

Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta

FOF - STÁTNICE

Kolektiv autorů

Praha 2013

Obsah

1	Mechanika hmotného bodu a soustav hmotných bodů	7
1.1	Základní kinematické veličiny	7
1.2	Newtonovy pohybové zákony	7
1.3	Inerciální soustavy	8
1.4	První a druhá impulsová věta	9
1.5	Harmonický oscilátor, vynucené kmity	9
1.6	Keplerovy zákony	10
1.7	D'Alembertův princip	11
1.8	Lagrangeovy rovnice 2. druhu	12
1.9	Hamiltonovy kanonické rovnice	12
2	Kinematika a dynamika tuhého tělesa	15
3	Mechanika kontinua	17
3.1	Tenzor napětí	17
3.2	Tenzor deformace	17
3.3	Hookův zákon	18
3.4	Rovnice struny + řešení	19
3.4.1	Odvození	19
3.4.2	Řešení	20
3.5	Pohybová rovnice ideální tekutiny	21
3.6	Rovnice kontinuity	22
3.7	Bernoulliho rovnice	23
3.8	Viskózní tekutiny a Navier-Stokesovy rovnice	24
3.9	Laminární a turbulentní proudění	24
4	Struktura látek	27
4.1	Skupenství a atomová struktura látek	27
4.1.1	Přechody mezi skupenstvími	27
4.1.1.1	Pevná látka – kapalina	27
4.1.1.2	Kapalina - plyn	28
4.1.1.3	Pevná látka – plyn	28
4.1.1.4	Přechod k plazmatu	28
4.1.2	Atomová struktura pevných látek	28
4.1.2.1	Prvky symetrie	29
4.1.2.2	Základní buňka	30
4.1.2.3	Krystalografické směry a roviny	30
4.1.2.4	Mříže	31
4.1.2.5	Krystalové soustavy	31
4.1.2.6	Nejtěsnější uspořádání	34
4.1.2.7	Poruchy krystalových struktur	34
4.1.3	Difrakce	35
4.1.3.1	Ewaldova konstrukce, Braggův zákon a Laueho podmínky	36
4.2	Vazby mezi atomy	37

4.2.1	Typy vazeb	38
4.3	Brownův pohyb	40
5	Základy termodynamiky a statistické fyziky	43
5.1	Stavové veličiny a rovnice	43
5.2	Hlavní věty termodynamiky	44
5.2.1	První věta termodynamiky	44
5.2.2	Druhá věta termodynamiky	44
5.2.3	Třetí věta termodynamiky	45
5.3	Carnotův cyklus	45
5.4	Ideální plyn	46
5.5	Termodynamické potenciály	46
5.6	Fázový prostor a základní rozdělení	47
5.7	Liouvilleova rovnice	48
6	Základy kinetické teorie	51
6.1	Maxwell-Boltzmannovo rozdělení, tlak, teplota, vnitřní energie	51
6.2	Transportní jevy	52
6.3	Molekulární jevy v kapalinách	53
6.4	Avogadrova konstanta	54
7	Základní elektromagnetické veličiny a jejich měření	55
8	Maxwellovy rovnice a jejich základní důsledky	57
9	Základní principy speciální teorie relativity	59
9.1	Otázka éteru a Michelsonův-Morleyův experiment	59
9.2	Výchozí principy STR a Lorentzova transformace	61
9.3	Minkowského prostoročas	63
9.4	Relativistická pohybová rovnice, ekvivalence hmotnosti a energie	66
9.5	Maxwellovy rovnice ve čtyřrozměrném tvaru	68
10	Elektrické obvody stacionární, kvazistacionární a střídavé	73
10.1	Ustálený a neustálený stav	73
10.2	Elektrický obvod s rezistorem, cívkou a kapacitou	74
10.2.1	Obvod s rezistorem	74
10.2.2	Obvod s cívkou (RL obvod)	75
10.2.3	Obvod s kapacitou (RC obvod)	76
10.2.4	RLC obvody	77
10.3	Metody řešení elektrických obvodů	77
10.4	Kirchhoffova pravidla	78
10.4.1	1. Kirchhoffův zákon	78
10.4.2	2. Kirchhoffův zákon	79
10.4.3	Kirchhoffova pravidla v komplexní symbolice	79
10.5	Jouleův zákon	80
11	Elektromagnetické vlny	81

12 Optika	83
12.1 Interferenční a ohybové jevy	83
12.2 Koherence světla	85
12.3 Optické interferometry	87
12.4 Fresnelův a Fraunhoferův ohyb	87
12.5 Braggova rovnice	88
12.6 Základy holografie	89
12.7 Šíření světla v anizotropním prostředí, dvojlom	89
12.8 Laser	91
12.9 Základy vláknové a nelineární optiky	91
12.10 Geometrická optika	93
12.11 Zrcadla, čočky, zobrazovací rovnice	94
12.12 Optické zobrazovací přístroje	95
12.13 Optická spektroskopie, mřížka	96
12.14 Spektrum záření černého tělesa	96
13 Variační formulace fyzikálních zákonů	99
13.1 Matematický úvod a základní motivace	99
13.2 Hamiltonův variační princip	99
13.3 Vztah mezi mechanikou a geometrickou optikou	100
13.4 Hamiltonův princip pro soustavy s nekonečně mnoha stupni volnosti	101
14 Stavba atomů, molekul a kondenzovaných látek	105
14.1 Stacionární stavy atomů a molekul	105
14.1.1 Atomy	105
14.1.2 Molekuly	105
14.2 Elektrické a magnetické momenty atomů a molekul	106
14.3 Elektronové stavy v kondenzovaných látkách	107
14.3.1 Model volných elektronů	107
14.4 Pásová struktura a elektrická vodivost pevných látek	108
14.5 Vodivost kapalin a plynu	110
14.5.1 Vodivost kapalin	110
14.5.2 Vodivost plynů	111
14.6 Dielektrické a magnetické vlastnosti látek	113
14.6.1 Dielektrika	113
14.6.2 Magnetické vlastnosti látek	115
15 Experimentální základy kvantové hypotézy	117
15.1 Historický úvod	117
15.2 Planckova kvantová hypotéza	118
15.3 Fotoelektrický jev, foton	118
15.4 Částicové vlastnosti světla a vlnové vlastnosti částic	119
15.5 De Broglieova hypotéza	120
16 Formalismus kvantové teorie	123
16.1 Postuláty kvantové mechaniky	123
16.1.1 Postulát o vlnové funkci	123
16.1.2 Postulát o operátorech	124
16.1.3 Postulát o kvantování	125

16.1.4	Postulát o redukci vlnové funkce	126
16.1.5	Postulát o časové Schrödingerově rovnici	127
16.1.6	Nečasová Schrödingerova rovnice	127
16.1.6.1	Vlastnosti stacionárních stavů	128
16.2	Relace neurčitosti	128
16.2.1	Odvození	129
16.2.2	Heisenbergovy relace neurčitosti	130
16.3	Integrály pohybu	130
16.4	Reprezentace měřitelných veličin	131
16.4.1	Teorie reprezentací	131
16.4.2	Souřadnicová reprezentace	132
16.4.3	Impulzová reprezentace	132
16.4.4	Energetická reprezenace	133
16.5	Zdroje	133
17	Aplikace kvantové mechaniky	135
17.1	Volná částice	135
17.2	Částice v potenciálové jámě	137
17.3	Tunelový jev	140
17.4	Lineární harmonický oscilátor (LHO)	141
17.5	Atom vodíku	143
18	Jaderné záření	149
18.1	Interakce jaderného záření s prostředím a metody jeho detekce	149
18.1.1	Těžké částice	150
18.1.2	Lehké částice	150
18.1.3	Fotony	151
18.1.4	Vliv na lidský organismus	151
18.1.5	Detektory částic	152
18.1.5.1	Plynové ionizační komory	152
18.1.5.2	Další dráhové detektory	152
18.1.5.3	Polovodičové detektory	153
18.1.5.4	Scintilační detektory	153
18.1.5.5	Kalorimetry	153
18.2	Spektrometrie jaderného záření	154
18.3	Umělé zdroje jaderného záření	155
18.3.1	Lékařské vyšetření	155
18.3.2	Urychlovače částic	155
18.3.2.1	Základní principy a dělení	155
18.3.2.2	Lineární urychlovače	156
18.3.2.3	Kruhové urychlovače	157
18.3.3	Jaderné elektrárny	159
19	Atomové jádro	161
19.1	Základní vlastnosti a charakteristiky atomového jádra	163
19.2	Vazbové síly, vazbová energie jader	169
19.3	Radioaktivita	171
19.4	Jaderná reakce	175

20 Subjaderná fyzika	179
20.1 Základní skupiny částic	179
20.1.1 Bosony a fermiony	179
20.1.2 Intermediální částice	179
20.1.2.1 Foton	179
20.1.2.2 Bosony W^\pm, Z^0	179
20.1.2.3 Gluon	179
20.1.2.4 Higgsův boson	180
20.1.2.5 Graviton	180
20.1.3 Leptony	180
20.1.4 Hadrony	181
20.1.4.1 Mezony	181
20.1.4.2 Baryony	182
20.2 Částicové interakce	185
20.2.1 Gravitační interakce	185
20.2.2 Elektromagnetická interakce	185
20.2.3 Slabá interakce	185
20.2.4 Silná interakce	185
20.3 Antičástice	186
20.4 Zákony zachovania v mikrosвете	186

