$$<\mathbf{f}_k|\hat{\mathbf{A}}\,\mathbf{f}_k> = \begin{cases} <\mathbf{f}_k|\lambda_k\,\mathbf{f}_k> = \lambda_k <\mathbf{f}_k|\mathbf{f}_k> \\ <\hat{\mathbf{A}}\,\mathbf{f}_k|\mathbf{f}_k> = \lambda^*_k <\mathbf{f}_k|\mathbf{f}_k> \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \lambda_k = \lambda_k^* \quad \Rightarrow \quad \lambda_k \in \mathcal{R}\,.$$

Vlastní čísla jsou tedy reálná. V druhé části budeme postupovat obdobně. Pro vlastní číslo z levé části skalárního součinu využijeme první části důkazu:

$$< \mathbf{f}_k \mid \hat{\mathbf{A}}\, \mathbf{f}_l > \; = \begin{cases} < \mathbf{f}_k \mid \lambda_l\, \mathbf{f}_l > = \lambda_l < \mathbf{f}_k \mid \mathbf{f}_l > \\ < \hat{\mathbf{A}}\, \mathbf{f}_k \mid \mathbf{f}_l > = \lambda_k^* < \mathbf{f}_k \mid \mathbf{f}_l > = \lambda_k < \mathbf{f}_k \mid \mathbf{f}_l > \end{cases}$$

$$\Downarrow$$

$$\lambda_l < \mathbf{f}_k \mid \mathbf{f}_l > = \lambda_k < \mathbf{f}_k \mid \mathbf{f}_l >,$$

$$\Downarrow$$

$$(\lambda_l - \lambda_k) < \mathbf{f}_k \mid \mathbf{f}_l > = 0,$$

$$\Downarrow$$

$$< \mathbf{f}_k \mid \mathbf{f}_l > = 0 \text{ pro } \lambda_k \neq \lambda_l .$$

Vlastní čísla a vektory unitárního operátoru

Věta: Vlastní čísla unitárního operátoru leží na komplexní jednotkové kružnici a vlastní vektory dvou různých vlastních čísel jsou navzájem kolmé.

Důkaz: Při důkazu vyjdeme z definice unitárního operátoru:

$$< \mathbf{f}_k \mid \mathbf{f}_k > = < \hat{\mathbf{U}}\, \mathbf{f}_k \mid \hat{\mathbf{U}}\, \mathbf{f}_k > = \lambda_k^* \lambda_k < \mathbf{f}_k \mid \mathbf{f}_k > .$$

Porovnáním prvního a posledního výrazu je zřejmé, že

$$\lambda_k \lambda_k^* = 1 \qquad \Rightarrow \qquad |\lambda_k| = 1.$$

Zbývá dokázat kolmost vektorů. K tomu budeme potřebovat pomocnou větu: (lemma),

Lemma: pokud existuje inverzní operátor k $\hat{\mathbf{A}}$, má vlastní čísla $1/\lambda_k$.:
Nechť platí

$$\hat{\mathbf{A}}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \qquad \Rightarrow \qquad \hat{\mathbf{A}}^{-1}\hat{\mathbf{A}}|\psi\rangle = \lambda\lambda^{(-1)}|\psi\rangle \qquad \Rightarrow \qquad |\psi\rangle = \lambda\lambda^{(-1)}|\psi\rangle$$

a tedy

$$\lambda^{(-1)} = \frac{1}{\lambda}.$$

◗

Nyní již budeme postupovat analogicky jako v případě hermitovského operátoru. V levé části skalárního součinu využijeme opět první části důkazu:

$$< \mathbf{f}_k \mid \hat{\mathbf{U}}\, \mathbf{f}_l > \; = \begin{cases} < \mathbf{f}_k \mid \lambda_l\, \mathbf{f}_l > = \lambda_l < \mathbf{f}_k \mid \mathbf{f}_l > \\ < \hat{\mathbf{U}}^{-1}\, \mathbf{f}_k \mid \mathbf{f}_l > = \dfrac{1}{\lambda_k^*} < \mathbf{f}_k \mid \mathbf{f}_l > = \lambda_k < \mathbf{f}_k \mid \mathbf{f}_l > \end{cases}$$

$$\Downarrow$$

$$\lambda_l < \mathbf{f}_k \mid \mathbf{f}_l > = \lambda_k < \mathbf{f}_k \mid \mathbf{f}_l >,$$

$$\Downarrow$$

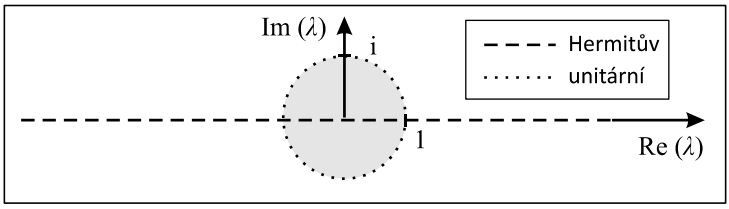
$$(\lambda_l - \lambda_k) < \mathbf{f}_k \,|\, \mathbf{f}_l > = 0\,,$$

$$\Downarrow$$

$$< \mathbf{f}_k \,|\, \mathbf{f}_l > = 0 \quad \text{pro } \lambda_k \neq \lambda_l\,.$$

Poznámka 1: Reálné vlastní hodnoty hermitovských operátorů budou v kvantové teorii využity jako možné výsledky měření dynamické proměnné, které odpovídá operátor $\hat{\mathbf{A}}$. Ani kolmost vlastních vektorů není bez užitku. Vhodný hermitovský operátor nám může v podobě svých vlastních vektorů „porodit“ výhodnou ortonormální bázi v Hilbertově prostoru.

Poznámka 2: Unitární operátory se v kvantové teorii využívají k popisu časového vývoje stavu objektu.



Obr. E4: Polohy vlastních čísel hermitovského a unitárního operátoru.

◖ Příklad E11: vlastní čísla a vektory

Určeme vlastní čísla a vektory matice $\hat{\mathbf{A}}$ z příkladu E4:

$$\hat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}.$$

Pro tuto matici sestavíme problém vlastních čísel a vlastních hodnot:

$$\hat{\mathbf{A}} \,|\, \mathbf{f} > = \lambda \,|\, \mathbf{f} >$$

$$\Downarrow$$

$$\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix}$$

$$\Downarrow$$

$$\begin{pmatrix} -\lambda & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & -\lambda \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Rovnice má netriviální řešení jen pokud je determinant roven nule. Z této podmínky plynou dvě možné hodnoty vlastního čísla λ. Pro každou z nich potom již snadno určíme příslušný vlastní vektor. Pozor! Podmínka na determinant činí rovnice pro složky vlastního vektoru závislé. To je ale v pořádku, řešení rovnic musí mít jeden volný parametr, tak aby představovalo celý paprsek v prostoru. K vlastním vektorům můžeme najít normované vlastní vektory a příslušné projekční operátory. Výsledek je:

$$\lambda_1 = -1\,, \qquad |\,\mathbf{f}_1 > = c\begin{pmatrix} +\mathrm{i} \\ +1 \end{pmatrix}, \qquad |\,1> = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} +\mathrm{i} \\ +1 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\mathbf{P}}_1 = |\,1><1\,| \;=\; \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & +\mathrm{i} \\ -\mathrm{i} & 1 \end{pmatrix},$$

$$\lambda_2 = +1\,, \qquad |\,\mathbf{f}_2 > = c\begin{pmatrix} -\mathrm{i} \\ +1 \end{pmatrix}, \qquad |\,2> = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -\mathrm{i} \\ +1 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\mathbf{P}}_2 = |\,2><2\,| = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -\mathrm{i} \\ +\mathrm{i} & 1 \end{pmatrix}.$$

Povšimněte si, že matice $\mathbf{A}$ byla hermitovská (matice překlopená kolem diagonály a komplexně sdružená je shodná s původní maticí). Proto má reálná vlastní čísla a vlastní vektory tvoří ortonormální soustavu:

$$<1\,|\,1> = <2|2> = 1\,, \qquad <1\,|\,2> = <2|1> = 0\,.$$

Tato soustava vektorů je úplná, tvoří bázi v prostoru komplexních dvojic:

$$|\,1><1\,| + |\,2><2\,| = \hat{\mathbf{P}}_1 + \hat{\mathbf{P}}_2 = \hat{\mathbf{1}}\,.$$

◗

Věta o spektrálním rozvoji

Věta: Nechť $\hat{\mathbf{A}}$ je lineární operátor s množinou vlastních vektorů, která tvoří úplnou ortonormální bázi v Hilbertově prostoru. Potom můžeme pro analytickou funkci operátoru definovanou Taylorovým rozvojem (E.14) psát

► $$f(\hat{\mathbf{A}}) \;=\; \sum_k f(\lambda_k)\,|\,k><k\,| \;=\; \sum_k f(\lambda_k)\hat{\mathbf{P}}_k\,. \qquad \text{(E.47)}$$

Důkaz: Nejprve si povšimněme působení mocnin operátoru na vlastní vektory:

$$\hat{\mathbf{A}}\,|\,\mathbf{f}_k > = \lambda_k |\mathbf{f}_k >\,,$$

$$\hat{\mathbf{A}}^2\,|\,\mathbf{f}_k > = \lambda_k \hat{\mathbf{A}}|\mathbf{f}_k > = \lambda_k^2 |\mathbf{f}_k >\,,$$

$$\vdots$$

$$\hat{\mathbf{A}}^n\,|\,\mathbf{f}_k > = \lambda_k^n |\mathbf{f}_k >\,,$$

$$\Downarrow$$

$$f(\hat{\mathbf{A}})\,|\,\mathbf{f}_k > = \sum_n c_n \hat{\mathbf{A}}^n\,|\,\mathbf{f}_k > \;=\; \sum_n c_n \lambda_k^n\,|\,\mathbf{f}_k > \;=\; f(\lambda_k)\,|\,\mathbf{f}_k >\,.$$

V další fázi důkazu budeme funkcí operátoru působit již na obecný vektor. Provedeme ale jeho rozklad do báze složené z vlastních vektorů, kde působení známe z poslední rovnosti (v místě šipky vložíme součet všech projektorů):

$$f(\hat{\mathbf{A}})\,|\,\mathbf{f} > \;=\; \sum_k f(\hat{\mathbf{A}})\,|\,k><k\,|\,\mathbf{f} > \;=\; \sum_k f(\lambda_k)\,|\,k><k\,|\,\mathbf{f} > \quad .$$
$$\uparrow$$

To je ale přesně rovnost, kterou jsme chtěli dokázat. Vynecháme-li ve výrazech libovolný vektor $|\,\mathbf{f}>$, na který operátory působí, dostáváme větu o spektrálním rozvoji.

Poznámka 1: Má-li operátor vícenásobné vlastní číslo stupně N, není to na závadu. Vlastní vektory k vícenásobnému vlastnímu číslu tvoří celý podprostor $\mathcal{P}$ dimenze N a lze zvolit N nezávislých kolmých vlastních vektorů odpovídajících tomuto vícenásobnému číslu.

Poznámka 2: Je-li prostor neseparabilní, bude za některých dalších předpokladů možné větu o spektrálním rozvoji modifikovat do tvaru:

$$f(\hat{\mathbf{A}}) = \int f(\lambda_x) |\, x \!><\! x \,| \, \mathrm{d}x \,.$$

Poznámka 3: Pro vyjádření funkce operátoru je často mnohem jednodušší použít místo Taylorova rozvoje větu o spektrálním rozvoji. Příslušná řada probíhá jen přes vlastní čísla operátoru.

Poznámka 4: Známe-li spektrum operátoru a jeho vlastní vektory, můžeme snadno napsat jeho libovolnou funkci a řešit tak rovnice, ve kterých se tato funkce operátoru vyskytuje. Speciálně inverzní operátor je dán formulí

$$\hat{\mathbf{A}}^{-1} = \sum_k \frac{1}{\lambda_k} |\, k \!><\! k \,| = \sum_k \frac{1}{\lambda_k} \hat{\mathbf{P}}_k \,.$$

Vidíme, že pro jeho existenci je kromě předpokladů věty nutná nenulovost všech vlastních čísel.

◖ Příklad E12: nalezení exponenciály matice

Na prostoru $\mathcal{C}^2$ je zadán maticový operátor

$$\hat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}.$$

Máme nalézt matici exp ($\hat{\mathbf{A}}$) Tento příklad jsme již řešili pomocí Taylorova rozvoje jako příklad E4. Z příkladu E11 známe vlastní čísla, vektory i projekční operátory tohoto maticového operátoru. Z věty o spektrálním rozvoji můžeme proto napsat:

$$\mathrm{e}^{\hat{\mathbf{A}}} = \mathrm{e}^{\lambda_1} \hat{\mathbf{P}}_1 + \mathrm{e}^{\lambda_2} \hat{\mathbf{P}}_2 = \mathrm{e}^{-1} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & +\mathrm{i} \\ -\mathrm{i} & 1 \end{pmatrix} + \mathrm{e}^{+1} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -\mathrm{i} \\ +\mathrm{i} & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh 1 & -\mathrm{i} \sinh 1 \\ \mathrm{i} \sinh 1 & \cosh 1 \end{pmatrix}.$$

Na rozdíl od Taylorova rozvoje má řada nyní jen dva členy.

◗

◖ Příklad E13: řešení rovnice teplotní difúze

Nalezněme časový vývoj průběhu teploty tyče délky L, jejíž oba konce jsou udržovány na nulové teplotě. Počáteční teplota tyče je dána funkcí $T_0(x)$. Úkolem je tedy najít řešení rovnice teplotní difúze

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad , \qquad T = T(t, x)$$

s počátečními a okrajovými podmínkami

$$T(t_0, x) = T_0(x)\,, \qquad T(t, 0) = T(t, L) = 0\,.$$

Přeformulujme nyní úlohu do Diracovy symboliky. Zaveďme nejprve Hilbertův prostor

$$\mathcal{H} = \left\{ f(x): \quad f \in L^2(0, L) \quad \wedge \quad f(0) = f(L) = 0 \right\}.$$

Jde o prostor funkcí definovaných na intervalu <0, *L*>, periodických a integrovatelných s kvadrátem. Okrajová podmínka původní rovnice je přesunuta do definice prostoru. Jestliže by hodnota teploty tyče na obou koncích byla nenulová, můžeme posunout počátek teplotní stupnice. Vzhledem k derivacím v rovnici teplotní difúze to na tvar rovnice nemá vliv. Požadavek nulové teploty na obou koncích tyče tedy není na újmu obecnosti řešení. Úloha má nyní tvar:

$$\frac{\mathrm{d}\,|\,T>}{\mathrm{d}\,t} = -\kappa\,\hat{\mathbf{A}}\,|\,T>\,, \qquad |\,T> \in \mathcal{H}\,, \qquad \hat{\mathbf{A}} \equiv -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}. \tag{E.48}$$

Z příkladu E8 víme, že operátor $\hat{\mathbf{B}} = \mathrm{i}\,\mathrm{d}/\mathrm{d}x$ je hermitovský (má reálná vlastní čísla a kolmou soustavu vlastních vektorů). Proto i kvadrát tohoto operátoru $\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{B}}^2$ je hermitovský. Znaménko minus zde není podstatné, jen zajistí nezáporná vlastní čísla operátoru $\hat{\mathbf{A}}$. Řešení úlohy můžeme formálně napsat okamžitě (!):

$$|\,T(t)> = \mathrm{e}^{-\kappa\,\hat{\mathbf{A}}\,(t-t_0)}\,|\,T(t_0)>\,. \tag{E.49}$$

Skutečně: dosadíme-li počáteční čas, dá řešení počáteční podmínku. Derivujeme-li řešení podle času, zjistíme, že řešení (E.49) splňuje výchozí rovnici (E.48):

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,|\,T(t)> = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,\mathrm{e}^{-\kappa\,\hat{\mathbf{A}}\,(t-t_0)}\,|\,T(t_0)> = -\kappa\,\hat{\mathbf{A}}\,\mathrm{e}^{-\kappa\,\hat{\mathbf{A}}\,(t-t_0)}\,|\,T(t_0)> = -\kappa\,\hat{\mathbf{A}}\,|\,T(t)>\,.$$

Jediný problém je, že v nalezeném řešení (E.49) vystupuje funkce operátoru $\hat{\mathbf{A}}$. Abychom ji mohli určit, musíme znát spektrum a vlastní vektory operátoru $\hat{\mathbf{A}}$ na prostoru $\mathcal{H}$. Řešme tedy nejprve úlohu

$$\begin{aligned} &\hat{\mathbf{A}}\,|\,f> = \lambda\,|\,f>\,, \qquad |\,f> \in \mathcal{H} \qquad \Rightarrow \\ &f'' + \lambda\,f = 0\,, \qquad\quad f(0) = f(L) = 0\,. \end{aligned}$$

Řešení této obyčejné lineární diferenciální rovnice s okrajovými podmínkami je:

$$\lambda_k = \frac{\pi^2 k^2}{L^2}\,, \qquad |\,f_k> = c\sin\left(\frac{k\pi}{L}x\right), \qquad |\,k> = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{k\pi}{L}x\right), \qquad k = 1, 2, \ldots.$$

Vlastní čísla jsou reálná ($\hat{\mathbf{A}}$ je hermitovský operátor), vlastní vektory jsou navzájem kolmé a tvoří přirozenou bázi v $\mathcal{H}$. Napsat řešení (E.49) je nyní již jen jednoduchou aplikací věty o spektrálním rozvoji:

$$|\,T(t)> = \mathrm{e}^{-\kappa\,\hat{\mathbf{A}}\,(t-t_0)}\,|\,T(t_0)> =$$

$$= \sum_{k=1}^{\infty} \mathrm{e}^{-\lambda_k\,\kappa\,(t-t_0)}\,|\,k><k\,|\,T(t_0)> =$$

$$= \sum_{k=1}^{\infty} c_k \, \mathrm{e}^{-\frac{\pi^2 k^2 \kappa}{L^2}(t-t_0)} \, |k>;$$

$$|k> \equiv \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{k\pi}{L}x\right), \qquad c_k \equiv <k \,|\, T(t_0)>.$$

Řešení můžeme samozřejmě zapsat i standardně, bez použití Diracovy symboliky:

$$T(t,x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{k=1}^{\infty} c_k \, \mathrm{e}^{-\frac{\pi^2 k^2 \kappa}{L^2}(t-t_0)} \sin\left(\frac{k\pi}{L}x\right);$$
$$c_k \equiv \sqrt{\frac{2}{L}} \int_0^L \sin\left(\frac{k\pi}{L}x\right) T_0(x)\, dx\,. \tag{E.50}$$

Pro $t = t_0$ máme Fourierovu řadu pro počáteční podmínku. Pro $t \neq t_0$ nejde o nic jiného než o rozvoj do jednotlivých Fourierových modů. Každá Fourierova komponenta ubývá exponenciálně s časem. Vidíme, že věta o spektrálním rozvoji nám může být užitečná i při řešení parciálních diferenciálních rovnic.