1. Mechanika hmotného bodu a soustav hmotných bodů

1.1 Základní kinematické veličiny

Hmotný bod (HB) je matematická abstrakce, která modeluje pouze tři translační stupně volnosti těžiště tělesa bez uvažování jakýchkoliv dalších. Proto je popis pohybu dán časovou závislostí trojice katézských souřadnic sdružených do polohového vektoru $\vec{r} = \vec{r}(t)$. Tato spojitá funkce času $\vec{r}(t)$ je nazývána *trajektorie*. *Průměrná rychlost* tělesa mezi časy t_1, t_2 je dána následovně:

$$\vec{v}_{12} = \frac{\vec{r}(t_1) - \vec{r}(t_2)}{t_1 - t_2} \quad (1.1)$$

Okamžitá rychlost v t_1 je dána limitou $t_2 \rightarrow t_1$ respektive časovou derivací \vec{r} . *Zrychlení* \vec{a} je definováno jako časová derivace rychlosti. Zrychlení lze rozložit na normálovou \vec{a}_n a tečnou \vec{a}_t složku:

$$\vec{a}_t = (\vec{a} \cdot \vec{e}_v)\vec{e}_v, \quad \vec{a}_n = \vec{a} - \vec{a}_t = \frac{v^2}{R}\vec{e}_r \quad (1.2)$$

Kde R je poloměr křivosti trajektorie a \vec{e}_r vektor směřující ke středu oskulační kružnice.

Pokud je velikost tečného zrychlení nulová, rychlost se nemění a jedná se o *rovnoměrný* pohyb, pokud je velikost normálového zrychlení nulová, je směr pohybu konstantní a jedná se o *přímočarý* pohyb.

Hybnost HB definujeme následovně: $\vec{p} = m\vec{v}$, moment hybnosti vzhledem k nějakému bodu takto: $\vec{L} = \vec{p} \times \vec{r}$.

1.2 Newtonovy pohybové zákony

Newtonovy zákony zní:

1. Těleso setrvává v klidu nebo v rovnoměrném přímočarém pohybu, dokud není nuceno vnějšími vlivy (působením jiného tělesa) tento svůj stav změnit.
2. Síla \vec{F} působící na těleso je úměrná součinu jeho hmotnosti a zrychlení \vec{a} , které mu uděluje.
3. Každá akce vyvolává reakci stejné velikosti a opačného směru, aneb vzájemná silová působení dvou těles jsou stejně veliká a opačně orientovaná.

Zákony však v tomto tvaru platí pouze v inerciální souřadné soustavě. Newtonovy zákony tedy implicitně definují tři pojmy: *inerciální souřadný systém (ISS)*, ve kterém izolovaná částice zůstává v rovnoměrném přímočarém pohybu, *sílu*, kterážto nějakým způsobem charakterizuje ono „působení jiného tělesa“, a *hmotnost*, míru odporu ke zrychlení. Tyto zákony jsou tedy i *rámecem* pro formulování fyziky, který se velmi dobře osvědčil.

S pojmem síly jsou spojeny další fyzikální veličiny. První z nich je *moment síly* vůči nějakému bodu

$$\vec{M} = \vec{F} \times \vec{l} \quad (1.3)$$

kde \vec{l} je vektor relativní vzdálenosti působení síly od bodu. Přířímým výpočtem lze ukázat, že z druhého Newtonova zákona plyne:

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{M} \quad (1.4)$$

Další je impuls:

$$\int_{t_1}^{t_2} \vec{F} dt = \vec{p}_2 - \vec{p}_1 \quad (1.5)$$

Diferenciál práce dW je definován

$$dW = \vec{F} \cdot d\vec{r} \quad (1.6)$$

kde $d\vec{r}$ je nějaký element dráhy podél které síla \vec{F} působí. *Kinetická energie* E_k je pak práce, která by musela být vykonána pro urychlení tělesa z nulové rychlosti:

$$E_k = \int_{\gamma} \vec{F} \cdot d\vec{r} = \int_{\gamma} m\vec{a} \cdot \frac{d\vec{r}}{dt} dt = m \int_{\gamma} \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} v^2 \right) dt = \frac{1}{2} m v_f^2 \quad (1.7)$$

Pokud navíc na hmotný bod působí síla, jíž vykonaná práce nezávisí na dráze, lze definovat potenciální energii $E_p(\vec{r})$ jako funkci polohy. E_p je pak definována jako dráhový integrál silového pole z libovolného pevně zvoleného bodu v prostoru do \vec{r} . Takové pole je nazýváno *konzervativní*. Ekvivalentní podmínka pro nezávislost dráhového integrálu je *nevírovost* silového pole v dané (jednoduše souvislé) oblasti:

$$\nabla \times \vec{F} = 0 \quad (1.8)$$

Síla je pak vyjádřitelná jako $-\nabla E_p$.

Lze ukázat, že součet potenciální a kinetické energie nazvaný *celková mechanická energie* se nemění, pokud jsou všechna silová pole v systému konzervativní.

1.3 Inerciální soustavy

Newton ve své době definoval jakýsi absolutní inerciální systém za pomoci stálic. Souřadné systémy spjaté se Zemí jsou inerciální jen přibližně, protože Země se otáčí s relativně malou, ale nenulovou úhlovou rychlostí.

Síly definované Newtonovým zákonem se nazývají *pravými silami*, protože vystihují fyzikální interakci. Pokud je ale zaveden do rovnic pohybu člen způsobující zrychlení pohybu vůči neinerciálnímu systému, ale ne vůči ISS, mluvíme o silách *zdánlivých*.

Speciálně pro soustavu otáčející se vůči ISS s rovnoměrnou úhlovou rychlostí ω vůči ose z lze z transformačních vztahů odvodit dvě zdánlivé síly: *Coriolisovu sílu* \vec{F}_C a *odstředivou sílu* \vec{F}_O :

$$\vec{F}_C = (2m\omega v_2, -2m\omega v_1, 0), \quad \vec{F}_O = (m\omega^2 x_1, m\omega^2 x_2, 0) \quad (1.9)$$

Kde x_1, x_2, v_1, v_2 jsou x-ové a y-ové souřadnice a rychlosti vůči korotující bazi. V případě Země se součet odstředivé a gravitační síly nazývá síla *tíhová*.

1.4 První a druhá impulsová věta

Pokud uvažujeme soustavu hmotných bodů, často mezi nimi uvažujeme také síly a vazby. Pokud máme N hmotných bodů a k vazeb, má systém $3N - k$ stupňů volnosti. Speciálně pokud požadujeme konstantní vzdálenosti mezi každými dvěma body jedná se o *tuhou soustavu*, která má pouze 6 stupňů volnosti - 3 translační a 3 rotační. Spojitá obdoba tuhé soustavy je *tuhé těleso*. Tuhá soustava a tuhé těleso zanedbává změny rozložení hmoty či deformaci při libovolně velikých působících silách.

Pro soustavu HB definujeme *těžiště* nebo též *hmotný střed*, jehož polohový vektor je dán:

$$\vec{r}_S = \frac{\sum_i^N m_i \vec{r}_i}{\sum_i^N m_i} \quad (1.10)$$

První impulsová věta zní: *časová derivace celkové hybnosti soustavy \vec{P} je rovna výslednici \vec{F}_E vnějších sil působících na soustavu*. Tedy:

$$\frac{d\vec{P}}{dt} = \vec{F}_E \quad (1.11)$$

To vyplývá z třetího Newtonova zákona, protože každá *vnitřní* síla má svůj opačný ekvivalent a tudíž se při sčítání do výslednice celkové změny hybnosti vynulují.

Ekvivalentní je *věta o pohybu hmotného středu* soustavy, která je analogická impulsové pouze s celkovou hmotností M a zrychlením těžiště celkové soustavy \vec{a}_T na levé straně rovnice. Tyto věty ospravedlňují použití abstrakce hmotného bodu i pro větší tělesa.

Pokud předpokládáme, že vzájemné síly \vec{F}_{ab} dvou bodů a a b jsou ve směru jejich relativního polohového vektoru \vec{r}_{ab} , pak platí i druhá věta impulsová: *časová derivace celkového momentu hybnosti soustavy hmotných bodů \vec{L}_c je rovna výslednému momentu vnějších sil \vec{M}_E působících na soustavu (vzhledem k témuž bodu)*. Tedy:

$$\frac{d\vec{L}_c}{dt} = \vec{M}_E \quad (1.12)$$

1.5 Harmonický oscilátor, vynucené kmity

Uvažujeme jednorozměrný pohyb působený silou $F = -kx$ kde k může být například tuhost pružiny a x výchylka z rovnovážné polohy. Rovnice pohybu pak jsou:

$$m\ddot{x} = -kx \quad (1.13)$$

Kde tečka značí časovou derivaci. Tato lineární diferenciální rovnice se může řešit například pomocí charakteristického polynomu a má řešení:

$$A \sin(\omega_0 t + \phi) \quad (1.14)$$

Kde $\omega_0 = \sqrt{k/m}$ a A, ϕ jsou konstanty závislé na počátečních podmínkách. Pokud navíc přidáme třecí sílu úměrnou rychlosti, dostává rovnice tvar:

$$\ddot{x} + 2\delta\dot{x} + \omega_0^2 x = 0 \quad (1.15)$$

Opět řešením charakteristické rovnice dostaneme pro $\delta < \omega_0$:

$$x = A \sin(\omega t + \phi) e^{-\delta t} \quad (1.16)$$

Kde $\omega = \sqrt{\delta^2 - \omega_0^2}$. Dané řešení odpovídá *tlumeným harmonickým kmitům*. Amplituda výchylky se exponenciálně snižuje, nicméně výchylka projde asymptoticky nekonečněkrát nulou.

Speciálně pro $\delta = \omega_0$ se jedná o *mezí aperiodický pohyb* popsaný rovnicí:

$$x = e^{-\delta t}(B + Ct) \quad (1.17)$$

Výchylka v tom případě prokmitne nulu pouze jednou a pak dojde ke zhruba exponenciálnímu útlumu. Pokud je pak $\delta = \omega_0$ jedná se o součet dvou prostých exponenciál bez jediného průsečíku nulou.

V případě nucených kmitů je navíc systém buzen periodickou silou a rovnice získává nehomogenní tvar:

$$\ddot{x} + 2\delta\dot{x} + \omega_0^2 x = S \sin(\Omega t + \Phi) \quad (1.18)$$

Obecné řešení této rovnice je dáno součtem homogenního a parikulárního řešení. Ansatzem $x_p = D \sin(\Omega t + \psi)$ opravdu získáváme přímým výpočtem parikulární řešení. Další členy homogenního řešení ovšem exponenciálně ubývají, proto je po vyrovnání zanedbáváme.

Výchylka D však není libovolná a z rovnic pohybu musí platit:

$$D = \frac{S}{\sqrt{(\omega_0^2 - \Omega^2)^2 + 4\delta^2\Omega^2}} \quad (1.19)$$

Výchylka má vůči frekvenci buzení maximum v $\Omega = \Omega_R = \sqrt{\omega_0^2 - 2\delta^2}$, kdežto frekvenci se říká *rezonanční*. Závislost D na budící frekvenci Ω definuje *rezonanční křivku*, která má pro Ω_R reálné rezonanční pýk, pro Ω_R imaginární žádný pýk nemá.

1.6 Keplerovy zákony

Na základě pozorování Johannes Kepler formuloval 3 zákony pro pohyby planet. Ty lze odvodit na základě Newtonových zákonů a předpisu pro gravitační sílu:

$$\vec{F} = -G \frac{mM}{r^2} \vec{e}_r, V = -G \frac{Mm}{r} \quad (1.20)$$

Kde m je hmotnost HB, M hmotnost velmi hmotného tělesa $M \gg m$ (Slunce), G gravitační konstanta a \vec{r} vzdálenost od velmi hmotného tělesa (Slunce).

Lze ukázat, že pohyb v tomto poli je nutně rovinný a proto v této rovině můžeme zavést polární souřadnice r, ϕ . Navíc se zachovává moment hybnosti kolmý na rovinu pohybu $L = mr^2\dot{\phi}$. Pokud pak zavedeme substituci $r(t) = \frac{1}{u(\phi(t))}$ dostáváme z rovnic pohybu tzv. *Binetův vzorec*:

$$\frac{d^2u}{d\phi^2} + u = \frac{-GMm^2}{L^2} \quad (1.21)$$

Což pro r vede na rovnici kuželosečky:

$$r = \frac{p}{1 + \epsilon \cos(\phi)} \quad (1.22)$$

S rostoucím parametrem $\epsilon > 0$ získáváme postupně kružnici, elipsu (vázané orbity), parabolu (mezní úniková) a hyperbolu (úniková). To se shoduje s prvním Keplerovým zákonem, který říká: *Planety se pohybují po elipsách málo odlišných od kružnic, v jejichž společném ohnisku je slunce.*

Druhý Keplerův zákon zní: *Průvodič planety opisuje za stejné časové intervaly stejné plochy.* Element plochy opsané za čas průvodičem ovšem odpovídá až na konstanty momentu hybnosti L a konstantní opsaná plocha tedy odpovídá zachování L .

Třetí a poslední Keplerův zákon: *Poměr druhých mocnin ooběžných dob je roven poměru třetích mocnin jejich velkých poloos.* Tuto skutečnost lze alternativně vyjádřit:

$$\frac{T^2}{a^3} = K = konst. \quad (1.23)$$

Kde T je doba oběhu a a je velká poloosa dané elipsy. Zákon lze odvodit pomocí druhého Keplerova zákona:

$$S = \int dS = \int_0^T \frac{L}{2m} dt = \frac{L}{2m} T, \quad S = \pi ab \quad (1.24)$$

Parametry a a b ovšem lze vyjádřit pomocí excentricity ϵ z rovnice kuželosečky a Binetova vzorce. Získáváme tedy:

$$K = \frac{4\pi^2}{GM} \quad (1.25)$$

1.7 D'Alembertův princip

Pokud jsou Newtonovy rovnice podrobené vazbám $\phi_i(\vec{r}_j, \dots, t) = 0$ které musí být splněny pro pohyb, lze Newtonovy pohybové rovnice řešit s pomocí metody Lagrangeových multiplikátorů:

$$m\ddot{\vec{r}}_j = \vec{F}_j + \sum_i \lambda_i \nabla_j \phi_i \quad (1.26)$$

Kde j indexuje hmotné body, i vazby. ∇_j je pak gradient vůči poloze (j)-tého hmotného bodu a λ_i jsou neznámé *Lagrangeovy multiplifikátory*. Tyto rovnice bývají nazývány *Lagrangeovými rovnicemi prvního druhu* a mohou sloužit například k analýze namáhání vazeb výpočtem koeficientů λ .

D'Alembertův princip: Soustava HBů se vyvíjí takovým způsobem, že:

$$\sum_i^{3N} (m_i \ddot{x}_i - F_i) \delta x^i = 0 \quad (1.27)$$

Kde index i nyní indexuje jednotlivé souřadnice HB a odpovídajících působících sil a zároveň m_i je nyní vždycky po trojicích odpovídající tomu samému HB. Veličiny δx_i pak představují tzv. *virtuální posunutí* - nekonečně malá posunutí v souladu s vazbami.

Speciálně pro žádné vazby přejde D'Alembertův princip na Newtonovy rovnice a pro nulové zrychlení představuje tzv. *princip virtuální práce*, který představuje podmínku rovnováhy ve statice. Úvahami o tečných plochách vazeb, kolmosti gradientu vazby atd. lze ukázat ekvivalenci D'Alembertova principu a Lagrangeových rovnic prvního druhu.

1.8 Lagrangeovy rovnice 2. druhu

Lagrangeovy rovnice 2. druhu lze odvodit například z D'Alembertova principu průmětem všech veličin do prostoru *zobecněných souřadnic* q^i popisujících automaticky prostor s vazbami. (Lokální souřadnice na varietě definované vazbami - existují vždy díky větě o implicitní funkci.)

Lagrangeovy rovnice 2. druhu ve zcela obecném tvaru zní:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}^j} \right) - \frac{\partial T}{\partial q^j} = Q_j, \quad Q_j = \sum_i^{3N} F_i \frac{\partial x^i}{\partial q^j} \quad (1.28)$$

Kde T je kinetická energie HBů a Q_j *zobecněná síla*. Speciálně pro konzervativní pole platí:

$$Q_j = - \sum_i^3 N \frac{\partial V}{\partial x^i} \frac{\partial x^i}{\partial q^j} \equiv \frac{\partial V}{\partial q^j} \Rightarrow \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^j} \right) - \frac{\partial L}{\partial q^j} = 0 \quad (1.29)$$

Kde $L = T - V$ je *Lagrangeova funkce* nebo též *Lagranžián*. Stejný tvar rovnic lze nalézt i při zahrnutí magnetického pole i přestože daná síla závisí i na rychlosti HB.

1.9 Hamiltonovy kanonické rovnice

Libovolnou diferencovatelnou funkci lze podrobit takzvané *Legendrově duální transformaci* kdy určitý podprostor proměnných nahradíme prostorem tečen k funkci v daném podprostoru. Speciálně v mechanice se transformuje Lagrangeova funkce na *hamiltonián* následující transformací.

$$p_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^j}; \quad \dot{q}^j \rightarrow \dot{q}^j(p_j), \quad L(q^j, \dot{q}^j) \rightarrow L(q^j, p_j); \quad H(q^j, p_j) \equiv \sum_j^M p_j \dot{q}^j - L \quad (1.30)$$

Kde M je počet stupňů volnosti systému. Hamiltonián pak téměř vždy nabývá tvaru $H = T + V$. Pohybové rovnice vedou na Hamiltonovy kanonické rovnice:

$$q^j = \frac{\partial H}{\partial p_j}, \quad p^j = -\frac{\partial H}{\partial q^j} \quad (1.31)$$

Prostor souřadnic q^i, p_i , *konfiguračních souřadnic* a *kanonicky sdružených hybností* je nazýván *fázovým prostorem*. Místo M diferenciálních rovnic druhého řádu tedy máme $2M$ rovnic prvního řádu, které jsou plně udány počátečními souřadnicemi na fázovém prostoru. Trajektorie na fázovém prostoru jsou tedy jednoznačné a nekříží se.