◗



Dodatek F – Pfaffovy diferenciální formy

Určitě si vzpomínáte na pojem malého přírůstku funkce více proměnných, neboli diferenciálu (viz dodatek A). Například k funkci

$$f(x,y) = x^2 + y^2 \tag{F.1}$$

je prvním diferenciálem výraz

$$\mathrm{d}f = 2x\,\mathrm{d}x + 2y\,\mathrm{d}y\,. \tag{F.2}$$

Zkusme nyní úlohu obrátit. Představme si, že napíšeme podobný výraz jako je na pravé straně rovnice (F.2) a budeme se ptát, zda existuje funkce, ke které by výraz byl prvním diferenciálem. Například

$$\mathrm{d}\omega_1 = 2x\,\mathrm{d}x + 2y\,\mathrm{d}y\,, \tag{F.3}$$

$$\mathrm{d}\omega_2 = 2y\,\mathrm{d}x + xy\,\mathrm{d}y\,. \tag{F.4}$$

K prvnímu výrazu taková funkce existuje, jde o funkci (F.1), zatímco k druhému výrazu takovou funkci nikdy nenajdeme. Obecně výrazy tohoto typu nazýváme Pfaffovy diferenciální formy a zapisujeme je ve tvaru

$$\mathrm{d}\omega = a_1(x_1,\ldots,x_N)\,\mathrm{d}x_1 + \cdots + a_N(x_1,\ldots,x_N)\,\mathrm{d}x_N \tag{F.5}$$

nebo, použijeme-li úspornější sumační konvenci, má zápis jednodušší tvar

► $$\mathrm{d}\omega = a_k(\mathbf{x})\,\mathrm{d}x_k\,. \tag{F.6}$$

Položená otázka tedy je: kdy je Pfaffova forma ve tvaru úplného diferenciálu nějaké funkce? Odpověď je velmi zajímavá. Všechny diferenciální formy se dělí na dvě veliké skupiny. První z nich není ve tvaru úplného diferenciálu nějaké funkce a tento typ nemá žádné „hezké“ vlastnosti. Druhý typ je ve tvaru úplného diferenciálu nějaké funkce, má mnoho velmi elegantních vlastností a velmi snadno se s ním pracuje. Proto matematici i fyzici vždy dávají přednost diferenciálním formám, které jsou ve tvaru úplného diferenciálu. Zformulujme nyní tzv. *větu o pěti ekvivalencích*:

F1 Věta o pěti ekvivalencích

Nechť má diferenciální forma $\mathrm{d}\omega = a_k\mathrm{d}x_k$ koeficienty, které mají spojité derivace do druhého řádu včetně. Potom jsou následující tvrzení ekvivalentní:

1) Existuje funkce $f(x_1,\ldots,x_N)$ taková, že forma je jejím prvním diferenciálem, tj. koeficienty formy jsou parciálními derivacemi této funkce:

$$a_k = \frac{\partial f}{\partial x_k}\,. \tag{F.7}$$

2) Existuje funkce ϕ taková, že křivkový integrál mezi dvěma body je jen rozdílem koncové a počáteční hodnoty této funkce (nazýváme ji potenciálem diferenciální formy):

$$\int_A^B a_k \mathrm{d}x_k = \phi(B) - \phi(A) . \tag{F.8}$$

3) Křivkový integrál mezi dvěma body nezávisí na křivce (cestě integrace):

$$\int_\gamma a_k \mathrm{d}x_k \quad \text{nezávisí na křivce } \gamma . \tag{F.9}$$

4) Křivkový integrál po jakékoli uzavřené křivce z diferenciální formy je nulový:

$$\oint a_k \mathrm{d}x_k = 0 . \tag{F.10}$$

5) Koeficienty formy splňují relace:

$$\frac{\partial a_k}{\partial x_l} = \frac{\partial a_l}{\partial x_k} \quad \text{pro } \forall\, k,l. \tag{F.11}$$

Poznámka 1: Máme-li diferenciální formu, buď pro ni platí všechny vlastnosti vyjmenované ve větě o pěti ekvivalencích nebo žádná z nich. Neexistuje nic mezitím. Proto se diferenciální formy dělí na dvě disjunktní skupiny.

Poznámka 2: V důkazu věty by stačilo dokázat jen jednotlivé implikace „kruhem“ $1 \Rightarrow 2 \Rightarrow \cdots \Rightarrow 5$. Tím je možné se od každého tvrzení dobrat ke kterémukoli dalšímu. Celý důkaz zde provádět nebudeme, omezíme se jen na některé části.

Poznámka 3: Páté tvrzení je vlastně návodem jak poznat „správné“ diferenciální formy, tj. formy ve tvaru úplného diferenciálu. Ověříme-li, že platí vlastnost 5), platí už i všechny vlastnosti ostatní.

Poznámka 4: Ve fyzice bychom řekli, že koeficienty a_k diferenciální formy tvoří konzervativní pole, například pole gravitační. Křivkový integrál z gravitační síly má význam vykonané mechanické práce. Ta nezávisí na cestě mezi dvěma body, po uzavřené křivce je nulová, existuje potenciální energie a vykonaná práce je rozdílem potenciální energie v koncovém a počátečním bodě. I poslední podmínka je snadno interpretovatelná. Převedeme-li oba členy na levou stranu, dostaneme

$$\frac{\partial a_k}{\partial x_l} - \frac{\partial a_l}{\partial x_k} = 0 \quad \text{pro } \forall\, k,l . \qquad \blacktriangleright$$

Nejde o nic jiného, než o podmínku, že rotace pole je nulová a jde tedy z hlediska matematiky o nevírové pole.

Naznačme nyní důkaz některých implikací věty o pěti ekvivalencích:

Implikace $1 \Rightarrow 2$

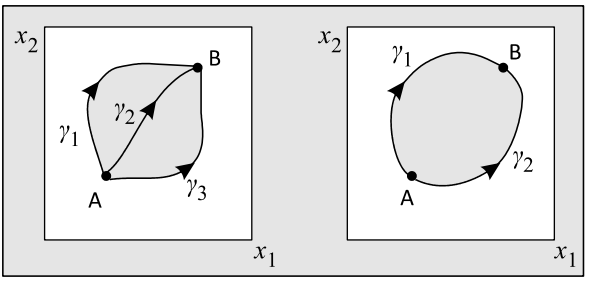
Zkusme najít ve fázovém prostoru $(x_1, \ldots, x_N)$ integrál z diferenciální formy ve tvaru úplného diferenciálu mezi dvěma body A a B:

$$\int_A^B \mathrm{d}\,\omega = \int_A^B a_k \,\mathrm{d}x_k \overset{(1)}{=} \int_A^B \frac{\partial f}{\partial x_k} \mathrm{d}x_k = \int_A^B \mathrm{d}\,f = f(B) - f(A) .$$

Je-li diferenciální forma ve tvaru úplného diferenciálu, potom jsou koeficienty dány parciálními derivacemi funkce *f* a výsledný integrál je pouze rozdílem hodnot funkce *f* v počátečním a koncovém bodě. Hledaným potenciálem diferenciální formy je tak sama funkce *f*.

Implikace 2 ⇒ 3

Záleží-li hodnota integrálu jen na koncové a počáteční hodnotě funkce *f*, nezávisí potom na integrační křivce. Je zcela lhostejné, zda integrujeme po křivce γ_1, γ_2 nebo γ_3 na obrázku F1.



Obr. F1: Integrační cesty.

Implikace 3 ⇒ 4

Uzavřenou křivku v pravé části obrázku si představíme jako součet dvou jednotlivých křivek. Musíme ale dávat pozor na orientaci křivky, která mění znaménko křivkového integrálu:

$$\oint \mathrm{d}\omega = \int_{\gamma_1} \mathrm{d}\omega + \int_{-\gamma_2} \mathrm{d}\omega = \int_{\gamma_1} \mathrm{d}\omega - \int_{\gamma_2} \mathrm{d}\omega \overset{(3)}{=} 0 .$$

Implikace 1 ⇒ 5:

Důkaz je velmi jednoduchý a je založen na záměnnosti druhých derivací funkce *f*:

$$\frac{\partial a_k}{\partial x_l} \overset{(1)}{=} \frac{\partial}{\partial x_l}\left(\frac{\partial f}{\partial x_k}\right) = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\frac{\partial f}{\partial x_l}\right) = \frac{\partial a_l}{\partial x_k} .$$

◖ Příklad F1: diferenciální forma 1

Zjistěte, zda je forma $\mathrm{d}\omega$ ve tvaru úplného diferenciálu:

$$\mathrm{d}\omega = 2xy\,\mathrm{d}x + x^2\mathrm{d}y .$$

Z vlastnosti (F.11) věty o pěti ekvivalencích nalezneme „křížové“ derivace

$$a_x = 2xy ; \qquad a_y = x^2 \qquad \Rightarrow \qquad \frac{\partial a_x}{\partial y} = 2x ; \qquad \frac{\partial a_y}{\partial x} = 2x .$$

Obě derivace jsou si rovné a diferenciální forma je proto ve tvaru úplného diferenciálu. Snadno ověříte, že jde o úplný diferenciál funkce

$$f(x,y) = x^2 y\ .$$

◗

◖ **Příklad F2: diferenciální forma 2**

Zjistěte, zda je forma $\mathrm{d}\omega$ ve tvaru úplného diferenciálu:

$$\mathrm{d}\omega = \frac{x}{y}\mathrm{d}x + \mathrm{d}y\ .$$

Pro „křížové“ derivace máme:

$$a_x = \frac{x}{y}; \qquad a_y = 1 \qquad \Rightarrow \qquad \frac{\partial a_x}{\partial y} = -\frac{x}{y^2}; \qquad \frac{\partial a_y}{\partial x} = 0\ .$$

Derivace si rovny nejsou, a proto diferenciální forma není ve tvaru úplného diferenciálu a neexistuje funkce *f* taková, že by forma byla jejím prvním diferenciálem.

◗

Ne všechny diferenciální formy, které nejsou ve „správném“ tvaru je však třeba zatratit. Některé z nich lze snadno „napravit“. Formu z příkladu F2 lze upravit tak, že ji vynásobíme funkcí *y*:

$$\mathrm{d}\sigma = y\,\mathrm{d}\omega = y\left(\frac{x}{y}\mathrm{d}x + \mathrm{d}y\right) = x\,\mathrm{d}x + y\,\mathrm{d}y\ .$$

Nová diferenciální forma zjevně má potenciál a je diferenciálem funkce $(x^2 + y^2)/2$. Zjistíme-li, že diferenciální forma není ve tvaru úplného diferenciálu, můžeme se pokusit najít tzv. integrační faktor μ, aby nová forma

$$\mathrm{d}\sigma = \mu(x_1,\ldots,x_N)\,\mathrm{d}\omega \tag{F.12}$$

již byla ve tvaru úplného diferenciálu. To se ale bohužel ne vždy musí podařit, zejména u diferenciálních forem mnoha proměnných je hledání integračního faktoru mimořádně obtížné. Pro diferenciální formy s počtem proměnných do tří ale existuje integrační faktor vždy, jak plyne z následující věty.

F2 Věta o existenci integračního faktoru

Věta: Pro $n \le 3$ existuje vždy integrační faktor Pfaffovy diferenciální formy.

Důkaz: Zkoumejme, zda je nová forma $\mathrm{d}\sigma = \mu(x_1, \ldots, x_N)\,a_k(x_1, \ldots, x_N)\,\mathrm{d}x_k$ ve tvaru úplného diferenciálu. Hledáme tedy funkci *f*, jíž je nová forma úplným diferenciálem, tj.

$$\frac{\partial f}{\partial x_k} = \mu\, a_k\ .$$

To bude možné tehdy, když si budou rovné křížové derivace koeficientů:

$$\frac{\partial \mu a_k}{\partial x_l} = \frac{\partial \mu a_l}{\partial x_k} \quad \text{pro } \forall\, k,l.$$

Z těchto rovnic je třeba určit integrační faktor. Aby byla úloha řešitelná, nemůže být jejich celkový počet větší než dimenze fázového prostoru N:

$$\binom{N}{2} \leq N \qquad \Rightarrow \qquad \frac{N(N-1)}{2} \leq N \qquad \Rightarrow \qquad N \leq 3\,.$$

Pro diferenciální formy s více než třemi proměnnými nemáme obecně existenci integračního faktoru žádným způsobem zaručenu. Existují i sofistikovanější věty, které za určitých podmínek umožňují existenci integračního faktoru ve více dimenzích (například Caratheodóryho princip), ale ty jdou nad rámec této učebnice.



Dodatek G – Některé integrály a řady

Ve vztazích je označeno $n!=n(n-1)\ldots1$; $n!!=n(n-2)(n-4)\ldots1$.

$$\int_0^\infty x^n\,\mathrm{e}^{-ax}\,\mathrm{d}x=\frac{n!}{a^{n+1}};\quad a>0;\quad n=1,2,\ldots \tag{G.1}$$

$$\int_0^\infty x^{2n}\,\mathrm{e}^{-ax^2}\,\mathrm{d}x=\frac{(2n-1)!!\sqrt{\pi}}{2^{n+1}\,a^{(2n+1)/2}};\quad a>0;\quad n=1,2,\ldots \tag{G.2}$$

$$\int_0^\infty x^{2n+1}\,\mathrm{e}^{-ax^2}\,\mathrm{d}x=\frac{n!}{2a^{n+1}};\quad a>0;\quad n=0,1,2,\ldots \tag{G.3}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-ax^2}\,\mathrm{d}x=\sqrt{\frac{\pi}{a}};\qquad a>0\qquad\text{(Gaussův integrál)} \tag{G.4}$$

$$\int_0^\infty \mathrm{e}^{-ax^2}\,\mathrm{d}x=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}};\qquad a>0 \tag{G.5}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-ax^2+bx}\,\mathrm{d}x=\sqrt{\frac{\pi}{a}}\;\mathrm{e}^{b^2/4a};\qquad a>0 \tag{G.6}$$

$$\int\frac{1}{\sqrt{a^2-x^2}}\,\mathrm{d}x=-\arccos\left(\frac{x}{a}\right) \tag{G.7}$$

$$\int\frac{1}{\sqrt{a^2+x^2}}\,\mathrm{d}x=\operatorname{argsinh}\left(\frac{x}{a}\right) \tag{G.8}$$

$$\int\frac{x}{\sqrt{a^2+x^2}}\,\mathrm{d}x=\sqrt{a^2+x^2} \tag{G.9}$$

$$\int_0^\infty\frac{x^3}{\mathrm{e}^x+1}\,\mathrm{d}x\cong5,6822;\qquad\int_0^\infty\frac{x^3}{\mathrm{e}^x-1}\,\mathrm{d}x=\frac{\pi^4}{15} \tag{G.10}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}q^n=\frac{1}{1-q};\ |\,q\,|<1\quad\text{(součet geometrické řady)} \tag{G.11}$$

$$V_{2N}=\pi^N R^{2N}/N!\qquad\text{(objem koule v sudém počtu dimenzí)} \tag{G.12}$$

G1 Výpočet Gaussova integrálu

Gaussův integrál lze snadno určit za pomoci jednoduchého triku, při kterém tento integrál převedeme na integrál přes nekonečnou rovinu v polárních souřadnicích. Jednotlivé kroky jsou přímočaré, proto je nebudeme komentovat:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\alpha x^2}\,\mathrm{d}x = \sqrt{\left(\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\alpha x^2}\,\mathrm{d}x\right)\left(\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\alpha x^2}\,\mathrm{d}x\right)} =$$

$$= \sqrt{\left(\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\alpha x^2}\,\mathrm{d}x\right)\left(\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\alpha y^2}\,\mathrm{d}y\right)} = \sqrt{\iint_{\mathcal{R}\times\mathcal{R}} \mathrm{e}^{-\alpha(x^2+y^2)}\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y} =$$

$$= \sqrt{\int_0^{\infty}\int_0^{2\pi} \mathrm{e}^{-\alpha r^2}\, r\,\mathrm{d}\varphi\mathrm{d}r} = \sqrt{2\pi\int_0^{\infty} \mathrm{e}^{-\alpha r^2}\, r\,\mathrm{d}r}$$

Poslední integrál snadno vypočteme za pomoci substituce $\xi = \alpha r^2$, výsledek je

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\alpha x^2}\,\mathrm{d}x = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}\,. \tag{G.13}$$

Výsledek snadno upravíme na integraci (G.5) pouze od nuly do nekonečna. Opakovaným derivováním vztahu (G.5) podle parametru a získáme vztahy (G.2) pro sudé mocniny. U lichých mocnin je postup stejný. Snadno vypočteme integrál (G.3) pro $n = 0$. Vyšší mocniny získáme opět derivováním podle parametru a.