Užitečná je i struktura tzv. *Poissonových závorek*:

$$\{f, g\} = \sum_j^N \left(\frac{\partial f}{\partial q^j} \frac{\partial g}{\partial p_j} - \frac{\partial g}{\partial q^j} \frac{\partial f}{\partial p_j} \right) \quad (1.32)$$

Pro funkci $f(p_i, q^i)$ pouze na fázovém prostoru je $\{f, H\} = \dot{f}$. *Kanonická transformace* je transformace souřadnic na fázovém prostoru, která zachovává pro nějaké nové dvojice souřadnic Q^j, P_j formální tvar hamiltonových kanonických rovnic a zároveň i odpovídající strukturu Poissonových závorek.

Lze ukázat, že časový vývoj je kanonická transformace a tudíž ze zachování Poissonových závorek je při časové evoluci zachován i fázový objem $\Pi_i dp_i dq^i$.

2. Kinematika a dynamika tuhého tělesa

Kinematika t.t.

TUHÉ TĚLESO SI LZE PŘEDSTAVIT JAKO KRYSTAL SLOŽENÝ Z NEKONEČNĚ MNOHA HMOTNÝCH BODŮ, MEZI NIMIŽ EXISTUJÍ SKLERONOMNÍ HOLONOMNÍ VAZBY (tuhé těleso se nedeformuje a nevyvíjí v čase).

Tuhé těleso má:

1. 3 stupně volnosti - **translační pohyb** (translační pohyb hmotného středu tuhého tělesa; Tuhé těleso se může pohybovat nahoru - dolů, doleva - doprava a dopředu - dozadu, tedy ve třech nezávislých směrech.)
2. 3 stupně volnosti **rotační pohyb** - uvažuje se **rotace** kolem okamžité **osy otáčení** procházející hmotným středem tuhého tělesa.

Rotační pohyb je charakterizován **Eulerovými úhly**.

Pro popis pohybu tuhého tělesa se zavádějí dvě ortonormální **báze**:

1. **pevná báze** $\{\vec{e}_i\}$ (pro $i = 1, 2, 3$) - je to báze, jejíž poloha v prostoru je pevně daná vůči zvolenému inerciálnímu systému.
2. **korotující báze** $\{\vec{e}'_i\}$ (pro $i = 1, 2, 3$) - tato báze je spojená s tuhým tělesem, její vektory mají společný počátek ve hmotném středu tělesa a tato báze se tedy pohybuje společně s daným tuhým tělesem.

Poloha tuhého tělesa tedy bude jednoznačně určena, bude-li určeno natočení báze, která rotuje s tělesem (korotující báze), vůči pevné bázi v prostoru.

Pro kompletní popis pohybu tuhého tělesa je nutné najít transformační vztahy mezi oběma výše uvedenými bázemi. Báze $\{\vec{e}_i\}$ a $\{\vec{e}'_i\}$ jsou spolu svázány ortogonální maticí přechodu **A** vztahem

$$\vec{e}'_i = \sum_{k=1}^3 A_{ik} \vec{e}_k = A_{ik} \vec{e}_k$$

pro $i = 1, 2, 3$, kde A_{ik} jsou prvky transformační matice **A** splňující relace ortogonality ve tvaru

$$A_{ik} A_{jk} = \delta_{ij} \text{ resp. } A_{ki} A_{kj} = \delta_{ij}$$

pro $i, j, k = 1, 2, 3$.

Matice **A** tedy zachová při transformaci bází jejich ortogonalitu. (Dk.viz [1])

Každá ortogonální matice (tedy i matice **A** (symetrická)) má jen tři nezávislé prvky, které odpovídají třem stupňům volnosti pro rotační pohyb tuhého tělesa. (Všech devět prvků matice **A** je totiž svázáno šesti relacemi ortogonality - proto má matice **A** tři nezávislé prvky.) Budeme tedy hledat tři nezávislé parametry popisující rotaci tuhého tělesa. Ukáže se, že těmito nezávislými parametry jsou **Eulerovy úhly**.

Natočení tuhého tělesa se mění v čase: během rotace tuhého tělesa se mění natočení vektorů korotující báze $\{\vec{e}_i\}$ spojené s tělesem vzhledem k pevné bázi $\{\vec{e}_i\}$. Ta je ovšem pevně zvolená v prostoru, a proto je na čase nezávislá. To ale znamená, že na čase budou závislé prvky matice **A**. Časové změny **fyzikálních veličin** ale budeme vyšetřovat vůči oběma uvažovaným bázím. Budeme proto uvažovat dvě různé (ovšem navzájem ekvivalentní) fyzikální veličiny, které budou popisovat pohyb tuhého tělesa z hlediska uvažovaných dvou bází. Proto je důležité vždy vědět, vůči jakému systému popisujeme pohyb daného tuhého tělesa.

Vektor úhlové rychlosti $\vec{\Omega}$

$$\vec{\Omega} = \frac{d\mathbf{A}}{dt} \mathbf{A}^T$$

MATICE $\vec{\Omega}$ JE ANTISYMETRICKÁ.

Antisymetrické matici $\vec{\Omega}$ přiřadíme vektor $\vec{\Omega}$ se složkami:

$$\Omega'_i = \frac{1}{2} \epsilon_{ijk} \Omega'_{jk}, \quad (1)$$

kde ϵ_{ijk} je Lewi-Civitův symbol (Lewi-Civitův tenzor). Provedeme-li naznačený součet podle proměnné k , dostaneme

$$\vec{\Omega} = (\Omega'_1, \Omega'_2, \Omega'_3) = (\Omega'_{23}, -\Omega'_{13}, \Omega'_{12}).$$

Vektor $\vec{\Omega}$ má složky definované vůči korotující bázi $\{\vec{e}_i\}$.

Analogicky lze vytvořit z vektoru matici, tj. napsat ke vztahu (1) duální vztah ve tvaru

$$\Omega'_k = \epsilon_{ijk} \Omega'_i.$$

Pro libovolný časově závislý vektor $\vec{w}(t)$ platí v každé bázi

$$\frac{d\vec{w}(t)}{dt} = \frac{d\vec{w}_{\text{těleso}}(t)}{dt} + \vec{\Omega} \times \vec{w}$$

Tento vztah je velmi důležitý, a proto vyžaduje několik komentářů:

1. $\frac{d\vec{w}}{dt}$ a $\frac{d\vec{w}_{\text{těleso}}}{dt}$ jsou dva různé vektory, nikoliv jeden vektor vyjádřený v různých bázích;
2. pokud zvolíme $\vec{w} = \vec{r}$, kde \vec{r} je polohový vektor popisující polohu objektu na rotujícím tuhém tělese, pak člen $\frac{d\vec{w}}{dt} = \frac{d\vec{r}}{dt}$ definuje **rychlost pohybu** hmotného bodu na tuhém tělese vůči vnějšímu pozorovateli;
3. při stejné volbě pak člen $\frac{d\vec{w}_{\text{těleso}}}{dt} = \frac{d\vec{r}_{\text{těleso}}}{dt}$ definuje rychlost pohybu hmotného bodu na tuhém tělese vůči tomuto tuhému tělesu

Popis rotace tuhého tělesa - Eulerovy kinematické rovnice

Libovolné natočení tuhého tělesa lze složit ze tří otočení kolem vhodných os a každé z těchto tří otočení je popsáno jedním z Eulerových úhlů.

1. precesní úhel φ - charakterizuje otočení kolem osy z (resp. x_3) kartézského systému souřadnic a je z intervalu $\langle 0; 2\pi \rangle$;
2. nutační úhel ϑ - charakterizuje otočení kolem osy y' (resp. x_2'), což je nová poloha osy x (resp. x_1) po předchozích otočeních; je z intervalu $\langle 0; \pi \rangle$;
3. rotační úhel ψ - charakterizuje otočení kolem nové polohy osy z (resp. x_3) a je z intervalu $\langle 0; 2\pi \rangle$.

Úhel ψ charakterizuje vlastní rotaci tuhého tělesa kolem jeho osy, která splývá s osou z . Úhel ϑ charakterizuje odchylku vlastní osy tuhého tělesa (kolem níž tuhé těleso rotuje) od svislého směru a úhel φ určuje natočení tzv. uzlové přímky. Úhly ϑ a φ tak jednoznačně určují polohu osy tuhého tělesa, kolem níž těleso rotuje.

Postup, kterým ukážeme, že libovolné natočení tuhého tělesa v prostoru lze složit z natočení charakterizovaných právě zavedenými Eulerovými úhly, aplikujeme ve třech krocích na rotaci kartézského systému souřadnic $Oxyz$:

1. rotace kolem osy z (resp. x_3) o úhel φ (viz obr. 61) - tato rotace je popsána maticí **D**, která má stejný tvar jako matice daná předpisem (242)

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

již přísluší vektor úhlové rychlosti ve tvaru

$$\overrightarrow{\Omega^D} = (0; 0; \dot{\varphi}).$$

2. rotace kolem nové polohy osy y (resp. x_2) o úhel ϑ (viz obr. 62) - tato rotace je popsána maticí **C** ve tvaru

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\vartheta & \sin\vartheta \\ 0 & -\sin\vartheta & \cos\vartheta \end{pmatrix};$$

této matici odpovídá vektor úhlové rychlosti ve tvaru

$$\overrightarrow{\Omega^C} = (\dot{\vartheta}; 0; 0).$$

3. rotace kolem nové polohy osy z (resp. x_3) o úhel ψ (viz obr. 63) - tato rotace je popsána maticí **B** ve tvaru

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} \cos\psi & \sin\psi & 0 \\ -\sin\psi & \cos\psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

kteřé odpovídá vektor úhlové rychlosti ve tvaru

$$\vec{\Omega}^B = (0; 0; \psi)$$

Výsledné otočení, které vznikne složením právě popsaných otočeních v uvedeném pořadí charakterizovaných maticemi (249), (251) a (253), můžeme popsat maticí **A** ve tvaru

$$\mathbf{A} = \mathbf{B.C.D}$$

V právě uvedeném vztahu závisí na pořadí násobení, protože násobení matic není obecně komutativní. A ani **skládání otočení**, které je maticemi popsáno, není obecně komutativní.

Této matici pak odpovídá vektor úhlové rychlosti $\vec{\Omega}$, který můžeme psát s využitím vztahu (248) ve tvaru

$$\vec{\Omega} = \vec{\Omega}^B + \mathbf{B}.\vec{\Omega}^C + \mathbf{B.C}.\vec{\Omega}^D,$$

v němž jsou vektory úhlových **rychlostí** $\vec{\Omega}^C$ a $\vec{\Omega}^D$ násobeny příslušnými maticemi proto, abychom tyto vektory vyjádřili ve správné **bázi**, v níž jsou definovány a mají smysl. Vektor $\vec{\Omega}^C$ je totiž definován v soustavě souřadnic (v bázi), která vznikne po prvním otočení. Proto jej musíme přepočítat tak, jak by vypadal po třetím otočení, aby jej bylo možné přičíst k vektoru $\vec{\Omega}^B$, který je definován v bázi, která vznikne po třetím otočení daného kartézského systému. Analogicky je nutné vektor $\vec{\Omega}^D$, který je definován v původní kartézské soustavě, transformovat do soustavy souřadnic, kterou získáme po dalších dvou otočeních. Po dosazení matic (251) a (253) a vektorů (250), (252) a (254), které je nutné kvůli operacím s maticemi dosazovat v transponované podobě, do vztahu (256)

$$\vec{\Omega} = \begin{pmatrix} \Omega_x \\ \Omega_y \\ \Omega_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \psi \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \cos\psi & \sin\psi & 0 \\ -\sin\psi & \cos\psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \left(\begin{pmatrix} \dot{\varphi} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\vartheta & \sin\vartheta \\ 0 & -\sin\vartheta & \cos\vartheta \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \dot{\varphi} \end{pmatrix} \right).$$

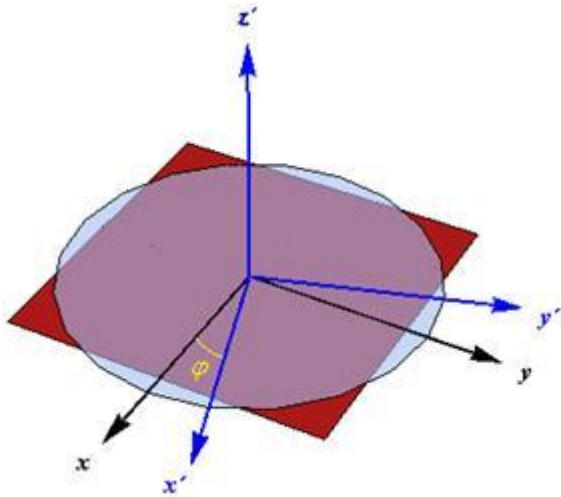
dostaneme naznačených operací s maticemi Provedením získáme

$$\begin{pmatrix} \Omega_x \\ \Omega_y \\ \Omega_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \psi \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \cos\psi & \sin\psi & 0 \\ -\sin\psi & \cos\psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \dot{\varphi} \\ \dot{\varphi} \sin\vartheta \\ \dot{\varphi} \cos\vartheta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dot{\vartheta} \cos\psi + \dot{\varphi} \sin\vartheta \sin\psi \\ -\dot{\vartheta} \sin\psi + \dot{\varphi} \sin\vartheta \cos\psi \\ \psi + \dot{\varphi} \cos\vartheta \end{pmatrix}.$$

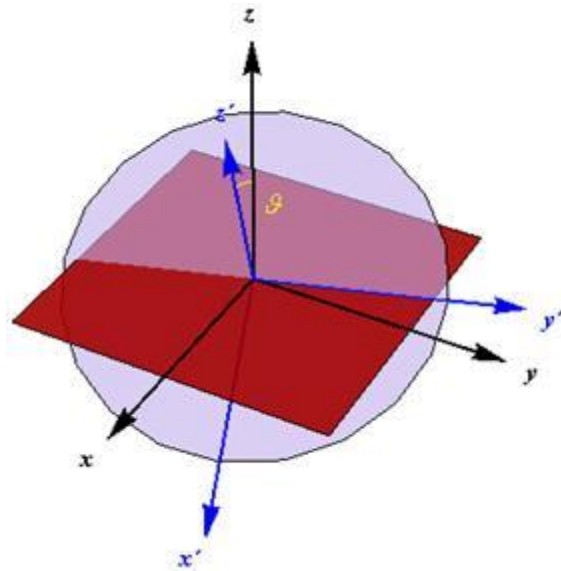
vztah Tedy můžeme psát

$$\begin{pmatrix} \Omega_x \\ \Omega_y \\ \Omega_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dot{\vartheta} \cos\psi + \dot{\varphi} \sin\vartheta \sin\psi \\ -\dot{\vartheta} \sin\psi + \dot{\varphi} \sin\vartheta \cos\psi \\ \psi + \dot{\varphi} \cos\vartheta \end{pmatrix},$$

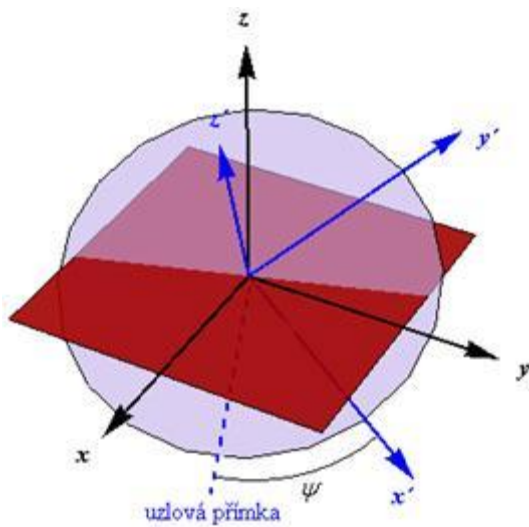
což je maticové vyjádření **Eulerových kinematických rovnic v korotující bázi**, která rotuje spolu s tělesem. Vektor $\vec{\Omega}$ má směr okamžité **osy otáčení**, kolem níž se tuhé těleso otáčí.



Obr. 61



Obr. 62



obr. 63

Uzlová přímka zobrazená na obr. 63 vyznačuje původní polohu osy x' z obr. 62.

Tenzor setrvačnosti

TENZOR SETRVAČNOSTI POPISUJE SETRVAČNÉ VLASTNOSTI TUHÉHO TĚLESA VŮČI ROTAČNÍMU POHYBU.

Tenzor setrvačnosti tedy udává nechuť tuhého tělesa k rotačnímu pohybu analogicky, jako udává hmotnost (setrvačná hmotnost) hmotného bodu nechuť k jeho translačnímu pohybu.

Definujeme bilineární zobrazení $I(\vec{\xi}, \vec{\Omega})$ předpisem (odvození viz [1])

$$I(\vec{\xi}, \vec{\Omega}) = \sum_{a=1}^N m^a (\vec{\xi} \times \vec{r}^a) \cdot (\vec{\Omega} \times \vec{r}^a), \quad (2)$$

na které lze nahlížet jako na funkci dvou proměnných $\vec{\xi}$ a $\vec{\Omega}$.

Hmotnosti m^a (index a pro každý bod tuhého tělesa) a polohové vektory \vec{r}^a jsou dány vyšetřovaným tuhým tělesem, vektory $\vec{\xi}$ a $\vec{\Omega}$ vstupují do popisu tuhého tělesa „zvenčí“.

Vztahem (2) jsme tedy definovali tenzor druhého řádu - v našem případě to je **tenzor setrvačnosti**.

Fakt, že se jedná o tenzor *druhého* řádu vyplývá z toho, že k jeho určení jsou nutné *dva* vektory.

Ve speciálním případě lze vztah (2) psát ve

$$I(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}) = \sum_{a=1}^N m^a (\vec{\Omega} \times \vec{r}^a) \cdot (\vec{\Omega} \times \vec{r}^a) = \sum_{a=1}^N m^a \vec{v}^a \cdot \vec{v}^a = \sum_{a=1}^N m^a (v^a)^2 = 2T$$

tvary

Kinetickou energii T rotujícího tuhého tělesa lze tedy psát ve tvaru $T = \frac{1}{2} I(\vec{\Omega}, \vec{\Omega})$.