G2 Výpočet integrálu ve Stefanově-Boltzmannově zákoně

Hledaný integrál nejprve upravíme do tvaru:

$$\int_0^{\infty} \frac{x^3}{\mathrm{e}^x - 1}\,\mathrm{d}x = \int_0^{\infty} x^3\,\mathrm{e}^{-x}\left(\frac{1}{1-\mathrm{e}^{-x}}\right)\mathrm{d}x\,.$$

Výraz v kulaté závorce lze interpretovat jako součet geometrické řady s kvocientem $q = \mathrm{e}^{-x}$, tj.

$$\int_0^{\infty} \frac{x^3}{\mathrm{e}^x - 1}\,\mathrm{d}x = \int_0^{\infty}\left(x^3\,\mathrm{e}^{-x}\sum_{n=0}^{\infty}\mathrm{e}^{-nx}\right)\mathrm{d}x = \int_0^{\infty}\left(x^3\sum_{n=0}^{\infty}\mathrm{e}^{-(n+1)x}\right)\mathrm{d}x =$$

$$= \int_0^{\infty}\left(x^3\sum_{n=1}^{\infty}\mathrm{e}^{-nx}\right)\mathrm{d}x = \sum_{n=1}^{\infty}\int_0^{\infty} x^3\,\mathrm{e}^{-nx}\,\mathrm{d}x\,.$$

Poslední integrál je snadno řešitelný. Třikrát po sobě provedeme integraci per partes, čímž budeme postupně snižovat mocninu x, a nakonec provedeme jednoduchou integraci exponenciály. Výsledek je

$$\int_0^\infty \frac{x^3}{\mathrm{e}^x - 1}\,\mathrm{d}x = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{6}{n^4}\,. \tag{G.14}$$

Zbývá určit součet Riemannovy řady na pravé straně rovnosti. Nejprve určíme součet jednodušší řady s druhými mocninami, teprve poté řady se čtvrtými mocninami. Nalezneme tedy postupně součty

$$S_2 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2}\,; \qquad S_4 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4}\,. \tag{G.15}$$

Oba součty snadno určíme z Fourierových řad funkcí x^2 a x^4 na intervalu $<-\pi, +\pi>$:

$$\begin{aligned} x^2 &= \frac{\pi^2}{3} + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{4}{n^2} \cos(nx)\,; \\ x^4 &= \frac{\pi^4}{5} + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \left(\frac{8\pi^2}{n^2} - \frac{48}{n^4} \right) \cos(nx)\,. \end{aligned} \tag{G.16}$$

Po dosazení za $x = \pi$ dostaneme z prvního rozvoje hodnotu S_2 a z druhého hodnotu S_4 (při výpočtu budeme potřebovat hodnotu S_2):

$$S_2 = \frac{\pi^2}{6}; \qquad S_4 = \frac{\pi^4}{90}. \tag{G.17}$$

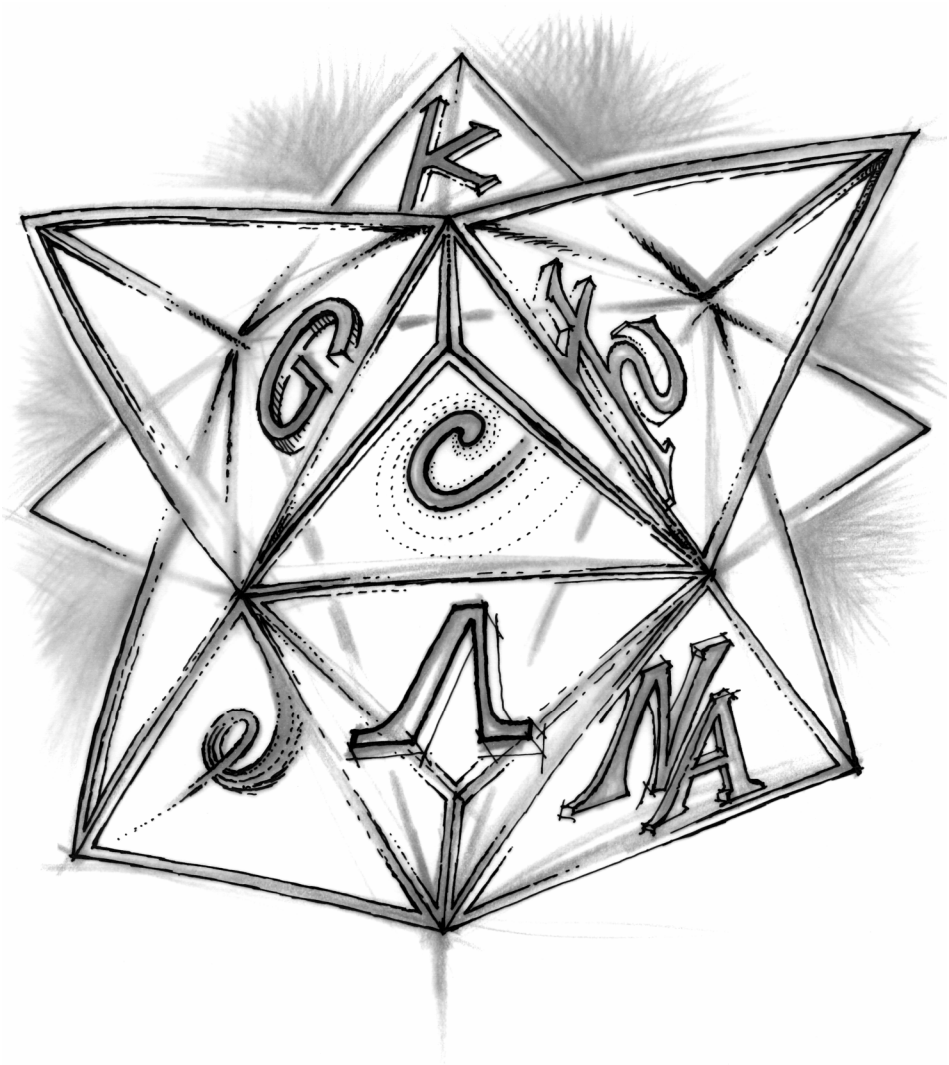
Pro hledaný integrál tedy platí:

$$\int_0^\infty \frac{x^3}{\mathrm{e}^x - 1}\,\mathrm{d}x = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{6}{n^4} = 6\,S_4 = 6\,\frac{\pi^4}{90} = \frac{\pi^4}{15}\,.$$

Výsledkem integrace je

$$\int_0^\infty \frac{x^3}{\mathrm{e}^x - 1}\,\mathrm{d}x = \frac{\pi^4}{15}\,. \tag{G.18}$$

Seznam symbolů

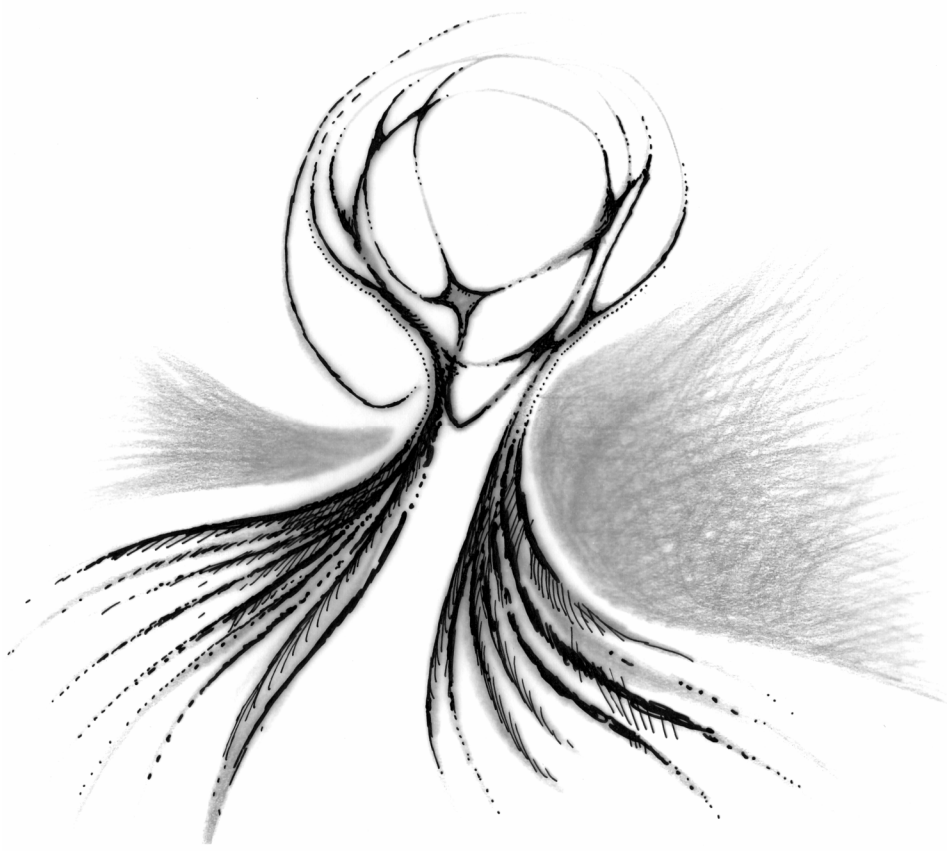


a velká poloosa elipsy
$\mathbf{a}_k$ vektory krystalové mříže
$\hat{\mathbf{a}}$ anihilační operátor
$\hat{\mathbf{a}}^\dagger$ kreační operátor
A amplituda, dynamická proměnná, mechanická práce
A^μ čtyřpotenciál pole
$\mathbf{A}$ vektorový potenciál, vektor posunutí
$\mathbf{A}$ matice koeficientů, matice stability
$\hat{\mathbf{A}}$ operátor k dyn. prom. A
$\mathcal{A}$ atraktor
$\mathscr{A}$ amplituda pravděpodobnosti
Ai Airiho funkce Ai
$\mathbf{b}$ vektor momentu hybnosti
$\mathbf{b}_k$ vektory reciproké mříže
b malá poloosa elipsy, moment hybnosti, Wienova konstanta
$\hat{\mathbf{b}}$ anihilační operátor
$\hat{\mathbf{b}}^\dagger$ kreační operátor
$\mathbf{B}$ magnetická indukce
Bi Airiho funkce Bi
c rychlost, rychlost světla
$\hat{\mathbf{c}}$ projekce anihil. operátoru
$\hat{\mathbf{c}}^\dagger$ projekce kreač. operátoru
$\mathscr{C}$ kapacita
C limitní cyklus, komplexní čísla
C^3 prostor komplexních trojic
C^N prostor komplexních N-tic
$\mathbf{D}$ indukce elektrického pole
$\mathcal{D}$ hustě pokrytá množina
e excentricita
$\mathbf{e}_k$ jednotkový vektor
E, $\mathscr{E}$ energie
$\mathbf{E}$ elektrická intenzita
f frekvence, funkce, hustota volné energie, počet stupňů volnosti
F volná energie
F, $\mathbf{F}$ síla
F_k složky síly
$F^{\mu\nu}$ tenzor elektromagnetického pole
$\boldsymbol{g}$ tíhové zrychlení
g velikost tíhového zrychlení, stupeň degenerace
$g^{\mu\nu}$ metrický tenzor
G Gibbsův potenciál, gravitační konstanta
$\mathbf{G}$ vektor posunutí v k-prostoru
h Planckova konstanta, útlum v bariéře
$\hbar$ redukovaná Planckova konstanta
$\mathbf{H}$ intenzita magnetického pole
H entalpie, Hamiltonova funkce, výška
H_n Hermitův polynom
$\mathscr{H}$ hustota energie
$\mathcal{H}$ Hilbertův prostor
$\hat{\mathbf{H}}$ Hamiltonův operátor
I elektrický proud, intenzita, izospin, moment setrvačnosti
I_3 projekce izospinu
$\mathbf{j}_Q$ proudová hustota, tok náboje
j^μ čtyřtok
J adiabatický invariant, vazební konstanta
$\mathcal{J}$ invariantní množina
k rychlost reakce, tuhost oscilací, velikost vlnového vektoru
k_B Boltzmannova konstanta
$\mathbf{k}$ vlnový vektor
k^μ vlnový čtyřvektor
K integrační konstanta
l vedlejší kvantové číslo, vzdálenost
ℓ^2 prostor posloupností
L Lagrangeova funkce, moment hybnosti, šířka bariéry, vzdálenost
$\mathbf{L}$ vektor momentu hybnosti

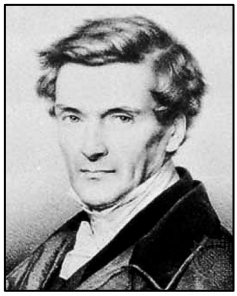
$\hat{\mathbf{L}}$ operátor momentu hybnosti
$\mathcal{L}^2$ prostor funkcí
L_k Lagrangeovy body
$\mathscr{L}$ hustota Lagrangeovy funkce, indukčnost, Laplaceův obraz
m hmotnost, magnetické kvantové číslo
m_S magnetické spinové číslo
$\mathbf{M}$ vektor magnetizace
M hmotnost, magnetizace
$\mathcal{M}_O$ otevřená množina
$\mathcal{M}_U$ uzavřená množina
n koncentrace, hlavní kvantové číslo
N počet částic, počet parametrů
$\hat{N}$ operátor počtu částic
$\hat{\mathcal{N}}$ operátor hustoty částic
$\mathbf{p}$ vektor hybnosti
p hybnost, parametr kuželosečky, tlak
$\mathbf{p}_E$ elektrický dipólový moment
$\mathbf{p}_M$ magnetický dipólový moment
p^μ čtyřhybnost
$\mathbf{P}$ vektor polarizace
P hybnost, polarizace, polarizace fotonu, pravděpodobnost
P_{lm} Legendreův přidružený polynom
$\mathscr{P}$ hustota hybnosti pole
$\hat{\mathbf{P}}$ operátor výměny částic
$\mathbf{q}$, q_k zobecněné souřadnice
Q náboj, teplo, zobecněná souřadnice
r radiální vzdálenost, poloměr
$\mathbf{r}$ polohový vektor
R koeficient odrazu, počet vazeb, Rayleighova funkce
$\mathscr{R}$ elektrický odpor
$\mathcal{R}$ reálná čísla
$\mathcal{R}^3$ prostor reálných trojic
$\mathcal{R}^N$ prostor reálných N-tic
R_L Larmorův poloměr
s hustota entropie, spin, vzdálenost
S akce, entropie, matice rozptylu, podivnost
$\hat{\mathbf{S}}$ operátor spinu
$\mathbf{S}$, S plocha
S podivný atraktor
S_{kl} matice přechodu
t čas, vazební konstanta (t-J model)
T absolutní teplota, kinetická energie, koeficient propustnosti, perioda, teplota
$\hat{\mathbf{T}}$ operátor kinetické energie
$T^{\mu\nu}$ tenzor energie a hybnosti
u rapidita, hustota vnitřní energie
$\mathbf{u}$ rychlostní pole
U vnitřní energie
U_ε okolí bodu
$\hat{\mathbf{U}}$ operátor časového vývoje
$\mathbf{v}$, v rychlost
V mixážní matice, objem, potenciální energie
$\mathscr{V}$ hustota potenciální energie, vytvořující funkce
$\mathcal{V}$ lineární vektorový prostor
$\hat{\mathbf{V}}$ operátor potenciální energie
$\hat{\mathscr{V}}$ operátor viriálu
w pravděpodobnost
W energie
x_k souřadnice
$\mathbf{x}$ polohový vektor
x^μ událost
$\mathcal{X}$ chaotická množina
y souřadnice

Y hypernáboj
Y_{lm} kulová funkce
z partiční suma jedné částice
Z partiční suma, stupeň ionizace
α koeficient, konstanta, úhel
α^k Diracovy matice
β konstanta, relativistický koeficient v/c, Diracova matice
γ hustota energetických stavů, relativistický koeficient
γ^k, γ^5 Diracovy matice
Γ váhový faktor
Γ^k bázové matice
δ Diracova distribuce, Kroneckerův symbol, parametr rovnice, úhel (fáze vlny)
ε energie jednoho stavu, levá strana rovnic, Leviho-Civitův tenzor, numerická excentricita, permitivita, řídící parametr
ζ fugacita
$\boldsymbol{\eta}$ vlastní vektor
θ odklon od osy z
κ konstanta v KG rovnici, elektrická susceptibilita
λ charakteristické (vlastní) číslo, Ljapunovův exponent, parametr, vlnová délka, zeměpisná šířka
$\boldsymbol{\Lambda}$ Lorentzova matice
μ bezrozměrná hmotnost, chemický potenciál, integrační faktor, permeabilita, redukovaná hmotnost
μ_B Bohrův magneton
ν frekvence, kmitočet, radiální kvantové číslo, vlnová funkce neutrina
$\boldsymbol{\xi}$, ξ fázová proměnná, bezrozměrný parametr, pomocná proměnná
Ξ grandkanonická partiční suma
π kanonicky sdružené pole
ρ hustota, hustota pravděpodobnosti, vzdálenost
ρ_Q hustota náboje
σ spin, Pauliho matice, Stefanova-Boltzmannova konstanta
$\Sigma^{\alpha\beta}$ bázové matice
φ fáze, obecné pole, úhel, stav systému
$\hat{\varphi}$ operátor pole
ϕ skalární potenciál, fáze, fázový prostor
χ magnetická susceptibilita
ψ vlnová funkce, stav systému
ω úhlová frekvence
ω_c cyklotronní frekvence
Ω časoprostorová oblast, grandkanonický potenciál

Rejstřík osobností



Teoretická mechanika



Coriolis, Gustave Gaspard (1792–1843), francouzský matematik a fyzik, zabýval se matematickou analýzou, mechanikou a hydraulikou. Proslavil se výpočtem sil působících v rotujících soustavách. Jedna z těchto sil nese jeho jméno – Coriolisova síla. Podrobně také studoval tření. Jako první použil termín mechanická práce v souvislosti s působením sil na tělesa a používal správný vztah pro kinetickou energii. V jedné ze svých prací se zabýval také teorií srážek kulečníkových koulí. V roce 1829 se stal profesorem mechaniky na École Centrale Paris. Jeho jméno je jedním ze 72 jmen vyrytých na Eiffelově věži.



Euler, Leonhard (1707–1783), švýcarský matematik a astronom, žák Johanna Bernoulliho. Pracoval na Akademii v Petrohradu a na Akademii věd v Berlíně. Měl fenomenální paměť a jednou rozhodl při mezi dvěma studenty, jejichž výsledky náročného výpočtu se lišily na padesátém desetinném místě tím, že výsledek spočítal jen tak v hlavě. V roce 1735 Euler oslepl na pravé oko a v roce 1766 i na levé. Přesto pokračoval v publikaci svých výsledků, které diktoval. Euler byl nejplodnějším matematikem všech dob (ačkoli měl 13 dětí). Za svůj život publikoval přes 800 prací. Dvanáctkrát byl odměněn cenou Pařížské akademie. Když se ho ptali na vysvětlení jeho úžasné plodnosti, odvětil: „*Zdá se, že mé pero je inteligentnější než já.*“ Francouzský matematik a astronom François Arago o něm řekl: „*Počítá stejně lehce, jako člověk dýchá nebo orel plachtí vzduchem*“.

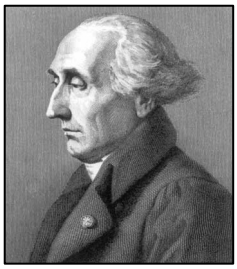
Nezávisle na Lagrangeovi nalezl nutné podmínky pro minimalizaci funkcionálu ve variačním počtu. Ve fyzice jsou tyto rovnice známy jako Lagrangeovy pohybové rovnice. Jejich výhodou je, že nezávisí na volbě souřadnicového systému. Zabýval se také teoretickou astronomií. Zkoumal problém pohybu tří a více těles a dokázal, že neexistuje analytické řešení. Teoreticky řešil pohyb Měsíce (problém nakonec vyřešil až Laplace) a poruchy drah Jupiteru a Saturnu. Euler teoreticky odvodil možnost odstranění barevné vady u čočkových dalekohledů (prakticky to dokázal anglický právník a matematik Chester Moor Hall v roce 1733).



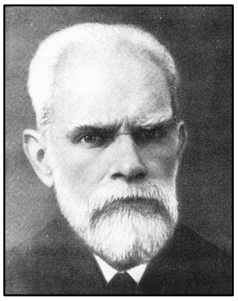
Hamilton, William Rowan (1805–1865), významný irský matematik. Pod vedením svého strýce lingvisty se naučil mluvit čtrnácti jazyky. V sedmnácti letech odhalil chybu v Laplaceově traktátu *Celestial Mechanics*. Předpověděl kónickou refrakci ve dvouosých krystalech, která byla zanedlouho experimentálně potvrzena Hunphrey Lloydem. Hamilton také rozšířil princip minima energie, který popsal Maupertuis, na Hamiltonův princip, základní variační princip v teoretické mechanice, který vede na Lagrangeovy rovnice. V diferenciálním počtu je po něm pojmenován Hamiltonův operátor, ve fyzice Hamiltonovy pohybové rovnice, Hamiltonova funkce a Hamiltonova-Jacobiho rovnice. Poslední třetinu svého života strávil pod vlivem alkoholu a již nijak nepřispěl k lidskému poznání.