Nyní můžeme vyjádřit tenzor I definovaný vztahem (2) ve složkách báze $\{\vec{e}_i\}$. Můžeme proto psát

$$I(\vec{\xi}, \vec{\Omega}) = I(\xi_i \vec{e}_i, \Omega_j \vec{e}_j) = \xi_i \Omega_j I(\vec{e}_i, \vec{e}_j) \text{ a tedy } I(\vec{\xi}, \vec{\Omega}) = I_{ij} \xi_i \Omega_j.$$

Matice $I(\vec{\xi}, \vec{\Omega})$ je symetrická matice typu $(3, 3)$, jejíž symetričnost vyplývá přímo z její definice (2): skalární součin (pomocí kterého je definována) je totiž komutativní. To znamená, že matice má šest nezávislých prvků.

Každý vektor \vec{r}^a (tj. pro všechny přípustné hodnoty a) lze rozepsat pomocí vektorů báze, v níž popisujeme celý pohyb, ve tvaru

$\vec{r}^a = x_k^a \vec{e}_k$ kde x_k^a je k -tá souřadnice a -tého vektoru. Po úpravách [1] dostáváme

$$I_{ij} = \sum_{a=1}^N m^a (\delta_{ij} x_1^a x_1^a - x_i^a x_j^a) \quad (3)$$

Pokud si nyní představíme, že tuhé těleso, které popisujeme, je složeno z krychliček (resp. hranolků)

s různou hustotou $\rho(\vec{r})$, můžeme provést spojitou limitu vztahu (3) a získáme

$$I_{ij} = \int_V (\delta_{ij} x_1 x_1 - x_i x_j) \rho(\vec{r}) dV,$$

což jsou složky tenzoru setrvačnosti popisující spojitě prostředí. x_1 , x_i a x_j jsou souřadnice polohového vektoru vyjádřené v bázi, v níž počítáme.

Ortogonální báze tvořená vektory \vec{e}_1 , \vec{e}_2 a \vec{e}_3 , které jsou zároveň i vlastními vektory matice I , určují hlavní osy tuhého tělesa resp. hlavní osy tenzoru setrvačnosti, který lze psát ve tvaru

$$\mathbf{I} = \begin{pmatrix} I_1 & 0 & 0 \\ 0 & I_2 & 0 \\ 0 & 0 & I_3 \end{pmatrix} \quad (4)$$

kde I_1 , I_2 a I_3 jsou vlastní čísla matice \mathbf{I} .

Každé těleso má tedy tři takové osy, pro které má tenzor setrvačnosti tvar daný výrazem (4), tj. má jen tři nezávislé složky na hlavní diagonále. Tyto tři uvažované osy tuhého tělesa procházejí jeho **těžištěm** a nazývají se **hlavní osy tuhého tělesa**.

Moment setrvačnosti

Moment setrvačnosti $I_{\vec{n}}$ tuhého tělesa, který charakterizuje otáčení tohoto tělesa kolem osy dané vektorem \vec{n} , tedy určujeme pomocí průsečíku této osy s abstraktním elipsoidem setrvačnosti. To znamená, že moment setrvačnosti $I_{\vec{n}}$ se spojitě mění v závislosti na spojitě změně polohy osy rotace tuhého tělesa.

Při změně polohy osy rotace se změní směr vektoru \vec{n} a tedy se změní průsečík této osy s elipsoidem setrvačnosti. Změna souřadnic $[\xi_1, \xi_2, \xi_3]$ tohoto průsečíku vede ke změně momentu setrvačnosti tělesa.

Je-li osou rotace tuhého tělesa např. první hlavní osa (tj. je-li $\vec{n} = \vec{e}_1$), platí

$$I_{\vec{n}} = \frac{1}{\xi_1^2} = \frac{1}{\left(\frac{1}{\sqrt{I_1}}\right)^2} = I_1$$

. Tedy relativně obtížně definovaný tenzor setrvačnosti nyní přináší velké výhody při jednoduchém a rychlém určování momentu setrvačnosti $I_{\vec{n}}$.

Další zjednodušení tenzoru setrvačnosti \mathbf{I} (a tedy i následný výpočet momentu setrvačnosti) přináší symetrie tuhého tělesa:

1. tuhé těleso je rotační těleso - pak platí $I_1 = I_2 \neq I_3$ a elipsoid setrvačnosti má tvar podobný tvaru na obr. 68;
2. tuhé těleso je koule - $I_1 = I_2 = I_3$ a elipsoidem setrvačnosti je sféra; navíc v tomto případě je moment setrvačnosti $I_{\vec{n}}$ konstantní pro všechny osy, které procházejí těžištěm tuhého tělesa (tj. uvažované koule);
3. tuhé těleso je krychle - ta je symetrická a její hlavní osy jsou kolmé na její stěny. Proto je moment setrvačnosti $I_{\vec{n}}$ stejný pro všechny osy krychle procházející jejím těžištěm. Elipsoidem setrvačnosti krychle je sféra.

Eulerovy dynamické rovnice

Celkového moment **hybnosti** \vec{L} tuhého tělesa je definován

$$\vec{L} = \sum_{a=1}^N \vec{r}^a \times \vec{p}^a$$

Eulerovy dynamické rovnice jsou jakousi analogií Newtonových rovnic (rovnice druhého Newtonova zákona) pro tuhé těleso. Jejich odvození vychází ze druhé věty impulsové, kterou lze získat velmi jednoduše z první věty

impulsové tvaru $\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F}$ tak, že tuto rovnici vektorově vynásobíme polohovým vektorem \vec{r} . Tak dostaneme

$$\vec{r} \times \frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{r} \times \vec{F} \quad , \quad \text{což lze psát ve tvaru} \quad \frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{M} \quad (5).$$

Vztah (5) je matematickým vyjádřením **druhé věty impulsové**. V tomto vztahu je \vec{M} moment vnějších sil a \vec{L} je moment **hybnosti**. Vzhledem k tomu, že \vec{M} charakterizuje míru otáčivých účinků vnějších sil na dané tuhé těleso, budeme situaci vyšetřovat z hlediska vnějšího pozorovatele.

Pro moment hybnosti můžeme psát

$$\left. \frac{d\vec{L}}{dt} \right|_{\text{prostor}} = \left. \frac{d\vec{L}}{dt} \right|_{\text{těleso}} + \vec{\Omega} \times \vec{L} \quad , \quad (6)$$

kde moment hybnosti vystupující na pravé straně vztahu je definovaný z hlediska tuhého tělesa.

Ze vztahů (5) a (6) vyplývá

$$\vec{M} = \left. \frac{d\vec{L}}{dt} \right|_{\text{těleso}} + \vec{\Omega} \times \vec{L} \quad (7).$$

Přitom moment hybnosti je definován pomocí **tenzoru setrvačnosti** a vektoru **úhlové rychlosti** vztahem $L_i = I_{ij}\Omega_j$. Vzhledem k tuhému tělesu jsou ovšem složky tenzoru setrvačnosti I konstantní, neboť jsou určeny buď v **korotující bázi** (ta je vzhledem k danému tuhému tělesu v **klidu**, protože rotuje spolu s ním) anebo vzhledem k **hlavním osám** tuhého tělesa. Pro moment hybnosti definovaný vůči hlavním osám můžeme napsat

$$L_x = I_1\Omega_x, \quad L_y = I_2\Omega_y \quad \text{a} \quad L_z = I_3\Omega_z. \quad (8)$$

Rozepsáním **vektorového součinu** ve vztahu (7) a částečným dosazením ze vztahu (8) dostaneme

$$I_1\dot{\Omega}_x + (\Omega_y L_z - \Omega_z L_y) = M_x$$

Po dalším dosazení ze vztahu (8) získáme **Eulerovy dynamické rovnice**, které popisují **rotaci** tuhého tělesa z hlediska **dynamiky**, ve tvaru

$$I_1\dot{\Omega}_x - (I_2 - I_3)\Omega_y\Omega_z = M_x$$

Pohyb setrvačnicků

Těleso, které se otáčí kolem pevného bodu, se nazývá setrvačnick.

Může mít buď všechny tři hlavní momenty setrvačnosti navzájem různé, pak se nazývá **asymetrickým setrvačnickem**, nebo mohou dva z hlavních momentů setrvačnosti být stejné, takový setrvačnick nazýváme **symetrický setrvačnick**. Jsou-li všechny tři hlavní momenty setrvačnosti stejné, mluvíme o **kulovém setrvačnicku**.

Setrvačníky rozlišujeme též dle sil, které na ně při pohybu působí. Je-li vnější silové působení nulové, nazýváme **setrvačnick volným** nebo též **bezsilovým**. Setrvačnick pohybující se v tíhovém poli upevněný v bodě různém od hmotného středu se nazývá **těžkým setrvačnickem**.

Bezsilový setrvačnick je špatný název pro bezmomentový rotačně symetrický setrvačnick, který může sloužit např. jako model gyroskopu uloženého v tzv. Cardanově závěsu. Dalším velmi dobrým modelem tohoto typu setrvačnicku je Země.

Tento setrvačnick je charakterizován nulovým **momentem sil** (tj. $\vec{M} = \vec{0}$) a rotační symetrií, ze které pro **momenty setrvačnosti** vzhledem k **hlavním osám** vyplývá $I_1 = I_2 \neq I_3$.

Vektor $\vec{\omega}$ opisuje plášť kužele, což vyplývá z toho, že velikost tohoto vektoru je v čase konstantní, z-ová složka je konstantní a dále z toho, že x-ová a y-ová složka vektoru $\vec{\omega}$ opisují kružnici.

U bezmomentového setrvačnicku nastává tzv. **regulární precese** (pravidelná **precese**), při níž se poloha **osy otáčení** (tj. směr vektoru $\vec{\omega}$) mění v čase pravidelně (koncový bod vektoru opisuje kružnici).

Moment hybnosti je veličina, která se v izolované soustavě zachovává.

Bezmomentový setrvačnick takovou izolovanou soustavou je.

Ze vztahu (5) pro bezmomentový setrvačnick plyne $\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{0}$ a tedy $\vec{L} = \text{konst.}$

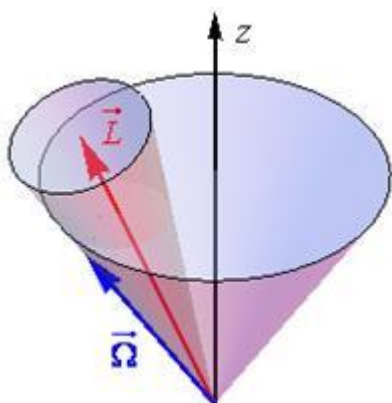
Z hlediska pevné báze (tj. vzhledem ke stálícím, systému GPS, ...) má stálý směr v prostoru vektor momentu hybnosti \vec{L} a setrvačnick (Země) rotuje kolem něj.

Kolem vektoru \vec{L} tedy rotuje osa z a kolem ní vektor úhlové rychlosti $\vec{\omega}$.

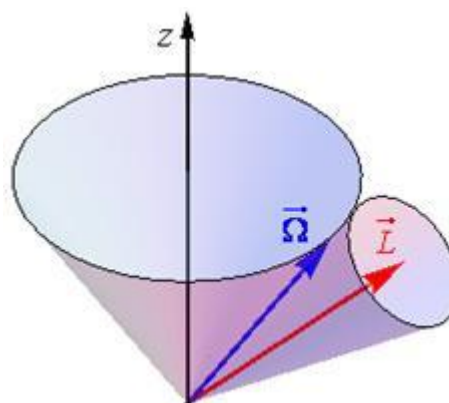
Vektory na obr. 71 a obr. 72 by měly být správně otočeny tak, aby vektor momentu hybnosti \vec{L} měl svislý směr. Bylo by tím lépe naznačeno, že je to právě tento vektor, jehož směr se v prostoru zachovává.

Pro nesymetrický setrvačnick je řešení jeho pohybu komplikovanější. Navíc se nezachovává ani směr ani velikost úhlové rychlosti $\vec{\omega}$.

U symetrického se zachovává velikost vektoru úhlové rychlosti $\vec{\omega}$.



Obr. 71



Obr. 72

[1] <http://fyzika.jreichl.com/main.article/view/1292-tuhe-teleso>

3. Mechanika kontinua

Pro popis pohybu kontinua se obvykle užívají dvě různé metody: metoda Lagrangeova a metoda Eulerova.

V Lagrangeově metodě se sleduje trajektorie částic kontinua, které se v čase $t = 0$ nacházejí v bodech x_i^0 . Pohyb kontinua je pak dán spojitou funkcí

$$x_j = x_j(x_i^0, t) \quad (3.1)$$

parametry x_i^0 identifikují příslušnou částici kontinua.

Eulerův popis naproti tomu udává rozložení rychlostí částic v jednotlivých bodech prostoru v závislosti na čase. Částice, která se v čase t nachází v bodě x_j má rychlost

$$v_i = v_i(x_j, t) \quad (3.2)$$

Za předpokladu, že funkce (3.2) nejsou nulové a jsou spojitě včetně parciálních derivací podle souřadnic, lze v každém čase t proložit kontinuum křivkami $y_i(s)$, které se nazývají *proudnice* a platí pro ně:

$$\frac{dy_i}{ds} = kv_i \quad (3.3)$$

kde k je nějaká konstanta. Proudnice a trajektorie částic jsou obecně různé křivky, splývají pouze v případě stacionárního proudění, tj. pokud v_i nezávisí na čase.

3.1 Tenzor napětí

Napětí kontinua lze popisovat symetrickým tenzorem 2. řádu τ_{ij} .

Uvažujme napětí působící na plochu kolmou k ose x . To lze popsat vektorem $\vec{T}_1 = (\tau_{11}, \tau_{12}, \tau_{13})$. Provedením analogické úvahy pro zbylé dvě osy dostaneme devět hodnot tvořících tenzor napětí τ_{ij} .

Napětí na libovolné plošce s normálou \vec{n} pak dostaneme zapůsobením tenzoru na normálu

$$T_j = \tau_{ij}n_i \quad (3.4)$$

3.2 Tenzor deformace

První Helmholtzova věta říká, že pohyb kontinua v okolí určitého bodu lze rozložit na pohyb translační, rotační a deformační.

Souřadnice částice kontinua y_j je dána počáteční polohou x_i a posunutím u_j . Platí tedy

$$y_j = x_j + u_j(x_i) \quad (3.5)$$

Čtverec posunutí je roven

$$\begin{aligned} du_j du_j &= dy_j dy_j - dx_j dx_j = (dx_j + \frac{\partial u_j}{\partial x_l} dx_l)(dx_j + \frac{\partial u_j}{\partial x_k} dx_k) - dx_j dx_j \\ &= \left(\frac{\partial u_k}{\partial u_l} + \frac{\partial u_l}{\partial u_k} + \frac{\partial u_j}{\partial u_k} \frac{\partial u_j}{\partial u_l} \right) dx_k dx_l = 2E_{lk} dx_l dx_k \end{aligned} \quad (3.6)$$

Poslední rovnost definuje *tenzor velkých deformací* E_{lk} . Je nutné rozlišovat, zda je tento tenzor vyjádřen vůči deformovanému nebo nedeformovanému stavu! (Liší se to znaménkem u součinu parciálních derivací.)

Pokud jsou deformace malé, lze součin parciálních derivací zanedbat. Pak definujeme *tenzor malých deformací* jako

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad (3.7)$$

Někdy se ještě zavádí *tenzor rychlosti deformace*

$$D_{ij} = \frac{\partial \epsilon_{ij}}{\partial t} \quad (3.8)$$

3.3 Hookův zákon

Hookův zákon udává vztah mezi napětím a deformací. V obecné formě vypadá následovně

$$\tau_{ij} = C_{ijkl} e_{kl} \quad (3.9)$$

kde C_{ijkl} jsou *elastické koeficienty* a e_{kl} je tenzor deformace.

Koeficientů C_{ijkl} je v obecném případě dohromady $3^4 = 81$. Nicméně z důvodu symetrie tenzorů napětí a deformace ze počet nezávislých koeficientů zmenšuje na $6^2 = 36$, z energetických úvah pak plyne symetrie $C_{ijkl} = C_{klij}$, což redukuje počet nezávislých koeficientů na 21. Těchto 21 koeficientů popisuje elastické chování krystalů triklinické soustavy (mají nejnižší symetrii). Se zvyšující se symetrií klesá počet nezávislých koeficientů, pro kubickou soustavu jsou nezávislé pouze 3 koeficienty.

Izotropní látka má pouze dva nezávislé koeficienty, tzv. *Laméovy konstanty* λ a μ . Rovnice (3.9) se pak redukuje na tvar

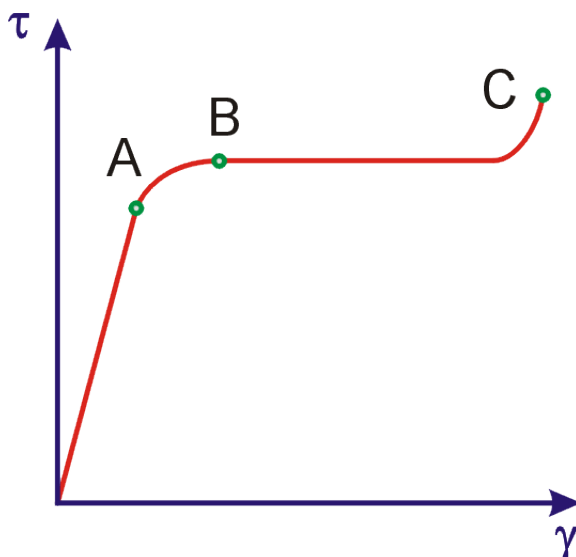
$$\tau_{ij} = \lambda \delta_{ij} \text{Tr}(e_{ij}) + 2\mu e_{ij} \quad (3.10)$$

který se nazývá *zobecněný Hookův zákon*. δ_{ij} je Kroneckerův symbol a $\text{Tr}(e_{ij})$ je stopa tenzoru deformace (jeho 1. invariant).