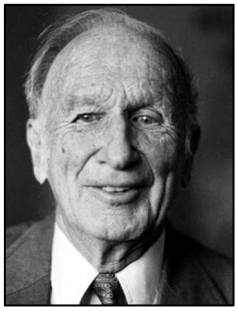
Hopf, Eberhard Frederich Ferdinand (1902–1983), německý matematik a astronom, který se narodil ještě v Rakousko-Uhersku (v Salzburgu). Je zakladatelem ergodické teorie a teorie bifurkací (větvení řešení diferenciálních rovnic). Zabýval se parciálními diferenciálními rovnicemi, integrálními rovnicemi, mechanikou tekutin a diferenciální geometrií. Objevil princip maxima v teorii eliptických diferenciálních rovnic. Vystudoval na Univerzitě v Berlíně, kde habilitoval v roce 1929. Od roku 1931 pracoval na MIT ve Spojených státech. V roce 1936 se vrátil do Německa, pracoval na univerzitách v Lipsku a Mnichově. Od roku 1949 až do smrti pracoval na Indiana University v Bloomingtonu. V teorii diferenciálních rovnic je po něm pojmenována Hopfova bifurkace.



Lagrange, Joseph (1736–1813), francouzský matematik a teoretický fyzik, byl jednou z nejvýznamnějších vědeckých osobností osmnáctého století. Lagrange vystřídal Eulera na místě ředitele Berlínské akademie. Jeho dílo *Mécanique Analytique* z roku 1788 bylo komplexním pojetím mechaniky z matematického hlediska. Lagrange se stal spoluzakladatelem variačního počtu (v matematice řešil obdobné úlohy Euler). Mechanické úlohy chápal jako hledání optimální trajektorie na základě jednoduchého integrálního principu. Nalezl nutné podmínky pro existenci řešení, které představují pohybové rovnice sledovaného objektu. Dnes se tyto rovnice nazývají Lagrangeovy rovnice a jsou základem teoretické mechaniky. Také jsou po něm pojmenovány Lagrangeovy body – pětice rovnovážných bodů v okolí dvou vzájemně se obíhajících těles. Jeden z jeho výroků zní: „*U lidí jsem vždy pozoroval, že jejich nároky jsou v opačném poměru k tomu, co si opravdu zaslouží. To je jeden ze základů morálky.*“

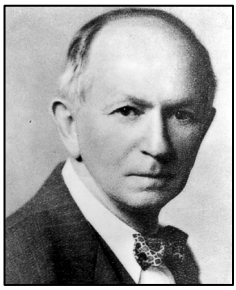


Ljapunov, Alexandr Michailovič, (1857–1918), ruský matematik, jehož základní práce se týkaly diferenciálních rovnic, teorie potenciálu, stability řešení a teorie pravděpodobnosti. Na jeho počest je pojmenována Ljapunova stabilita – stabilita řešení diferenciálních rovnic vzhledem k perturbaci počáteční podmínky. Z fyzikálních problémů řešil podmínky stability rotující kapaliny. Studoval na Univerzitě v Petrohradu. K jeho učitelům patřil například Čebyšev. Studium zakončil v roce 1880. V roce 1880 obdržel zlatou medaili za práci o hydrostatice. V roce 1895 se stal soukromým docentem a v témže roce vedoucím katedry mechaniky na Univerzitě v Charkově. V roce 1902 se vrátil do Petrohradu. V roce 1917 se s těžce nemocnou manželkou stěhuje do Oděsy. V roce 1918 zemřela jeho žena na tuberkulózu. Ljapunov chtěl skoncovat se životem a střelil se do hlavy. Na následky zranění zemřel o tři dny později.



Lorenz, Edward Norton (1917–2008), americký matematik a meteorolog, průkopník a spoluzakladatel teorie deterministického chaosu. Objevil podivný atraktor a poprvé pro nestabilitu použil termín „motýlí jev“. Vystudoval matematiku na koleji Dartmouth v New Hampshire a na Harvardu. V průběhu druhé

světové války předpovídal pro armádu počasí. Po válce vystudoval meteorologii na MIT, kde se později stal profesorem. Vybudoval matematický model pohybu vzdušných mas v atmosféře. Je nositelem mnoha cen a medailí. Je po něm pojmenován Lorenzův podivný atraktor.



Lotka, Alfred James (1880–1949), americký matematik, fyzikální chemik a statistik. Je především znám aplikací fyzikálních postupů v biologii, zejména v pracích o dynamice populace a energetice. Navrhnul známou rovnici popisující vývoj počtu jedinců v systému, který je složen z dravců a kořisti. Nezávisle tuto rovnici odvodil italský matematik Vitto Volterra. Proto se dnes evolučním rovnicím tohoto typu říká Volterrovy-Lotkovy rovnice. Rovnice se využívají i v jiných systémech, kde spolu soupeří dvě skupiny jedinců. Lotka se narodil ve Lvovu na území dnešní Ukrajiny (tehdy Rakousko-Uhersko). Jeho rodiče byli Američané. Studoval v Birminghamu, Lipsku a v USA na Cornellově univerzitě.



Newton Isaac (1642–1727), je považován za jednoho z nejvýznamnějších vědců v dějinách lidstva. Byl anglickým fyzikem, matematikem, astronomem, filozofem a teologem. Newton položil základy klasické mechaniky ve třech pohybových zákonech (zákon setrvačnosti, zákon síly, zákon akce a reakce). Zákon síly se stal vůbec prvním matematickým nástrojem pro předpověď trajektorie těles. K řešení pohybové rovnice (zákona síly) Newton vyvinul základy diferenciálního a integrálního počtu, nezávisle na něm objevil diferenciální počet Gottfried Leibniz. Pro gravitační interakci navrhl Newton silový předpis, který je dnes znám jako Newtonův gravitační zákon. Platí jak pro pohyby těles na Zemi, tak ve vesmíru. Dále se Newton v mechanice zabýval zákonem zachování hybnosti a momentu hybnosti. Newtonovo pojetí mechaniky používá absolutní prostor a čas. Oba pojmy stojí mimo tělesa a nejsou jimi nijak ovlivňovány. Kompletní základy mechaniky publikoval Newton v roce 1687 v *Principiích* (*Philosophiæ Naturalis Principia Mathematica*), jejichž vydání sponzoroval Edmond Halley, který proslul předpovědí návratu Halleyovy komety na základě Newtonova gravitačního zákona.

Newtonův zájem nebyl ale soustředěn jen na mechaniku. Zabýval se i optikou. Zkonstruoval zrcadlový dalekohled s okulárem umístěným kolmo na optickou osu přístroje. Pomocí hranolu rozložil světlo na jednotlivé barvy a zabýval se teorií barev. Světlo si představoval, na rozdíl od Huygense, jako proud částic. Dnes víme, že pravdu měli oba, světlo se někdy chová jako vlnění a někdy má částicovou povahu. Tomuto jevu, který byl objasněn až na základě kvantové mechaniky, říkáme částicově-vlnová dualita.

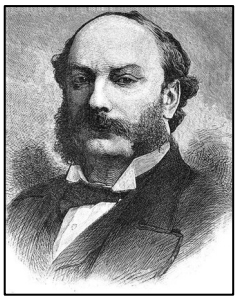
V matematice Newton zavedl integrální a diferenciální počet, zobecnil binomickou větu a zabýval se numerickým řešením transcendentních a diferenciálních rovnic (objevil tzv. Newtonovo schéma). Newton věnoval mnoho času i alchymii, měl vlastní laboratoř. Většina jeho textů je ovšem věnována náboženským otázkám. Po Newtonovi jsou pojmenovány: Newtonovy pohybové zákony, Newtonovo schéma, Newtonův dalekohled, jednotka síly newton a krátery na Marsu a Měsíci.



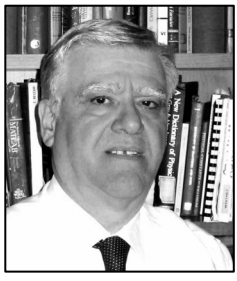
Noether, Emmy (1882–1935), vynikající německo-americká matematička, která ukázala, že každá symetrie v přírodě je úzce spojena se zákonem zachování. Zachovávající se veličina je přímo definována danou symetrií. Pracovala v Erlangenu a v Göttingenu s lidmi, jako byli Felix Klein a David Hilbert. Její práce v oblasti teorie invariantů přispěly k výsledné podobě obecné teorie relativity formulované Albertem Einsteinem v roce 1916. Emmy Noetherová byla pravděpodobně první žena s akademickým titulem vůbec, neboť habilitace byla až do této doby umožněna pouze mužům.



Pol, Balthasar (1889–1959), celým jménem Balthasar van der Pol, holandský fyzik. Van der Pol vystudoval fyziku na Univerzitě v Utrechtu, kde získal v roce 1920 titul PhD. Zabýval se experimenty, zejména šířením elektromagnetických vln. V teoretické oblasti řešil problematiku teorie elektrických obvodů a zabýval se matematickou fyzikou a teorií diferenciálních rovnic. V roce 1935 byl oceněn za své práce medailí IEEE. Jsou po něm pojmenovány van der Polův oscilátor a planetka 10443.



Rayleigh, John William Strutt (1842–1919), anglický baron, který se zabýval fyzikou, akustikou a optikou, zejména šířením vln v tekutinách. Jeho špatný zdravotní stav mu znemožnil dokončit studia na dvou školách (Eton, Harrow). V roce 1857 započal soukromé čtyřleté studium pod vedením vlastního učitele. V roce 1861 vstoupil na Kolej Trinity v Cambridgi. Studia ukončil v roce 1865. Intenzivně se zabýval Maxwellovou teorií elektromagnetismu, a to jak experimentálně, tak teoreticky. V roce 1878 vydal dvoudílný spis *The Theory of Sound*, který se stal základem akustické literatury. Odvodil rovnici popisující závislost rozptylu světla v atmosféře na vlnové délce a vysvětlil tak jako první modrou barvu oblohy. Pokoušel se také, jako mnozí, odvodit zákon záření absolutně černého tělesa. Jeho vztah (Rayleighův zákon) popisuje správně závislost intenzity záření na vlnové délce pro dlouhé vlnové délky. Pro krátké vlnové délky intenzita diverguje (tzv. ultrafialová katastrofa) a zákon neplatí. Pro celé spektrum se podařilo zákon odvodit až Maxu Planckovi. Nobelovu cenu získal v roce 1904 za izolování inertního atmosférického argonu. O prvenství tohoto objevu soupeřil s Williamem Ramsayem, který ale započal své práce prokazatelně až po publikování Rayleighových výsledků. Ramsay získal Nobelovu cenu za chemii za dlouholetý výzkum vlastností argonu v témže roce. V teoretické mechanice zavedl Rayleigh disipační funkci, která se používá pro popis ztrát způsobených přeměnou energie na teplo. Tato funkce se nazývá Rayleighova disipační funkce.



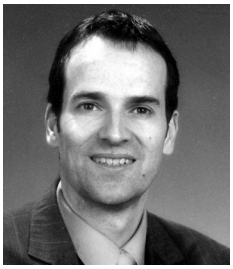
Tonti, Enzo (1935), italský teoretický fyzik, narodil se v Miláně, kde v roce 1961 dokončil studia matematiky a fyziky. Poté pracoval na Milánské polytechnice. V roce 1975 se stal profesorem na Milánské státní univerzitě. Od roku 1976 pracuje na Fakultě inženýrství v Terstu. Celý život se zabývá matematickou strukturou fyzikálních teorií. Už jako student byl fascinován analogiemi mezi různými fyzikálními teoriemi. Nejvíce se ale

proslavil pracemi z oblasti variační formulace fyzikálních teorií. Nalezl podmínky, které musí splňovat soustava diferenciálních rovnic, aby ji bylo možné formulovat variačně. Tyto podmínky se nazývají *Tontiho podmínky*.

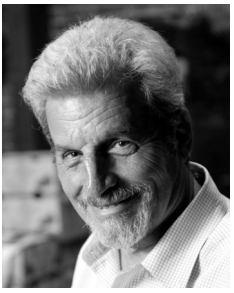


Volterra, Vito (1860–1940), italský matematik a fyzik, který přispěl k aplikaci matematiky do biologických a společenských věd. Nezávisle na Alfredu Lotkovi zformuloval evoluční rovnice pro dvě soupeřící skupiny (například dravci a kořist). Zabýval se také integrálními rovnicemi. Studoval na Univerzitě v Pise, v roce 1892 se stal profesorem na Univerzitě v Turíně. V období před druhou světovou válkou se odmítl podílet na praktikách nacistického vůdce Benita Mussoliniho. Jsou po něm pojmenovány Volterrovy-Lotkovy evoluční rovnice.

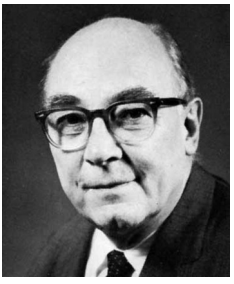
Kvantová teorie



Abele, Hartmut, německo-rakouský kvantový fyzik. Vystudoval na Univerzitě v Heidelbergu. S kvantovou fyzikou a neutrony se blíže seznámil na studijním pobytu v Ústavu Laue-Langevina ve francouzském Grenoblu. Doktorskou práci na téma oscilace neutrin obhájil v Heidelbergu a poté pracoval na americké Univerzitě v Yale. Po návratu se stal profesorem na univerzitách v Heidelbergu a Mnichově. Od roku 2008 pracuje na Univerzitě ve Vídni. Jeho tým připravil experiment s chladnými neutrony, ve kterém byly v roce 2011 za pomoci spektroskopické metody pozorovány kvantové stavy neutronu v tíhovém poli. Je to vůbec poprvé, kdy byly projevy gravitace detekovány u elementární částice. Abele tak otevřel cestu ke zkoumání gravitace na mikroskopické úrovni.



Aharonov, Yakir (1932), izraelský kvantový fyzik. Zabývá se nelokálními jevy v kvantové teorii, kvantovou teorií pole a interpretací kvantové mechaniky. V roce 1959 spolu s Davidem Bohmem navrhli myšlenkový experiment, při kterém je elektronový svazek ovlivněn oblastí nulového magnetického pole, ve které je nenulový vektorový potenciál. Experimentálně byl Aharonův-Bohmův jev prokázán v roce 1986 japonským fyzikem Akira Tomonurou. Klasická elektrodynamika je při popisu elektromagnetické interakce neúplná, teprve kvantová teorie popíše jevy, při kterých elektromagnetické potenciály mění fázi vlnové funkce. Potenciály tak nejsou pomocným matematickým aparátem, ale reálnou fyzikální entitou. V roce 1988 publikoval Aharonov koncept tzv. slabého měření, které neovlivní kvantový stav měřeného objektu. Aharonov vystudoval v izraelské Haifě, poté působil na univerzitě v anglickém Bristolu, kde získal Ph.D. pod vedením Davida Bohma. V roce 1998 získal Wolfovu cenu.



Anderson, Carl David (1905–1991), americký fyzik, který spolu s Victorem Francisem Hessem z Rakouska obdržel v roce 1936 Nobelovu cenu za objev pozitronu (kladného elektronu),

první známé částice antihmoty. Anderson získal titul Ph.D. v roce 1930 na Kalifornském technologickém institutu v Pasadeně, kde pracoval s fyzikem Robertem Andrewsem Millicanem. Od roku 1927 studovali rentgenové fotoelektrony (uvolňují se při srážkách atomů s vysoce energetickými fotony), v roce 1930 začali zkoumat kosmické a gama záření. Anderson v mlžné komoře vyfotografoval stopy sekundárních sprškek kosmického záření a při studiu fotografií objevil množství stop, z jejichž polohy vyplývalo, že by mohly vzniknout působením kladně nabitých částic – ovšem částic mnohem menších než protony. V roce 1932 uvedl, že stopy jsou způsobeny pozitrony, kladně nabitými částicemi se stejnou hmotností jako elektrony. Toto tvrzení bylo v roce 1933 ověřeno britským fyzikem P. Blackettem a jeho italským kolegou G. Occhialinim. Existenci pozitronu jakožto antičástice k elektronu předpověděl v roce 1928 P. Dirac.

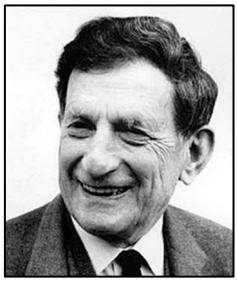
V roce 1936 Anderson objevil mion (těžký elektron), částici 207krát těžší než elektron. Nejdříve myslel, že nalezl mezon předpovězený japonským fyzikem Hideki Yukawou, ale zjistilo se, že mion s těmito částicemi interaguje jen slabě a jde o těžší verzi elektronu. Skutečný mezon byl pak objeven v roce 1947 britským fyzikem Cecilem Powellem a pojmenován pí-mezon nebo pion.



Bell, John Stewart (1928–1990), irský fyzik, který je autorem Bellových nerovností, podle kterých bylo možné vyloučit klasickou interpretaci kvantové mechaniky (interpretaci se skrytými parametry). V roce 1948 se stal bakalářem experimentální fyziky na Univerzitě v Belfastu, Ph.D. získal v roce 1956 na Univerzitě v Birminghamu. Poté pracoval v Harwellově laboratoři a po několika letech přesídlil do evropského střediska jaderného výzkumu CERN. Zde se začal intenzivně zabývat teoretickou fyzikou, teorií elementárních částic a kvantovou teorií. Na základě nerovností, jež navrhl, byla v roce 1983 definitivně vyloučena klasická interpretace kvantové teorie, podle které je pravděpodobnostní charakter měření způsoben neznalostí všech parametrů systému.

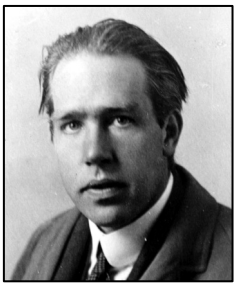


Binning, Gerd Karl (1947), německý fyzik a spoludržitel Nobelovy ceny pro rok 1986 za vynález rastrovacího tunelového mikroskopu. Binnig se narodil ve Frankfurtu a studoval zde na Goetheho universitě, kde získal v roce 1978 titul PhD. V témže roce se stal zaměstnancem výzkumné laboratoře IBM poblíž Curychu ve Švýcarsku a společně s Heinrichem Rohrerem začali pracovat na problému, jak zobrazit jemné detaily struktury látek. Přišli na myšlenku, že by se sonda emitující elektrony pohybovala kolem povrchu zkoumaného objektu a mapovala tak jeho povrch. Malá sonda s ostrým hrotem se pohybuje a elektrony tunelují mezi vzorkem a hrotem. Nepatrné změny (i atomových rozměrů) vzdálenosti sondy od povrchu se zaznamenají. Vhodným vzorkováním povrchu se pořídí třírozměrný obraz. Nový mikroskop je schopen zaznamenat jednotlivé atomy a za pomoci hrotu s nimi i manipulovat.



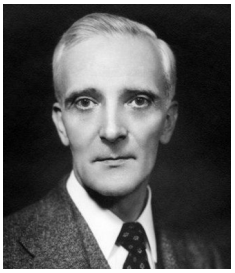
Bohm, David (1917–1992), americko-anglický teoretický fyzik. Zabýval se fyzikou plazmatu, jadernou fyzikou a kvantovou teorií. V průběhu druhé světové války pracoval na projektu Manhattan. Je po něm pojmenován anomální Bohmova difúze

v plazmatu a Aharonův-Bohmův jev, při kterém svazek elektronů změní svou fázi vlivem nenulového vektorového potenciálu i v oblasti, kde je magnetické pole nulové. Studoval na Pensylvánské státní univerzitě, poté na Caltechu a Kalifornské univerzitě v Berkeley. Pracoval na nejrůznějších místech na světě, včetně Izraele, Brazílie a Anglie. Aharonův-Bohmův jev objevil spolu se svým studentem Aharonem při pobytu v anglickém Bristolu, kde byl Aharonov jeho studentem.



Bohr, Niels (1885–1962), dánský fyzik, který v roce 1913 navrhl první úspěšný model atomu. Pokud se elektron nachází na vybraných drahách (takových, na jejichž obvod připadne celistvý násobek vlnové délky elektronu), nezáří. Při přeskoku elektronu mezi dvěma hladinami dojde k vyzáření odpovídajícího energetického kvanta. Moment hybnosti elektronu je kvantován, základním kvantem je Planckova konstanta. Tento model funguje pro vodík a nevysvětluje zákonitosti mikrosvěta. Později byly stejné výsledky získány z kvantové teorie. Bohr je autorem principu korespondence – tvrzení, že při velkých kvantových číslech musí kvantové formule přecházet v klasické. Je také zastáncem pravděpodobnostní (tzv. kodaňské) interpretace kvantové teorie. V roce 1922 obdržel Nobelovu cenu za fyziku.

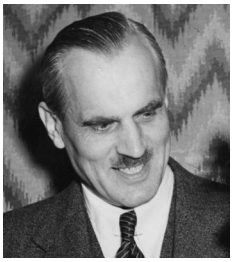
Bose, Satyendra Nath (1854–1948), viz sekce Statistická fyzika.



Brillouin, Léon (1889–1969), francouzsko-americký fyzik. V roce 1926 se podílel na vyvinutí WKB aproximace v kvantové teorii. Šlo o přibližnou metodu výpočtů ze Schrödingerovy rovnice. Ve fyzice pevných látek objevil Brillouinovy zóny, které odrážejí periodicitu krystalické mříže v k-prostoru. Většinu života se věnoval kvantové teorii. Brillouin vystudoval ve Francii École Normale Supérieure, v roce 1928 se stal profesorem na Sorboně, později profesorem na College de France. Za druhé světové války emigroval do Spojených států, stal se profesorem na univerzitě ve Wisconsinu (1941) a později na Harvardu (1946). V závěru života byl profesorem na Kolumbijské univerzitě. Je autorem více než 200 vědeckých prací.



Broglie, Louis de (1892–1987), Francouzský fyzik, který v roce 1923 navrhl princip duality částic a vln. Základem bylo tvrzení, že se objekty mikrosvěta mohou v některých situacích chovat jako částice a v jiných jako vlnění. Vlnové vlastnosti částic vyjádřil Broglie rovnicí: $\lambda = h/mv$, kde λ je vlnová délka, h je Planckova konstanta, m je hmotnost částice a v je její rychlost. Broglie pocházel z francouzské šlechtické rodiny a byl vévodou. Jeho pradědeček byl popraven na gilotině během Velké francouzské revoluce. De Broglie vystudoval historii, ale během první světové války řešil problémy spojené s rádiovou komunikací a začal se zajímat o vědu. Sloužil na vrcholku Eifellovy věže. Hypotézu o vlnových vlastnostech částic předložil v rámci své doktorské práce v roce 1923. Šlo o natolik progresivní myšlenku, že komise váhala, zda mu má doktorát udělit. O pouhých 6 let později, v roce 1929, získal za tuto práci Nobelovu cenu za fyziku.

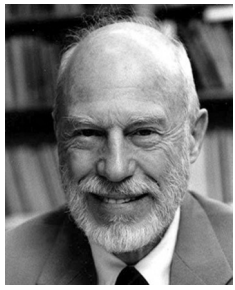


Compton, Arthur (1892–1962), americký fyzik, nositel Nobelovy ceny pro rok 1927 za výzkum rozptylu fotonu na volných elektronech. Compton se zabýval rentgenovým zářením. V roce 1922 zjistil úhlovou závislost změny vlnové délky vysoce energetického fotonu při rozptylu na elektronech. Comptonův objev potvrdil, že elektromagnetické záření má jak vlnovou, tak částicovou povahu, a stal se klíčovým experimentem rodící se kvantové mechaniky. Dnes se tento rozptyl nazývá Comptonův jev. V případě, že foton získá od elektronu energii, hovoříme o tzv. inverzním Comptonově jevu. Ten je jedním ze základních mechanizmů, kterým mohou fotony ve vesmíru získat velkou energii. Compton se také zabýval výzkumem kosmického záření, odrazem, polarizací a spektrálními vlastnostmi rentgenového záření.

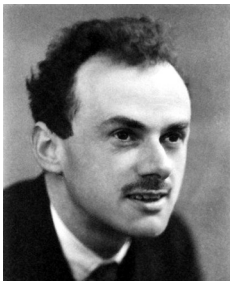
Compton se narodil ve Woosteru ve státě Ohio. Vystudoval Wooster College a Princeton. V roce 1923 se stal profesorem fyziky na Chicagské univerzitě. Stal se ředitelem laboratoře, ve které v roce 1942 Enrico Fermi uvedl do provozu první jaderný reaktor na světě. Compton se zúčastnil konstrukce první atomové bomby. Od roku 1945 do roku 1953 byl rektorem Washingtonské univerzity, po roce 1954 zde působil jako profesor filozofie.



Davisson, Clinton (1881–1958), americký experimentální fyzik, který v roce 1937 získal Nobelovu cenu za fyziku spolu s Georgem Thomsonem. Oba dva vědci nezávisle na sobě zjistili, že elektrony se mohou ohýbat stejně jako světelné vlny, čímž ověřili hypotézu Louise de Broglieho, podle které by se elektrony měly chovat jako vlny i jako částice. V roce 1927 Davisson a Lester Germer zkoumali proud elektronů odražený na kovovém krystalu. Zjistili, že vykazuje ohybové obrazce podobné obrazcům rentgenového záření a ostatních elektromagnetických vln. Tento objev ověřil kvantově mechanické chápání duality vlna-částice a umožnil studium jaderné, atomární a molekulární struktury látek. Davisson získal doktorát na Princetonské univerzitě a většinu své kariéry strávil v Bellových telefonních laboratořích. Nejprve zkoumal emisi elektronů na kovech za zvýšené teploty a později pomáhal vyvinout elektronový mikroskop.



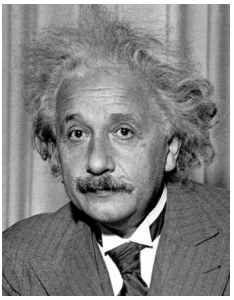
DeWitt, Bryce (1923–2004), americký teoretický fyzik, který se zabýval kvantovou gravitací a numerickými simulacemi v relativitě. Stal se zastáncem Everettovy mnohosvětové interpretace kvantové teorie. Je po něm pojmenována Wheelerova-DeWittova vlnová funkce popisující vesmír jako celek. Je nositelem Diracovy a Einsteinovy ceny. Teoretickou fyziku vystudoval na Harvardu, kde získal v roce 1950 Ph.D. pod vedením Juliana Schwingera, spolunositele Nobelovy ceny za vybudování kvantové elektrodynamiky. Pracoval v Institutu pokročilých studií v Princetonu, na Severokarolínské univerzitě v Chapel Hill a na Texaské univerzitě v Austinu.



Dirac, Paul Adrien Maurice (1902–1984), anglický fyzik, jeden z hlavních tvůrců kvantové teorie 20. století. Položil základy kvantové elektrodynamiky a kvantové teorie pole. V roce 1928 odvodil slavnou Diracovu rovnici – relativistickou rovnici pro

elektron. Stavy se zápornými energiemi správně interpretoval jako antičástice a předpověděl existenci pozitronu. Pozitron byl objeven Carlem Andersonem až v roce 1932. Nezávisle na Fermim odvodil statistické rozdělení pro částice s poločíselným spinem (Fermi-Diracovo rozdělení). Je autorem Diracovy symboliky v kvantové teorii. Ukázal ekvivalenci Schrödingerova a Heisenbergova přístupu ke kvantové mechanice. Je autorem metody druhého kvantování, které umožňuje přechod od kvantové teorie částic ke kvantové teorii pole. Předpověděl polarizaci vakua a netriviální dynamické vlastnosti vakua způsobené kvantovými jevy. Předpověděl existenci magnetického monopólu. Je autorem mnohačásticového formalizmu v kvantové teorii. Za jeho práci na antičásticích a kvantové teorii pole byl v roce 1933 odměněn Nobelovou cenou za fyziku. V pozdějších letech se zabýval důsledky, které by plynuly z hypotetické proměnnosti základních konstant (gravitační, rychlosti světla a Planckovy konstanty). Po celý život byl zastáncem principu jednoduchosti fyzikálních rovnic. Jako jeden z prvních si uvědomil, že symetrie v přírodě jsou primárním principem při sestavování fyzikálních rovnic.

Ehrenfest, Paul (1880–1933), viz sekce Statistická fyzika.



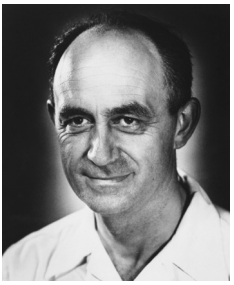
Einstein, Albert (1879–1955), německo-americký fyzik, autor speciální a obecné teorie relativity, vědec, který objasnil fotoelektrický jev a Brownův pohyb a odvodil společně s Bosem statistické rozdělení částic s celočíselným spinem. Speciální relativitu publikoval v roce 1905. Dal v ní do souladu klasickou mechaniku s Maxwellovou elektrodynamikou, ze které plynula nezávislost rychlosti světla na pohybu zdroje. Speciální relativita s sebou přinesla kontrakci délek, dilataci času a poznání, že čas a prostor nejsou absolutní.

V roce 1905 Einstein také vysvětlil fotoelektrický jev. Předpokládal, že se světlo skládá z částic (fotonů), jejichž energie je rovna $\hbar\omega$. Možnost vytržení elektronu z kovu za pomoci světla je dána frekvencí jednotlivých fotonů, nikoli jejich počtem. Téhož roku také Einstein podal vysvětlení Brownova pohybu.

V roce 1916 Einstein publikoval novou teorii gravitace – obecnou relativitu. Gravitaci popisuje jako zakřivený časoprostor. Sama tělesa přispívají k zakřivení časoprostoru a pohybují se v něm po nejrovnějších možných drahách – geodetikách. Albert Einstein získal Nobelovu cenu za fyziku pro rok 1921, paradoxně však za vysvětlení fotoelektrického jevu a nikoli za obecnou relativitu, která byla jeho hlavním přínosem k poznání zákonitostí přírody.



Everett, Hugh (1930–1982), americký fyzik, který navrhl mnohosvětovou interpretaci kvantové teorie, podle níž se při aktu měření realizuje v našem vesmíru jedna z možných hodnot a ve vesmírech jiných, paralelních, se realizují ostatní možné hodnoty. Tato interpretace kvantové teorie nebyla mnohými fyziky přijata a způsobila Everettemu nemalé potíže. Studoval na Katolické americké univerzitě a v Princetonu. Kromě kvantové teorie se také zabýval matematickými optimalizacemi různých problémů, matematickým modelováním, statistickou analýzou a matematickou teorií her.



Fermi, Enrico (1901–1954), italsko-americký fyzik, který se věnoval především kvantové teorii a teorii elementárních částic. Malou neutrální částici, která vzniká při beta rozpadu pojmenoval neutrino (v italštině „neutronek“). Na jeho počest jsou pojmenovány částice s poločíselným spinem jako fermiony. Jde o částice, které splňují Pauliho vylučovací princip. Tyto částice splňují statistické rozdělení pojmenované Fermiho-Diracovo rozdělení. Enrico Fermi zkonstruoval a spustil v roce 1942 pod stadionem Chicagské univerzity první jaderný reaktor na světě. Byl postaven z grafitových cihliček, které sloužily současně jako moderátor. V roce 1943 založil Aragonskou národní laboratoř. Enrico Fermi se také zabýval způsobem urychlování kosmického záření a navrhl statistické urychlení nabitých částic při jejich odrazech od magnetických zrcadel. Dnes tento mechanizmus nazýváme Fermiho mechanizmus. V roce 1938 získal Nobelovu cenou za fyziku za objev umělých radioaktivních prvků, které vznikají z jader při ostřelování neutrony. Podle Fermiho je pojmenována rentgenová observatoř vypuštěná do vesmíru v roce 2008.

Fock, Vladimir Alexandrivič (1898–1974), sovětský fyzik, který se zabýval především kvantovou mechanikou a kvantovou elektrodynamikou. Vystudoval Petrohradskou univerzitu.



Gerlach, Walter (1889–1979), německý fyzik, spoluobjevitel spinu ve slavném Sternově-Gerlachově experimentu. Gerlach vystudoval Univerzitu Eberharda Karlse ve Frankfurktu nad Mohanem. Za první světové války sloužil v německé armádě. Podílel se na vývoji bezdrátové telegrafie. V roce 1922 uskutečnil se Sternem experiment vedoucí k objevu spinu. Svazek atomů stříbra procházel nehomogenním magnetickým polem a dopadal na skleněný disk. Došlo k jeho rozdělení na dva svazky, které bylo záhy vysvětleno jako důsledek existence spinu – vlastního rotačního a magnetického momentu částic. V roce 1925 se Gerlach stal profesorem na Univerzitě v Tübingenu. Toto místo převzal po Paschenovi. V roce 1929 se stal profesorem na Mnichovské univerzitě, kde místo převzal po Wienovi. Na této pozici zůstal až do května 1945, kdy byl uvězněn spojeneckými armádami. Byl vězněn ve Francii a později v Anglii. Údajně se podílel na vývoji německých zbraní. V roce 1946 se vrátil do Německa, pracoval na Univerzitě v Bonnu jako hostující profesor a od roku 1948 byl profesorem na Mnichovské univerzitě. Současně zde byl vedoucím katedry fyziky a rektorem univerzity (1948–1951). Poté zastával mnoho významných pozic v německé vědě.



Germer Lester (1896–1971), americký fyzik, který spolu s Clintonem Davissonem prokázal vlnové vlastnosti elektronu, a tím potvrdil vlnově-částicový dualizmus navržený Louis de Brogliem. Germerův-Davissonův experiment byl klíčový pro vývoj elektronového mikroskopu. Germer vystudoval Kolumbijskou univerzitu. Za první světové války byl bojovým pilotem americké armády. Poté se stal zaměstnancem Bellových telefonních laboratoří. Vedle fyziky bylo jeho druhou vášní horolezectví, kterému se intenzivně věnoval od svých 45 let až do smrti.

Gordon, Walter (1893–1939), německý teoretický fyzik. Dětství prožil ve Švýcarsku, pozdní léta ve Švédsku (z důvodu politické situace v Německu). Vystudoval na Berlínské univerzitě, doktorský titul získal v roce 1921 pod vedením Maxe Plancka. V roce 1922 se stal asistentem Maxe von Laueho. Od roku 1926 působil v Hamburgu, kde se stal v roce 1930 profesorem. Od roku 1933 žil ve švédském Stockholmu. Zabýval se teoretickou fyzikou. V roce 1927 spolu s Oskarem Kleinem navrhli relativistickou variantu Schrödingerovy rovnice, tzv. Kleinovu-Gordonovu rovnici. Původně předpokládali, že jde o správnou rovnici pro elektron. Nakonec se ukázalo, že jejich rovnice popisuje kvantově relativisticky částice se spinem 0, zatímco Diracova rovnice z roku 1928 je vhodná pro částice se spinem 1/2 (tedy právě pro elektron).



Goudsmit, Samuel Abraham (1902–1978), holandsko-americký fyzik, který spolu s Uhlenbeckem interpretoval výsledek Sternova-Gerlachova experimentu jako důsledek existence spinu. Zabýval se také čárovými spektry. Fyziku vystudoval na Univerzitě v Leydenu (byl žákem Paula Ehrenfesta), kde také v roce 1927 získal Ph.D. V letech 1927 až 1946 působil jako profesor na Michiganské univerzitě. V průběhu druhé světové války působil na MIT. Pracoval na vývoji atomové bomby v projektu Manhattan. Úzce spolupracoval s Wernerem Heisenbergem a Otto Hahnem. Zabýval se i archeologií a egyptologií.



Heisenberg, Werner (1901–1976), německý teoretik, který se zabýval základními rysy kvantové teorie. Je autorem maticové kvantové mechaniky, kterou odvodil v roce 1925. Jde o jiný postup výpočtu kvantových stavů, než je Schrödingerova vlnová mechanika. Heisenberg odvodil také slavné relace neurčitosti, podle kterých nelze současně přesně změřit polohu a hybnost objektu. Měření jedné veličiny narušuje výsledek měření druhé veličiny. Za vybudování základů kvantové teorie získal v roce 1932 Nobelovu cenu za fyziku. Heisenberg vystudoval teoretickou fyziku na Univerzitě v Mnichově. Titul PhD získal pod vedením Sommerfelda v roce 1923 a stal se asistentem Maxe Borna v Göttingenu. Tři roky pracoval v Kodani s Nielsem Bohrem, kde se spolu podíleli na tzv. kodaňské interpretaci kvantové teorie. Navrhl také úspěšný model feromagnetik se dvěma fázovými přechody. Od roku 1927 do roku 1941 byl profesorem teoretické fyziky v Lipsku, od roku 1942 do roku 1945 byl ředitelem Institutu Maxe Plancka v Berlíně a od roku 1946 byl ředitelem Institutu Maxe Plancka v Kodani.

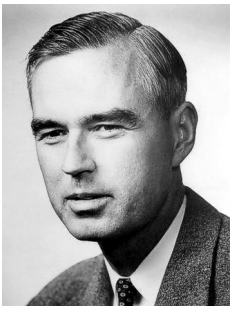


Klein, Oskar Benjamin (1894–1977), švédský teoretický fyzik. Ph.D. získal v roce 1921 na Stoskholmské univerzitě. Pracoval na Michiganské univerzitě (USA), v Leidenu a na Lundské univerzitě. Spolupracoval s Nielsem Bohrem a Paulem Ehrenfestem. Je spoluautorem Kaluzova-Kleinova modelu, který se poprvé pokusil sjednotit elektřinu a magnetizmus s gravitací pomocí přidání další, páté dimenze. Dnes se obdobný postup i používá v teorii strun (v tzv. M teorii). Je také spolutvůrcem Kleinovy-Gordonovy rovnice z roku 1927. Původně tuto rovnici odvodili Klein a Gordon jako relativistickou kvantovou rovnici pro elektron, ukázalo se ale, že správnou rovnicí je Diracova rovnice a rovnice Kleinova-Gordonova je správnou

kvantovou relativistickou rovnicí pro částice s nulovým spinem. Spolu s Alfvénem zastával názor, že děje ve vesmíru dominantně ovlivňuje elektromagnetická interakce. Podle Kleina je také pojmenován Kleinův paradox: z řešení Diracovy rovnice plyne, že relativistická nehmotná částice není při průchodu potenciálovou bariérou exponenciálně tlumená. Jev byl skutečně experimentálně ověřen (například pohyb elektronu s nulovou efektivní hmotností v grafenu). Spolu s Yoshio Nishinou odvodil v roce 1929 formuli pro účinný průřez Thomsonova rozptylu fotonu na elektronu v nejnižším řádu kvantové elektrodynamiky (Kleinova-Nishinova formule). V roce 1959 získal Planckovu medaili.



Kronig, Ralph (1904–1995), německo-americký fyzik, který výrazně zasáhl do vývoje kvantové mechaniky. Je spoluobjevitelem spinu částic, zabýval se rentgenovou absorpční spektroskopií a kvantovým chováním periodických struktur. Je po něm pojmenován Kronigův-Penneyův model, který na jednoduchém periodickém potenciálu do nekonečna se opakujících bariér popisuje vznik povolených a zakázaných pásů ve spektru částice. Dále je po něm pojmenován Costerův-Kronigův přechod, při němž je při přeskoku elektronu na jinou hladinu emitován elektron. Kronig studoval v německých Drážďanech a později na Kolumbijské univerzitě v USA, kde získal v roce 1925 doktorát. Z evropských vědců ho nejvíce ovlivnil Paul Ehrenfest.



Lamb, Willis Eugene (1913–2008), americký fyzik a spoludržitel Nobelovy ceny za fyziku pro rok 1955, kterou dostal spolu s Polykarpem Kuschem za experimentální práce vedoucí ke zpřesnění kvantové elektrodynamiky. Lamb se v roce 1938 stal zaměstnancem Kolumbijské university v New Yorku a během druhé světové války pracoval ve slavné Laboratoři záření (Radiation Laboratory) na MIT. V roce 1947 detekoval Lamb odchylky od hyperjemné struktury spektrálních čar předpovězené kvantovou elektrodynamikou. Tyto odchylky byly způsobeny netriviálními dynamickými vlastnostmi vakua, zejména přítomností virtuálních elektronových-pozitronových párů ve vakuu. Během let 1951–1956 byl profesorem fyziky na Stanfordské univerzitě v Kalifornii a navrhl zde mikrovlnné techniky pro měření hyperjemných struktur spektrálních čar helia. Do roku 1962 byl profesorem teoretické fyziky na universitě v Oxfordu. V témže roce byl jmenován profesorem na universitě v Yale. V roce 1974 se stal profesorem fyziky a optických věd na universitě v Arizoně.

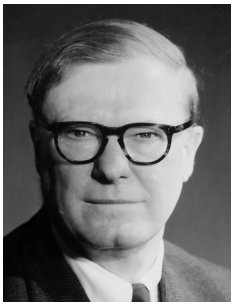


Neumann, John von (1903–1957), maďarsko-americký matematik, jenž nezávisle na Diracovi ukázal v roce 1944, že Schrödingerova vlnová mechanika a Heisenbergova maticová mechanika jsou matematicky ekvivalentní. V roce 1932 navrhl velmi kontroverzní interpretaci kvantové mechaniky, podle které je výsledek aktu měření ovlivněn vědomím pozorovatele. V roce 1944 vyvinul teorii her. Stal se průkopníkem digitálních počítačů, navrhl základní architekturu počítače (procesor, řadič, operační paměť, vstupní a výstupní zařízení). Hluboce se zabýval numerickou matematikou, na konci druhé světové války se podílel numerickými výpočty na konstrukci první atomové bomby. Je po něm pojmenována

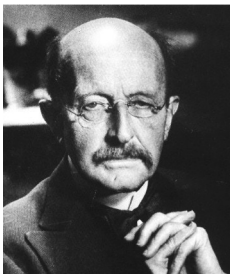
von Neumannova architektura počítače, von Neumannova algebra v kvantové teorii a von Neumannovy buněčné automaty, jejichž koncept vyvinul. Von Neumann studoval chemii na Univerzitě v Berlíně do roku 1923, kdy odešel do Curychu. V Curychu dokončil v roce 1926 studium na Technické vysoké škole a stal se chemickým inženýrem. Doktorát získal na Budapešťské univerzitě, a to již v matematice, z teorie množin. Ve dvaceti letech publikoval definici přirozených čísel, tak, jak ji používáme dodnes.



Pauli, Wolfgang (1900–1958), rakousko-německo-americký fyzik, v roce 1925 zformuloval Pauliho vylučovací princip, který říká, že dva fermiony se nemohou nacházet ve stejném kvantovém stavu. Tento princip je zodpovědný za rozdílné vlastnosti různých atomů a za chemické vlastnosti látek. Významně se podílel na vzniku kvantové mechaniky. Je po něm pojmenována Pauliho rovnice, první kvantová rovnice, která obsahovala spin. Ve 30. letech předpověděl existenci neutrina. Za své práce, zejména za objev vylučovacího principu, získal v roce 1945 Nobelovu cenu za fyziku. Pauli se narodil ve Vídni, jeho kmotrem byl Ernst Mach. Prarodiče Pauliho z otcovy strany pocházeli z pražské židovské rodiny. První vědecký článek o obecné relativitě publikoval v 18 letech. Studoval v Mnichově pod vedením Sommerfelda, zde získal v roce 1921 Ph.D. na základě práce o kvantových vlastnostech molekuly vodíku. Pauli byl rok na Univerzitě v Göttingenu, kde pracoval pod vedením Maxe Borna. Také pracoval na Ústavu teoretické fyziky v Kodani (dnes Ústav Nielse Bohra), na Univerzitě v Hamburku a ve švýcarském Curychu. V roce 1931 byl hostujícím profesorem na Michiganské univerzitě a v roce 1935 v Princetonu. V roce 1939 se politické poměry v Evropě zhoršily natolik, že se Pauli odstěhoval do Spojených států, kde pracoval jako profesor teoretické fyziky v Princetonu. Po druhé světové válce se stal americkým občanem.



Penney, William (1909–1991), anglický matematik a teoretický fyzik, jeden ze zakladatelů anglického jaderného výzkumu. Studoval na Imperial College, magisterský titul získal na americké Univerzitě ve Wisconsinu a doktorát na Trinity College v Cambridgi. V letech 1967 až 1973 byl rektorem prestižní univerzity Imperial College. Byl jeden z 20 anglických fyziků, kteří pracovali na americkém projektu Manhattan, jehož cílem bylo vyvinout atomovou bombu. Penney počítal destrukční účinky rázové vlny vzniklé po explozi. V roce 1945 byl členem komise, která zvolila města Hirošima a Nagasaki pro americký útok. Po válce stál u návrhu a testů britské atomové bomby a dohlížel na vývoj britské vodíkové bomby. Byl ředitelem a předsedou různých spolků zabývajících se atomovou energií. V roce 1967 získal šlechtický titul a stal se baronem. Na Imperial College je po něm pojmenována laboratoř. Je spoluautorem Kronigova-Penneyova modelu interakce částice s periodickým potenciálem.

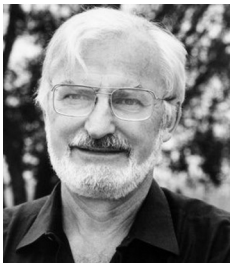


Planck, Max (1858–1947), německý fyzik, který formuloval rovnici popisující vyzařování absolutně černého tělesa za předpokladu, že energie je kvantována a elementární kvantum je úměrné frekvenci. Tento předpoklad zavedl ryze matematicky, aby rovnice byly řešitelné. Fyzikální interpretaci příliš nedůvě-

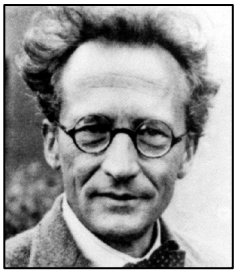
řoval. V roce 1918 získal Nobelovu cenu za svou kvantovou teorii, úspěšně vyzkoušenou Einsteinem na fotoelektrickém jevu a Bohrem na prvním modelu atomu. Planck se hluboce zabýval termodynamikou, je po něm pojmenována jedna z možných formulací druhé věty termodynamické. Planck byl kritikem pravděpodobnostní interpretace entropie. V roce 1900 poprvé použil univerzální plynovou konstantu a Avogadrovo číslo. Po Planckovi jsou pojmenovány tzv. Planckovy škály – typická hmotnost, délka, čas a energie získané kombinací základních konstant. Planckovo jméno také nesou: největší síť vědeckých ústavů v Německu (Max Planck Institute), kráter na Měsíci a evropská sonda zkoumající reliktní záření.



Pontecorvo, Bruno (1913–1993), italsko-ruský jaderný fyzik. V první polovině života pracoval v Itálii, stal se asistentem Enrica Fermiho, účastnil se experimentů s pomalými neutrony, které vedly k objevu řetězové štěpné reakce. Předpověděl oscilace neutrin a je po něm pojmenována mixážní matice hmotnostních neutrinových stavů. V roce 1948 získal britské občanství a zajímavé pracovní nabídky se jen hrnuly. Přesto v roce 1950 za podivných okolností emigroval do Sovětského Svazu, kde pracoval v Dubně až do své smrti. Podle jeho přání je polovina popela uložena v Římě a polovina v Dubně. Od roku 1995 je udílena prestižní Pontecorvova cena za úspěchy v jaderném a částicovém výzkumu.



Rohrer, Heinrich (1933), švýcarský fyzik a spoludržitel Nobelovy ceny za fyziku pro rok 1986, která mu byla udělena za vynález rastrovacího tunelového mikroskopu. Rohrer studoval Švýcarský federální ústav technický, kde v roce 1960 získal titul Ph.D. V roce 1963 se stal zaměstnancem výzkumné laboratoře IBM poblíže Curychu. Tady se spolu s Gerdem Binnigem dali do konstrukce zařízení, které jim později umožnilo odhalit mikroskopickou strukturu povrchů zkoumaných materiálů a pozorovat jednotlivé atomy. Nový mikroskop využívá tunelování elektronů mezi hrotem sondy a povrchem zkoumaného vzorku. Vzorkovací tunelový mikroskop se používá k manipulaci s jednotlivými atomy, při studiu biologických vzorků, k analýze průmyslových materiálů (jakými jsou třeba supravodiče) nebo k testování miniaturních elektrických obvodů.

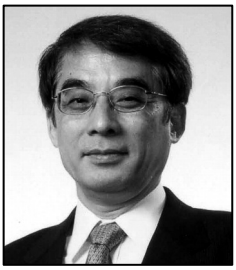


Schrödinger, Erwin (1887–1961), rakouský fyzik, který v roce 1926 rozpracoval vlnovou mechaniku jako jednu z možných formulací kvantové mechaniky. Z tzv. Schrödingerovy rovnice je možné určit vlnovou funkci, která má význam amplitudy pravděpodobnosti výskytu částice a její kvadrát představuje hustotu pravděpodobnosti. Za své práce získal v roce 1933 Nobelovu cenu za fyziku. Schrödinger studoval na Univerzitě ve Vídni. Po první světové válce začal pracovat na Univerzitě v Curychu. Od roku 1927 pracoval na pozvání Maxe Plancka na Univerzitě v Berlíně. Kvůli persekuci židů opustil univerzitu v roce 1933 a sedm následujících let putoval po Rakousku, Velké Británii, Belgii a Itálii a mnohokrát měnil zaměstnání. Teprve v roce 1940 se usadil pro následujících 15 let v Irsku na Dublinském institutu pro pokročilá studia. V roce 1956 odešel Schrödinger do důchodu a vrátil se do rakouské Vídně.



Stern, Otto (1888–1969), původem německý vědec a nositel Nobelovy ceny za fyziku pro rok 1943 za výzkum molekulárních svazků jako nástroje pro studium charakteristiky molekul a za změření magnetického momentu protonu. Sternovou ranou vědeckou prací byly teoretické studie věnované statistické fyzice. Roku 1914 se stal přednášejícím teoretické fyziky na Frankfurtské univerzitě a v roce 1923 profesorem fyzikální chemie na Hamburské univerzitě. Zde také počátkem 20. let dvacátého století spolu s Walterem Gerlachem představili svůj historický experiment s molekulárními svazky. Kolimovaný svazek atomů stříbra procházel nehomogenním magnetickým polem a dopadal na skleněný disk. Došlo k jeho rozdělení na dva svazky, které bylo záhy vysvětleno jako důsledek existence spinu – vlastního rotačního a magnetického momentu částic.

V roce 1933 Stern změřil magnetický moment protonu a poukázal na jeho nesoulad se stávající teorií. V roce 1933, když se k moci dostali nacisté, byl Stern donucen opustit Německo. Odjel do USA, kde se stal profesorem fyziky na Carnegieho institutu technologií v Pittsburghu. Zde zůstal až do svého penzionování v roce 1945.



Tonomura, Akira (1942), vynikající japonský kvantový fyzik, vynálezce elektronové holografie a elektronového holografického mikroskopu, který dokáže zaznamenat nejenom intenzitu elektronového svazku, ale i jeho fázi. Tonomura je dlouholetým pracovníkem vývojových laboratoří společnosti Hitachi. Studoval na Tokijské univerzitě, Ph.D. získal na Gakushuinově univerzitě. První elektronový hologram nahrál již v roce 1968. Spolu s kolegy za pomoci elektronové holografie pozoroval Aharonův-Bohmův jev – posun fáze elektronů, které procházejí oblastí s nulovým magnetickým polem, ale nenulovým potenciálem. V 90. letech 20. století vyvinul metodu pro pozorování magnetických trubic a vírů v supravodičích. V roce 2000 zkonstruoval holografický mikroskop s rozlišením 49,5 pm. Je držitelem mnoha mezinárodních cen a medailí.

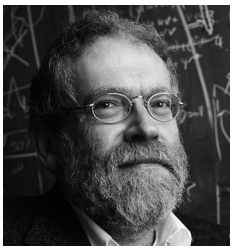


Uhlenbeck, George Eugene (1900–1988), holandsko-americký fyzik, který společně s Goudsmithem ukázal, že štěpení svazku atomů stříbra ve vnějším magnetickém poli (Sternův-Gerlachův experiment) je způsobeno existencí dalšího kvantového čísla, spinu. První rovnici pro částici se spinem potom nalezl Pauli. Uhlenbeck studoval chemické inženýrství v Delftu a poté fyziku a matematiku v Leidenu, kde získal bakalářský titul v roce 1920 a magisterský v roce 1923. Od roku 1925 pracoval v Leidenu jako asistent Ehrenfesta. Tam poznal Goudsmitha, se kterým spoluobjevil spin. Uhlenbeck byl dlouholetým přítelem Enrica Fermiho. V roce 1938 byl hostujícím profesorem na Kolumbijské univerzitě. V roce 1939 se stal profesorem teoretické fyziky na Univerzitě v Ann Arbor.

Za druhé světové války vedl teoretickou skupinu v radiační laboratoři v Cambridgi (USA). Po válce se vrátil do Ann Arbor. Od roku 1960 až do důchodu pracoval v Rockefellerově ústavu pro výzkum medicíny v New Yorku.

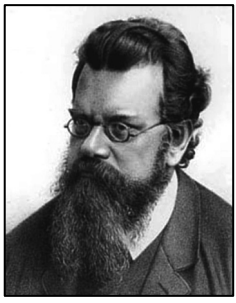


Wigner, Eugene (1902–1995), v Maďarsku narozený americký fyzik, který spolu s Hansem Jensenem a s Mariou Mayerovou získal Nobelovu cenu pro rok 1963 za přínos k atomové fyzice. Wigner získal Ph. D. na Technické univerzitě v Berlíně v roce 1925. Působil v Berlíně, v Göttingenu, poté odjel do USA, kde v Princetonu strávil většinu akademického života. Zformuloval zákon zachování parity při platnosti levopravé symetrie. Ukázal, že jaderná síla, která drží protony a neutrony pospolu, má krátký dosah a nezávisí na náboji. V roce 1936 pracoval na teorii absorpce neutronů, která byla užitečná při stavbě jaderných reaktorů. Po druhé světvé válce pomáhal Enrico Fermimu zkonstruovat první jaderný reaktor. Po Wignerovi jsou pojmenovány: Wignerovo pravděpodobnostní rozdělení, Wignerův teorém, Wignerův jev, Wignerův-Eckartův teorém a další.



Zeilinger, Anthon (1945), rakouský kvantový fyzik, který je průkopníkem kvantové teorie informace. Jako první realizoval kvantovou teleportaci fotonů. Známý je i svými experimenty s hledáním hranice mezi kvantovým světem a makrosvětem. Zabývá se interferenčními jevy u neutronů, atomů a velkých molekul, propletenými kvantovými stavy, kvantovou kryptografií a teleportací. Na vzdálenosti 144 kilometrů mezi dvěma Kanárskými ostrovy demonstroval, že kvantová komunikace bude možná i přes satelity. Byl zaměstnancem mnoha světových univerzit, například pracoval v Oxfordu, na MIT, na Humboldtově univerzitě a dalších. V současnosti je ředitelem vídeňské pobočky Ústavu kvantové optiky a kvantové informace Rakouské Akademie věd a profesorem na Vídeňské univerzitě.

Statistická fyzika



Boltzmann, Ludwig Eduard (1844–1906), rakouský fyzik, zakladatel statistické fyziky. V roce 1872 zformuloval vztah mezi entropií a pravděpodobností. Je autorem H teorému o narůstání entropie v nevratných procesech. Zabýval se kinetickou teorií. Ekvipartiční teorém pokládal za základní rys kinetické teorie. Zastával atomickou hypotézu. V roce 1869 se stal profesorem matematické fyziky na Univerzitě v Grazu. Po Boltzmannovi jsou pojmenovány: Boltzmannova rovnice pro pravděpodobnost a pro časový vývoj hustoty pravděpodobnosti, Boltzmannův H teorém, Boltzmannova konstanta a kráter na Měsíci.



Bose, Satyendra Nath (1854–1948), indický fyzik, který se zabýval především kvantovou statistikou. Na jeho počest jsou pojmenovány částice s celočíselným spinem, tzv. bosony, a jeho jméno nese statistické rozdělení těchto částic (Boseho-Einsteinovo rozdělení). Název bosony pro tyto částice poprvé použil Paul Dirac. Zabýval se také rentgenovou krystalografií, elektromagnetickými vlastnostmi ionosféry a jednotnou teorií pole. Jeho průlomový článek o kvantovém chování světla (odvodil v něm na základě kvantového chování mnoha identických fotonů

Planckův vyzařovací zákon) z roku 1924 odmítla redakce vydat. Bose ho zaslal Einsteinovi k posouzení. Einstein článek přeložil do němčiny a zařídil jeho vydání v Německu. Sám pak myšlenky dále rozpracoval, proto se dnes hovoří o Boseho-Einsteinově statistickém rozdělení nebo Boseho-Einsteinově kondenzátu.

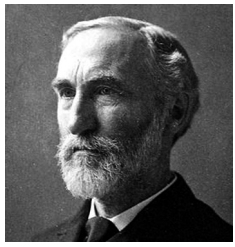
Dirac, Paul Adrien Maurice (1902–1984), viz sekce Kvantová teorie



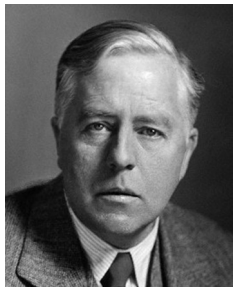
Ehrenfest, Paul (1880–1933), rakouský fyzik, který se zabýval statistickou fyzikou a termodynamikou. V roce 1900 navrhl model difúze a statistickou interpretaci druhé věty termodynamické. V roce 1912 se v Praze poprvé setkal s Albertem Einsteinem. Později pracoval v oblasti kvantové teorie rotujících systémů. Ehrenfest studoval na Vídeňské univerzitě a doktorská studia zakončil pod vedením Boltzmanna v Göttingenu v roce 1904. Pracoval na mnoha univerzitách a významných pracovištích, k nejdůležitějším patřil pobyt v Leidenu. Jeho studenty byly například Hendrik Casimir a George Uhlenbeck, významně byl ovlivněn Ralphem Kronigem. Na jeho počest jsou pojmenovány Ehrenfestovy teorémy o vztahu mezi kvantovou a klasickou podobou pohybových rovnic.

Einstein, Albert (1879–1955), viz sekce Kvantová teorie

Fermi, Enrico (1901–1954), viz sekce Kvantová teorie



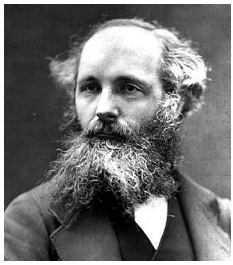
Gibbs, Josiah Willard (1839–1903), americký matematik a teoretický fyzik, který se zabýval termodynamikou a statistikou. Zformuloval pojem termodynamické rovnováhy pomocí energie a entropie. Zformuloval také jednoduché pravidlo chemické rovnováhy několika fází (Gibbsovo pravidlo fází). V matematice založil vektorovou analýzu. Studoval na Univerzitě v Yale, kde získal PhD v oboru inženýrství. Později se na této univerzitě stal profesorem. V jeho pracích se spolu setkávala matematika, fyzika a chemie. Po Gibbsovi jsou pojmenovány: Gibbsovo pravidlo fází a Gibbsův termodynamický potenciál.



Jeans, James (1877–1946), anglický matematik a astronom, který se zabýval širokým spektrem fyzikálních problémů. Nevěřil Laplaceově hypotéze o vytvoření sluneční soustavy z prvopočáteční mlhoviny. Namísto toho vytvořil vlastní teorii, podle které způsobil průlet blízké hvězdy kolem Slunce slapové vyvržení hmoty, z níž vznikla sluneční soustava. Tato teorie byla později vyvrácena. Jeans se také zabýval termodynamikou a zářením absolutně černého tělesa, podařilo se mu odvodit vyzařovací zákon pro nízké frekvence. Spolu s Eddingtonem se stal zakladatelem britské kosmologie. Byl odpůrcem teorie Velkého třesku a zastával teorii ustáleného vesmíru, která byla vyvrácena objevem reliktního záření. Od roku 1928 se Jeans stal úspěšným populárním spisovatelem. Jeans vystudoval fyziku v Cambridgi, poté pracoval v Cambridgi a v Princetonu.

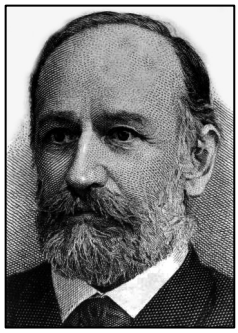
Liouville, Joseph (1809–1882), francouzský matematik, který se zabýval teorií čísel, komplexní analýzou, diferenciální geometrií, topologií, teoretickou fyzikou a astronomií. Přispěl k řešení integrálních rovnic za pomoci vlastních čísel, detailně se věnoval

integrabilitě soustav rovnic a ukázal, že se při časovém vývoji v hamiltonovských systémech zachovává fázový objem (Liouvillův teorém). Je po něm pojmenována celá řada matematických objektů a kráter na Měsíci.

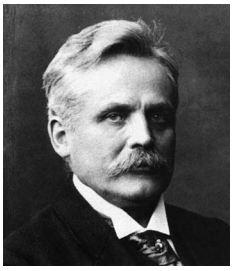


Maxwell, James Clerk, (1831–1879), skotský matematik a fyzik. Odvodil, že světlo je složeno z příčných modů a je způsobeno magnetickými a elektrickými jevy. Svojí teorii elektřiny a magnetizmu publikoval v roce 1873. Maxwellem předpovězěnou existenci elektromagnetických vln dokázal Heinrich Hertz po Maxwellově smrti. Maxwell správně odhadl, že Saturnovy prstence jsou tvořeny drobným kamenitým materiálem. S Clausiem vyvinul kinetickou teorii plynů a v roce 1867 zformuloval paradox Maxwellova démona. Ukázal, že druhý termodynamický zákon je pouze statistický zákon popisující vlastnosti velkého počtu částic. V roce 1871 se stal prvním ředitelem dnes slavné Cavendishovy laboratoře v Cambridgi. Po Maxwellovi jsou kromě Maxwellových rovnic pojmenováy: Maxwellovo rozdělení, Maxwellův démon, jednotka magnetického toku, horský masiv na Venuši, mezera mezi Saturnovými prstenci a dalekohled JCMT (James Clerk Maxwell Telescope) pro infračervený obor. Existuje také Maxwellova nadace.

Planck, Max (1858–1947), viz sekce Kvantová teorie



Stefan, Jožef (1835–1893), slovinský fyzik, matematik a básník. Studoval matematiku a fyziku na Vídeňské univerzitě. Z Dulongova-Petitova zákona odvodil formuli pro celkový tok energie z absolutně černého tělesa. Z tohoto zákona odhadl povrchovou teplotu Slunce. Řešil také rozložení teploty při fázovém přechodu (Stefanův problém) a další úlohy na pomezí matematiky, fyziky a chemie. Jeho žákem byl Ludwig Boltzmann. Je po něm pojmenován Stefanův-Boltzmannův zákon, Stefanův tok a Stefanův problém.



Wien, Wilhelm (1864–1928), německý fyzik, jenž dostal Nobelovu cenu za fyziku pro rok 1911 za posunovací zákon pro absolutně černé těleso, který objevil v roce 1893. Tento zákon ukazuje, že vlnová délka maxima vyzařování klesá s teplotou tělesa. Teplejší tělesa tak vyzařují na kratších vlnových délkách než chladnější tělesa. Wien získal doktorát na Berlínské univerzitě v roce 1886 a brzo poté začal pracovat právě na problematice záření absolutně černého tělesa. Wien se pokusil o odvození intenzity vyzařování černého tělesa v závislosti na teplotě a byl úspěšný pro krátkovlnnou část spektra, v dlouhovlnné oblasti jeho vyzařovací zákon nebyl správný. Úplný zákon záření černého tělesa odvodil až Max Planck na základě předpokladu o kvantování energie záření, čímž položil základy kvantové teorie. Wien byl jmenován v roce 1899 profesorem na Giessenské univerzitě a v roce 1920 na Mnichovské univerzitě. Svými poznatky také přispěl k výzkumu katodových trubic generujících rentgenové záření.

Rejstřík pojmů

absolutní nula 125, 136, 141, 264, 270, 273
adiabatické přiblížení 68–70
adiabatický invariant 68
albedo 304
antičástice 126, 202, 205, 210, 214, 216
atraktor 86, 89
  bruselátor (2D, 4D) 90, 91
  Lorenzův 92
  podivný 90
bariéra a jáma 155
  Coulombova 131
  pravoúhlá 155–157
  trojúhelníková 164
barometrická formule 266
bifurkace 83
  Hopfova 85
bispinor 210, 217–218
Bellovy nerovnosti 236–239
Benoixonovo kritérium 90
Bohrův model 115
Bohrův magneton 321
bosony 197, 224, 226, 291–306
bra 351
brachystochrona 19, 31
Brillouinova zóna 162–163
bruselátor 90, 91
Curieova teplota 84, 324
časový vývoj 93, 102, 179–183
číslo
  vlastní, charakteristické 206, 224, 364–369
čtyřvektor 42, 99, 104, 201, 342–344
dipólový moment (dipól)
  elektrický 313
  magnetický 316
diferenciální forma 371–375
Diracova symbolika 348–370
Diracovo moře 216
disperze 101, 200, 203, 228, 309
dekoherence 231–233
délkový element 334
derivace 331, 358
derivace složené funkce 332
druhé kvantování 225–230
dynamická proměnná 117–125
elektron 176, 205, 218, 292, 295
elipsa 37, 53, 55, 69, 249, 345
energie
  disipace 61
  kinetická 23, 335
  potenciální 23, 28, 372
  tepelná 243, 273
  volná 245, 317
  záporná 53
  zobecněná 30, 35
entalpie 244
entropie 243, 258, 307, 310
entropická síla 311
EPR paradox 234–236
experiment
  Aharonův-Bohmův 187
  DAMA/Libra 193
  dvojštěrbinový 186
  KamLAND 185
  Machův-Zehnderův 190
  MINOS 185
  Sternův-Gerlachův 197–198
fázový
  objem 248–251
  portrét 76
  prostor 248, 250, 252
fázový přechod
  Curieův 324
  Kosterlitzův-Thoulessův 324
  prvního druhu 83
  druhého druhu 83–84
fermiony 224, 225, 227, 291
feromagnetikum 324–327
Feynmanovo zúžení (slash) 212
fluktuace 307
  energie 307, 308
  magnetizace 319
  rychlosti 308
foton 112, 113, 125, 190, 231–239, 298
Fourierova řada 359, 362, 370, 378
frekvence
  cyklotronní 45
  úhlová 37, 114, 183, 342
fugacita 290
funkce
  Airiho 165
  Besselova 164
  expanzní 306
  Hamiltonova 34, 71–73

kulová 176
Lagrangeova 20–23, 108, 219–222
Rayleighova disipační 61, 64
funkcionál 20, 22, 31
gravitace 34, 50, 56, 164, 295, 312
gyrace 45
Heisenbergovy relace neurčitosti 111, 115, 124–126, 128, 151
homogenita prostoru 31
hranice kvantového světa 135
hustota
energetických stavů 255, 260, 296
pravděpodobnosti 38, 143, 155, 251–255
hybnost 28
hypernáboj 199
chemická reakce 90–91, 94–95
index
kovariantní 340–342
kontravariantní 340–342
zvyšování a snižování 341
integrační faktor 81, 243, 374–375
integrál po drahách 189
interpretace
holografická 135
klasická 134
kodaňská 132–133
mnohosvětová 134
související s vědomím 135
statistická 120
inverzní úloha 63–66
izospin 27, 28, 198–199
izotropie prostoru 31
jáma
konečná 152–155
nesymetrická 131
nekonečná 150–152
pravoúhlá 131, 150, 152
sférická 131
symetrická 131
jev
Aharonův-Bohmův 187–189
Comptonův 113
Comptonův inverzní 113
dualizmus vln a částic 13, 110
fotoelektrický 13, 110, 112, 142
ohyb elektronů 113
tunelový 132, 155, 157
záření černého tělesa 111, 121, 303
Zeemanův 321
Ljapunova stabilita 86
Ljapunovův koeficient (exponent) 86
Keplerova úloha 50–55
ket 351
kompatibilita 117, 122–124
komutátor 120, 122, 168, 192, 201, 206, 215, 338, 356
konfigurace 18–18
konfigurační prostor 17
konstanta
Boltzmannova 258
Planckova 121
sluneční 304
Stefanova-Boltzmannova 303
Wienova 301
koeficient
odrazu 157
propustnosti 157
kvantový
ping-pong 164
rotátor 277
stav 117
kuželosečky 345
elipsa 345
hyperbola 346
parabola 347
kvantová interference 135, 183, 186
kvantové číslo
hlavní 176–178
izospin 27, 28, 198–199
magnetické 171
magnetické spinové 197
radiální 177
spin 197
vedlejší 171–172
kyvadlo 17, 24, 26, 31, 48, 67, 126
Lagrangeovy body 56–60
Landéův faktor 319
Larmorův poloměr 45, 70
Laueho-Langevinův ústav 165
Lieova algebra 336
obecně 337
strukturní koeficienty 338
limitní cyklus 86, 87, 90
LS vazba 197, 320
magnetická rezonance 322
magnetizace 316, 319
Machův-Zehnderův interferometr 190, 231–233
makrosvět 110, 118, 133, 135, 186
matice
C 214
Diracovy 208, 212–214
rozptylu 159
stability 76–80
γ^5 214–215
Σ 215
maticová mechanika 118, 147
mechanický systém 16

metoda potenciálu 81
metrika
  metrický tenzor 334, 342, 343
  Minkowského metrika 213
mikroskop
  elektronový 110, 113, 114
  elektronový holografický 189
  rastrovací tunelový (STM) 157–158
mikrosvět 110, 111, 117, 132
množina
  hustě pokrytá 89
  chaotická 89
  invariantní 89
  otevřená 88
  uzavřená 88
model (y)
  Bohrův planetární 114
  Heisenbergův 325
  Hubbardův 326
  Isingův 323
  Kronigův-Penneyův 160
  mřížový 323
  Pottsův 324
  t-J 327
moment hybnosti 28, 169
nedeterminizmus 111
nekomutativnost 111, 118, 157, 186, 356
nelineární dynamický systém 74–97
nerozlišitelné částice 223, 291
nestabilní
  ohnisko 77, 85, 96
  sedlo 77, 95
  uzel 77
normální uspořádání 229
nulové kmity 141
numerické řešení 40, 242, 261, 277, 285, 296, 309, 325
odchylka
  střední kvadratická 124
ohyb elektronů, viz jev
okolí bodu 88
operátor
  anihilační 144, 226, 291, 295, 326–327
  evoluční (čas. vývoje) 179
  funkce 353, 354, 367
  Hermitův 358
  hybnosti 129, 203, 205
  inverzní 355
  kreační 144, 224–226, 326
  Laplaceův 174, 175, 204,
  mocniny 353
  odchylky 124
  počtu částic 226
  polohy, souřadnice 129, 148
  posuvný 169
  projekční 359
  rychlosti 209
  sdružený 355
  spektrum 129–130, 138, 364, 368
  unitární 357
  výměny 223
  viriálu 193
oscilace neutrin 184–185
oscilátor
  anharmonický 282
  harmonický 36, 40, 69, 75, 125, 138
  klasický 270
  kvantový 138, 272
  nelineární 78
  sférický harmonický 132, 167, 177
  van der Polův 87
oscilující rovnováha 95
paprsek 118, 145, 352
parametr
  uspořádání 84
  skrytý 134, 231–239
partiční suma
  kanonická 260
  grandkanonická 288
Pfaffovy diferenciální formy 371–375
plyn
  dvouatomární 280
  ideální 263, 309
Poissonovy závorky 39, 102, 110, 121, 248
polarizace 103, 126, 234, 298, 314
pole
  elektromagnetické 103, 218
  kanonicky sdružené 102
  Kleinovo-Gordonovo 200
  potenciál 103–104
  skalární 98
poloosa 69, 345
polynom
  Hermitův 142, 276
  Laguerrův 204
  Legendreův 175
potenciál
  Coulombův 132, 167, 177
  definice 81
  dna koňakové láhve 82–84, 101
  efektivní 53, 57
  Gibbsův 246
  grandkanonický 246, 288–289, 292
  harmonický 36, 138
  chemický
  Morseův 274
  periodický 160
  sféricky symetrický 243, 264, 287, 293

skalární 98, 103
termodynamický 244
vektorový 103, 187, 342
pozitron 216
princip
Caratheodoryho 375
Hamiltonův 20, 70, 189
holografický 312
integrální 16
korespondence 120, 180, 191, 201, 209, 229
nejmenší akce 20, 189
Pauliho vylučovací 224–225
superpozice 118, 200, 231
problém
dvou těles 50, 55
ergodický 252
prostor
fázový 35, 248, 252, 365
Hilbertův 118, 129, 138, 149, 232, 352
k-prostor 163
komplexních *N*-tic 349
komplexních funkcí L^2 350
komplexních posloupností l^2 349
konfigurační 17, 35
lineární vektorový 336, 337, 340, 350
reálných *N*-tic 349
reálných trojic 348
unitární 348, 350–352
první diferenciál 244, 332
rapidita 195
reciproká mříž 163
relace
disperzní 200, 203, 228
neurčitosti 111, 115, 123, 126, 151
reprezentace 363
obsazovacích čísel 225, 291
skalární 173
spinorová 173
vektorová 173
x-reprezentace 174
rotace 194
rozdělení
Boltzmannovo 267, 294
Boseho-Einsteinovo 293
Fermiho-Diracovo 292
Gibbsovo (kanonické) 259, 311
grandkanonické 286–288, 311
Maxwellovo 308, 268–269
rozptyl 159
rovnice
Airiho 164
autonomní 74
Boltzmannova 259
Diracova 205–215
evoluční 93–97
Gibbsova-Helmholtzova 245, 246
Hamiltonova-Jacobiho 71–73
Hamiltonovy kanonické 33–40, 248, 253
Kleinova-Gordonova 200–205
Lagrangeovy 20
Lagrangeovy polní 98
logistická 96
Maxwellovy 23, 103–108
pohybová 16, 48, 55, 57, 61
pohybová Lorentzova 43, 107
Poissonovy 39
Schrödingerova 129, 139, 141, 150
Schrödingerova časová 181, 200, 205
sin-Gordonova 101
teplotní difúze 368
vlnová 99
Volterrova-Lotkova 96
rychlost
fázová 203
grupová 203
kvadratická 269
nejpravděpodobnější 269
plošná 17, 55
střední 269
úhlová 17, 57
zobecněná 17, 34, 35, 61
sdružení
Diracovo 212
Hermitovo 217, 355
nábojové 216–218
semigrupová podmínka 179
separatrisa 81
síla
Coriolisova 48–50, 57, 60
odstředivá 26, 48, 56–58, 114
tření 61, 65
skalární součin 330, 341, 348
soubor
fermionů 295
fotonů 298
Gibbsův kanonický 256–260
grandkanonický 286–290
souřadnice
kartézské 16
zobecněné 16, 23, 28, 67, 70, 102
spektrální teorie 364
spektrum
degenerované 169, 172, 177, 277
diskrétní 110, 118, 131
ekvidistantní 142, 151, 321
operátoru 129, 364, 368
pásové 160

spojité 131
spin 196–199
spinor 173, 208
spinová skla 325
spojitost 153, 156, 161, 179
stabilita
řešení 76
Ljapunova 86
stabilní
ohnisko 77, 85
uzel 77
střed 77
stacionární bod 76, 85, 90
stav systému
v kvantové teorii 117–118
v mechanice 18
Fockův 225
stopa matice 206–207, 214, 261
střední odchylka 124
stupeň volnosti 17, 251, 264, 275, 281
sumační konvence 330
susceptibilita
elektrická 314
magnetická 307, 316
symetrie
C 216
levopravá 27, 214
Lorentzova 27, 196
nábojové sdružení 217
rotační 27, 194, 196, 324
translační 28
U(1) 218
$U(1)_{loc}$ 221
systém
dravec a kořist 94
dvouhladinový 284
kvantový 248
temná hmota 193
tendence 18
tenzor
permeability 316
permitivity 315
teorém
Ehrenfestův první 191
Ehrenfestův druhý 191–192
ekvipartiční 264
Emmy Noetherové 27
Liouvillův 253–255, 286
o viriálu 191–193
tok pravděpodobnosti 202, 210, 222
Tontiho podmínky 64–65
trajektorie
fázová 35, 67, 69, 89, 90
reálná 18
virtuální 18
transformace
Fourierova 127, 163, 201
kanonická 70–73
Laplaceova 262
Legendreova duální 34
Lorentzova 195
rotační 194
zrcadlení 194
úplná množina pozorovatelných 117, 226
váhový faktor 251, 255, 295, 303
vakuum 126, 216
variace (isochronní) 20–21, 71, 98
variance 124, 307–309
vazba 17, 21
chemická 158
věta
Lagrangeova o přírůstku 331
o existenci integračního faktoru 374
o pěti ekvivalencích 371
o spektrálním rozvoji 367
první a druhá termodynamická 243
vlastní číslo 74, 118, 121, 142, 364–366
vlastní vektor 364
vodíkový atom 167, 177, 204
volný pád 49, 73
vzdálenost
dvou bodů 88
bodu a množiny 88
zákon(y)
akce a reakce 50
Curieův 322
Keplerovy 55
Planckův vyzařovací 298
Stefanův-Boltzmannův 302
Wienův posunovací 301
zachování energie 29
zachování hybnosti 28
zachování momentu hybnosti 28
záření černého tělesa, viz jev

Literatura

Nahrávky přednášek

server www.aldebaran.cz, sekce studium; portál www.vsprednasky.cz

Navazující učebnice

[1] P. Kulhánek: *Úvod do teorie plazmatu*; AGA 2011, ISBN: 978-80-904582-2-2, online verze (2017): http://www.aldebaran.cz/studium/tpla.pdf

Teoretická mechanika

[2] M. Brdička, A. Hladík: *Teoretická mechanika*; Academia, Praha 1987

[3] J. Kvasnica a kol.: *Mechanika*; Academia, Praha 1988

[4] L. D. Landau, J. M. Lifšic: *Úvod do teoretickej fyziky 1* (mechanika, elektrodynamika); ALFA, Bratislava 1980

[5] D. Halliday, R. Resnick, J. Walker: *Fyzika; Část 1: Mechanika*; VUTIUM/Prometheus, Brno 2000

[6] W. Greiner: *Classical Mechanics – Systems of Particles and Hamiltonian Dynamics*; Second edition, Springer, 2010

[7] E. Tonti: *Variational Formulations of Nonlinear Differential Equations*; Bull. Sciences Acad. R. de Belgique (1969) pp 137–165, 262–278

[8] N. J. Cornish: *The Lagrange Points*; Montana State University/NASA, 1999; online: http://www.physics.montana.edu/faculty/cornish/lagrange.pdf

[9] T. Münch: *The Three-Body Problem and the Lagrangian Points*; Umeå Universitet Institutionen för Fysik, 2008; online: http://www.tp.umu.se/space/Proj_08/T_Munch.pdf.

[10] M. Robnik: *Theory of Adiabatic Invariants*; Socrates Lecture Course at the Physics Department, University of Marburg, Germany, 2004; online: http://www.camtp.uni-mb.si/socrates/marburg2004/robnik.pdf

[11] S. D. Mathur: *The Hamilton-Jacobi Equation*; Ohio State University, 2007. online: http://www.physics.ohio-state.edu/~mathur/821hj.pdf

[12] P. Kulhánek, J. Maloch: *Inverse Variational Problem for the Rail Plasma Accelerator*; Czech. J. Phys. B37 (1987) 561

[13] E. W. Weisstein: *Lorenz Attractor*; MathWorld – A Wolfram Web Resource; online: http://mathworld.wolfram.com/LorenzAttractor.html

[14] J. Horák, L. Krlín, A. Raidl: *Deterministický chaos a podivná kinetika*; Academia, Praha 2007

Kvantová fyzika

[15] J. Formánek: *Úvod do kvantové teorie I.,II.*; Academia, Praha 2004

[16] J. Formánek: *Úvod do relativistické kvantové mechaniky a kvantové teorie pole*; Karolinum, Praha 2000

[17] R. P. Feynman, R. B. Leighton, M. Sands: *Feynmanovy přednášky z fyziky*, díl 3/3, Fragment, 2006

[18] M. Dušek: *Koncepční otázky kvantové teorie*; Vydavatelství Univerzity Palackého, Olomouc 2002, 238 stran

[19] T. Hey, P. Walters: *Nový kvantový vesmír*; Argo/Dokořán 2003

[20] J. Novotný a kol.: *Základy teorie relativity*; Masarykova Univerzita 2006, online: http://is.muni.cz/elportal/estud/prif/ps06/f5010/zaklady_TR.pdf

[21] P. Cejnar, M. Dušek: *Kvantové hlavolamy I až V*; Vesmír 77/3–7 (1998), online: http://muj.optol.cz/dusek/clanky/popular.htm

[22] B. Simons: *Advanced Quantum Mechanics*; University of Cambridge Course, Cavendish Lab. 2009; online: http://www.tcm.phy.cam.ac.uk/~bds10/aqp.html

[23] Ch. Kittel: *Introduction to Solid State Physics*; Willey, New York 1996

[24] J. Singleton: *Band theory and electronic properties of solids*; Oxford University Press, 2001

[25] E. W. Weisstein: *Airy Functions*; MathWorld – A Wolfram Web Resource, online: http://mathworld.wolfram.com/AiryFunctions.html

[26] M. V. Fedoryuk: *Airy equation; Encyclopedia of Mathematics*; online: http://www.encyclopediaofmath.org/index.php/Airy_equation

[27] T. Jenke et al.: *Realization of a gravity-resonance-spectroscopy technique*; Nature Physics 7, 468–472 (2011)

[28] H. Batelaan, A. Tonomura: *The Aharonov–Bohm effects: Variations on a subtle theme*; Physics Today **62**/9 38 (2009)

[29] J. S. Bell: *Speakable and unspeakable in quantum mechanics*, Cambridge University Press, 1987

[30] J. A. Wheeler, W. H. Zurek: *Quantum Theory and Measurement*; Princeton University Press, 1983

[31] A. Einstein, B. Podolsky, N. Rosen: *Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality be Considered Complete?*; Physical Review **47** (1935) 777–780

[32] Vojtěch Hála: *Kvantová kryptografie*; Aldebaran bulletin 14/2005; online: http://aldebaran.cz/bulletin/2005_14_kry.php

[33] Petr Kulhánek: *Kvantové počítače*; Aldebaran bulletin21/2003; online: http://www.aldebaran.cz/bulletin/2003_21_qua.php

[34] Serge Haroche: *Manipulace s fotony v dutině a zkoumání hranice mezi klasickým a kvantovým světem*; Čs. čas. fyz. **64** (2014)

Statistická fyzika

[35] J. Kvasnica: *Termodynamika*, SNTL, Praha 1965

[36] J. Kvasnica: *Statistická fyzika*, Academia, Praha 1998

[37] T. Opatrný: *Kapitoly z termodynamiky a statistické fyziky*; Univerzita Palackého, 2009; online: http://www.ktf.upol.cz/tom/bookex1.pdf

[38] M. Varady: *Statistická fyzika*; UJEP 2007; online: http://physics.ujep.cz/~mvarady/skripta_sf.pdf

[39] F. Bloch, J. Dirk Walecka: *Fundamentals of Statistical Mechanics*; World Scientic, 2000

[40] M. Dvorak, T. Ohno: *Liouville's Theorem*; PHGN 505 Report, Colorado School of Mines 2011; online http://inside.mines.edu/~tohno/teaching/PH505_2011/liouville_dvorak.pdf

[41] P. Kubáček, Z. Michaličková: *Základy fyzikální chemie*; Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity, 2014; online: https://is.muni.cz/do/rect/el/estud/prif/js11/fyz_chem/web/index.htm

[42] Stuart Mackenzie: *Molecular Vibrational Spectroscopy*; University of Oxford, 2011; online http://mackenzie.chem.ox.ac.uk/teaching/Molecular Vibrational Spectroscopy.pdf

[43] L. Kadanoff: *Bosons and fermions*; Lecture Notes, Perimeter Institute statistical physics, 2009; online http://jfi.uchicago.edu/~leop/Physics 352/PSI course lectures/

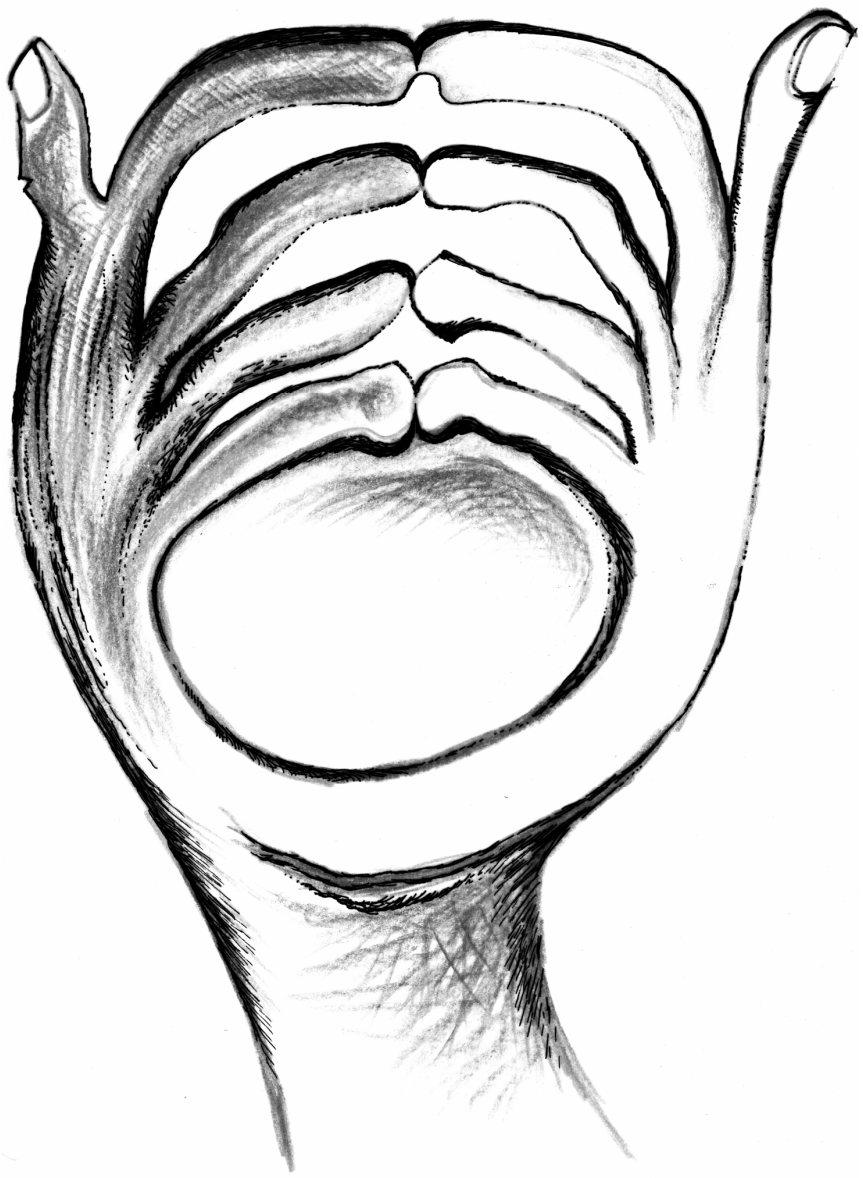
[44] M. Towler: *Exchange, antisymmetry and Pauli repulsion*; TCM Group, Cavendish Laboratory, University of Cambridge; 2010; online http://www.tcm.phy.cam.ac.uk/~mdt26/PWT/lectures/towler_pauli.pdf

[45] J. P. Sethna. *Statistical Mechanics*: Entropy, Order Parameters, and Complexity, Oxford University Press, 2008

[46] E. P. Verlinde: On *the Origin of Gravity and the Laws of Newton*; arXiv:1001.0785 [hep-th], 2010; online: https://arxiv.org/abs/1001.0785

[47] R. Bauerschmidt: *Ferromagnetic spin systems*; Harvard 2016; online: http://www.math.harvard.edu/~brt/doc/spin.pdf

Příloha aneb o čem byste měli vědět





FAKULTA
ELEKTROTECHNICKÁ
ČVUT V PRAZE

www.fel.cvut.cz
facebook.com/CVUTFEL

SPOJUJEME ELEKTROTECHNIKU A INFORMATIKU

Věděli jste, že v doktorském studiu máte v rámci programu Elektrotechnika a informatika Fakulty elektrotechnické ČVUT v Praze na výběr celkem 16 oborů?

Vaší specializací se může stát:

Akustika
Elektrické stroje, přístroje a pohony
Elektroenergetika
Elektronika
Elektrotechnologie a materiály
Fyzika plazmatu
Informatika a výpočetní technika
Matematické inženýrství
Měřicí technika
Provoz a řízení letecké dopravy
Radioelektronika
Řídicí technika a robotika
Řízení a ekonomika podniku
Telekomunikační technika
Teoretická elektrotechnika
Umělá inteligence a biokybernetika

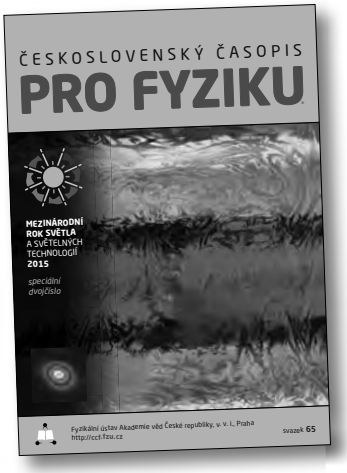
Podrobnější informace naleznete na stránce: www.fel.cvut.cz/studyphd

ČESKOSLOVENSKÝ ČASOPIS

PRO FYZIKU

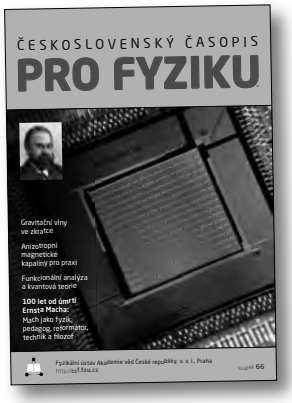
vědecko-populární časopis českých a slovenských fyziků

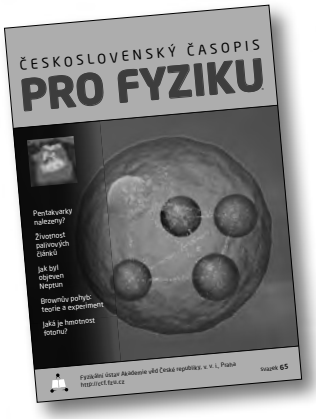
ČČF je časopisem nejen pro fyzikální badatele, studující fyziky, pedagogické pracovníky vyučující fyziku, ale i pro techniky, matematiky, astronomy, přírodovědce jiných oborů a poučené laiky.

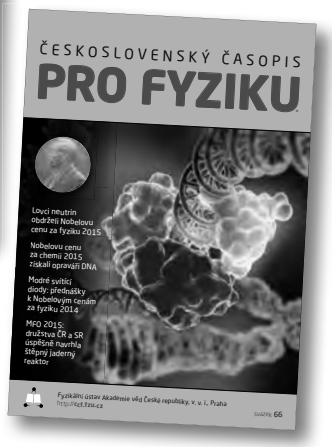


Mít přehled ve světě fyziky...









Recenzovaný neimpaktovaný dvouměsíčník

http://**ccf.fzu.cz**

Objednávky: http://**ccf.fzu.cz**, e-mail: **cscasfyz@fzu.cz**, tel.: +420 **266 052 152**.

Aktuální čísla zakoupíte i v prodejnách v Praze *(Národní třída 7, Václavské nám. 34, Na Florenci 3, Technická 6, Celetná 18, Žitná 25)*, Brně *(nám. Svobody 13)*, Ostravě *(Zámecká 2)* a v Olomouci *(Biskupské nám. 1)*.

SOUSTŘEDĚNÍ

každým rokem pořádáme pro studenty Astrosoustředění s přednáškami a pozorováním

VÝUKA

členové spolku Aldebaran se podílejí na výuce na středních i vysokých školách

EXPEDICE

spolek Aldebaran pořádá pravidelně expedice za zatměními Slunce, polárními zářemi a do zajímavých vědeckých pracovišť

SERVER

18 let kvalitních informací a novinek z astronomie a fyziky a fórum pro výměnu názorů

NAKLADATELSTVÍ

recenzované publikace a materiály z astronomie a fyziky

ALDEBARAN

www.aldebaran.cz

Neziskovky, mluvíte o sobě tak, abyste lidi zajímaly?

Přicházejí za vámi?
Přispívají?
Pomáhají?
Spolupracují?
Mají vás rádi?

ujasnit sdělení

plánovat

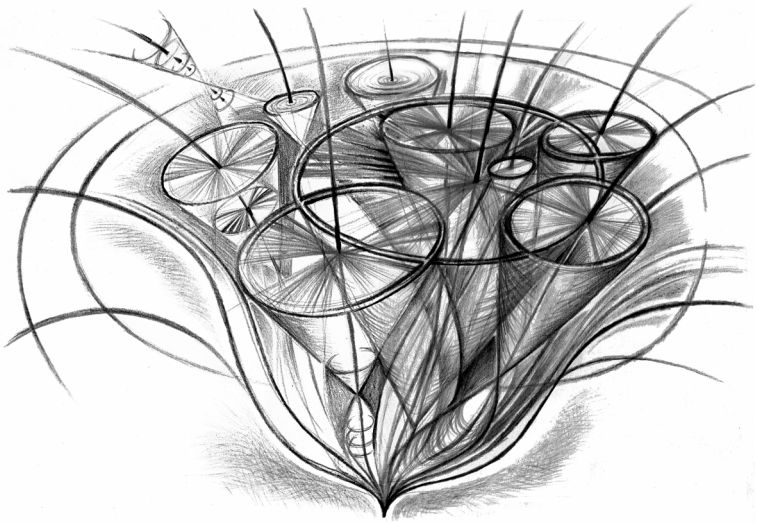
Komunikace je řemeslo. Dá se naučit.

poznat cílovky

určit priority

vyhodnocovat, zlepšovat se

Věra Ondřichová
PR pro neziskovky
projekty, poradenství, kurzy
vera@ondrichova.cz
+420 775 060 819



Petr Kulhánek
Vybrané kapitoly z teoretické fyziky

Žádná část této publikace nesmí být publikována a šířena žádným způsobem
a v žádné podobě bez výslovného svolení autora a sdružení AGA.

Autor: Prof. RNDr. Petr Kulhánek, CSc.
Odborná recenze: Ing. et Ing. Petr Endel
Grafika a obálka: Ing. arch. Ivan Havlíček
Formát: 165×235 mm, 416 stran, 203 obrázků
Nakladatelství: AGA (Aldebaran Group for Astrophysics)
Nahrávky přednášek: Daniel Handl, aldebaran.cz, vsprednasky.cz
Vydání: upravené první, druhý dotisk, prosinec 2017, Praha
Aktualizace elektronické verze: 12. října 2019
Tisk: EUROPRINT a.s.

ISBN 978-80-904582-8-4