V praxi se místo Lamého konstant používají Youngův modul pružnosti v tahu E a modul pružnosti ve smyku G . Zobecněný Hookův zákon je pak dán rovnicí

$$\tau_{ij} = \frac{G(E - 2G)}{3G - E} \delta_{ij} \text{Tr}(e_{ij}) + 2G e_{ij} \quad (3.11)$$

Na obrázku 3.1 je kvalitativně znázorněna závislost napětí na deformaci pro některé kovové látky. V oblasti $\tau < \tau_A$ deformace úměrná napětí. Bodu A říkáme *mez úměrnosti*. Při nárůstu napětí až do bodu B je deformace vratná (v tom smyslu, že po odstranění napětí se vzorek sám vrátí do původního stavu). Bod B se nazývá *mez pružnosti*. V bodě C se pak vzorek přetrhne. Oblast mezi B a C není přesně popsána obrázkem, materiál v ní plasticky teče (tzn. deformace závisí navíc i na čase).



Obrázek 3.1: Závislost napětí na deformaci pro některé kovové látky

3.4 Rovnice struny + řešení

3.4.1 Odvození

Mějme strunu s lineární hustotou ρ upevněnou v bodech $x = 0$ a $x = l$, napjatou napětím σ . Nechť tato struna koná pouze příčné kmity, výchylku z rovnovážné polohy označíme $u(x, t)$. Dále budeme předpokládat, že výchylky jsou malé a struna při vychýlení nemění svou délku, změny napětí σ jsou tedy zanedbatelné. (To je splněno třeba pokud je struna hodně napnutá a má malý modul pružnosti.)

Struna kmitá dle předpokladů pouze ve směru kolmém na osu x , rychlost je tedy dána jako $\dot{u} = \frac{\partial u(x, t)}{\partial t}$. Kinetická energie celé struny je tedy:

$$T = \int_0^l \frac{1}{2} \rho \dot{u}^2 dx \quad (3.12)$$

Potenciální energie je práce vynaložená na překonání sil pnutí při vychylování struny. Obecná výchylka struny popsaná funkcí $y(x)$ má jednotkový tečný vektor $\vec{t}(x) = k(1, y_{,x})$, kde $k = \frac{1}{\sqrt{1+y_{,x}^2}}$ je normovací člen. Výchylka je dle předpokladů malá, tudíž můžeme položit $k \doteq 1$. Na úsek struny mezi body x a $x + dx$ tedy působí síla

$$F = \sigma \vec{t}(x + dx) - \sigma \vec{t}(x)$$

její příčná složka je

$$F_y = \sigma [y_{,x}(x + dx) - y_{,x}(x)]$$

což lze s použitím Taylorova rozvoje zapsat přibližně jako

$$F_y \doteq \sigma y_{,xx}(x) dx$$

Potenciální energie části struny při výchylce $u(x, t)$ bude

$$dV = \int_0^u F_y dy = \sigma dx \int_0^u y_{,xx}$$

zavedeme substituci $z = y_{,x}$, $y_{,xx} = z_{,x} = \frac{dz}{dy} \frac{dy}{dx} = z z_{,y}$

$$dV = \sigma dx \int_0^{z(u)} z dz = \sigma dx \frac{1}{2} z(u)^2 = \sigma dx \frac{1}{2} [u_{,x}]^2$$

Lagrangián systému je tedy roven

$$L = T - V = \int_0^l \left\{ \frac{1}{2} \rho \dot{u}^2 - \frac{1}{2} \sigma [u_{,x}]^2 \right\} dx \quad (3.13)$$

Zavádí se tzv. *hustota lagrangiánu* $\mathcal{L}(x, t)$

$$\mathcal{L}(x, t) = \frac{1}{2} \rho \dot{u}^2 - \frac{1}{2} \sigma [u_{,x}]^2 \quad (3.14)$$

Použitím Hamiltonova principu $0 = \delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} L dt$ a Euler-Lagrangeovy věty dostaneme rovnici pro kmity struny

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0 \quad (3.15)$$

což je 1D vlnová rovnice, $c = \sqrt{\sigma/\rho}$ je rychlost šíření.

3.4.2 Řešení

d'Alembertovo řešení

Hodí se pro nekonečnou strunu, kdy máme dány počáteční podmínky

$$\begin{aligned} u(x, 0) &= u_0(x) \\ u_{,t}(x, 0) &= v_0(x) \end{aligned} \quad (3.16)$$

Zavedeme substituci

$$\begin{aligned} \xi &= x - ct \\ \eta &= x + ct \end{aligned} \quad (3.17)$$

Tou převedeme rovnici (3.15) na tvar

$$\frac{\partial^2 u}{\partial \xi \partial \eta} = 0$$

Dvakrát zintegrujeme a vrátíme substituci. Dostaneme obecné řešení

$$u(x, t) = F(x - ct) + G(x + ct)$$

Z počátečních podmínek pak dostaneme vyhovující (jednoznačné) řešení

$$u(x, t) = \frac{1}{2} \left[u_0(x + ct) - \frac{1}{c} V_0(x - ct) + u_0(x - ct) - \frac{1}{c} V_0(x + ct) \right] \quad (3.18)$$

kde $V_0(x) = \int v_0(x) dx$.

Bernoulliho řešení

Hodí se pro konečnou strunu délky l upevněnou na obou koncích, tj. k podmínkám (3.16) máme ještě

$$\begin{aligned} u(0, t) &= 0 \\ u(l, t) &= 0 \end{aligned} \quad (3.19)$$

Hledáme řešení ve tvaru $u(x, t) = X(x)T(t)$. Dosadíme do (3.15) a separujeme

$$c^2 \frac{X''(x)}{X(x)} = \frac{\ddot{T}(t)}{T(t)} = -\omega^2 \quad (3.20)$$

Pro reálné nenulové ω vyjde řešení

$$\begin{aligned} X(x) &= C \sin \frac{n\pi cx}{l} & n \in \mathbb{N} \\ T(t) &= a_n \cos \frac{n\pi ct}{l} + b_n \sin \frac{n\pi ct}{l} & n \in \mathbb{N} \\ u_n(x, t) &= \sin \frac{n\pi cx}{l} \left[a_n \cos \frac{n\pi ct}{l} + b_n \sin \frac{n\pi ct}{l} \right] & n \in \mathbb{N} \end{aligned} \quad (3.21)$$

Z linearity vlnové rovnice plyne, že řešením je i Fourierova řada se členy $u_n(x, t)$. Koeficienty a_n, b_n se dostanou z počátečních podmínek.

3.5 Pohybová rovnice ideální tekutiny

Tekutinami rozumíme souhrně jak kapaliny, tak plyny. V *ideální tekutině* neexistuje smykové napětí. Napětí lze tedy vyjádřit jako

$$\sigma_{ij} = \delta_{ij}p, \quad \text{kde } p \leq 0. \quad (3.22)$$

Na ideální tekutinu působí tedy pouze čistý tlak stejné velikosti ve všech směrech.

U *dokonalé kapaliny* navíc požadujeme její nestlačitelnost, tedy musí splňovat podmínku

$$\rho = \text{konst.} \quad (3.23)$$

Dokonalý plyn je stlačitelný. Můžeme-li hustotu plynu vyjádřit jako funkci tlaku,

$$\rho = \rho(p) = \rho(p(y_i)), \quad (3.24)$$

hovoříme o *barotropním plynu*.

Analogicky Newtonově pohybové rovnici získáváme také pohybovou rovnici kontinua

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + G_i = \rho \frac{d^2 u_i}{dt^2}, \quad (3.25)$$

kde σ_{ij} je tenzor napětí a G_i vektor oběmových sil. Nyní dosaďme do rovnice vztah (3.22) a rozepišme totální diferenciál, získáme *Eulerovu hydrodynamickou rovnici*

$$\frac{\partial v_i}{\partial t} + v_j \frac{\partial v_i}{\partial y_j} = I_i - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y_i}. \quad (3.26)$$

V rovnici má poměr $\vec{I} = \vec{G}/\rho$ význam *intenzity silového pole*. Rovnici můžeme přepsat do řeči vektorů

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \text{grad}) \vec{v} = \vec{I} - \frac{1}{\rho} \text{grad } p \quad (3.27)$$

3.6 Rovnice kontinuity

Uvažujme aditivní veličinu $A(V)$, například hmotnost. Provedeme-i její limitu na malé objemi, získáme *hustotu veličiny* A :

$$\rho_A = \lim_{V \rightarrow 0} \frac{1}{V} A(V). \quad (3.28)$$

Tok diferenciální tok veličiny A definujeme jako

$$\vec{j}_A = \rho_A \vec{v}. \quad (3.29)$$

Uvažujme nyní libovolnou spojitou uzavřenou oblast Ω . Pokud v oblasti neexistuje žádné zřídlo veličiny A , musí se tok přes hranici $\partial\Omega$ rovnat záporné změně veličiny v oblasti

$$\oint_{\partial\Omega} \vec{j}_A \vec{v} dS = - \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho_A dV, \quad (3.30)$$

kde \vec{v} je vektor vnější normály oblasti Ω . Na člen na levé straně rovnice aplikujeme Gaussovu větu a ve členu na pravé straně prhodíme integrál s derivací. Převvedeme-li navíc oba členy na jednu stranu rovnice, získáme

$$\int_{\Omega} \text{div} (\vec{v} \rho_A) + \frac{\partial \rho_A}{\partial t} dV = 0. \quad (3.31)$$

Jelikož uvedená rovnost musí platit pro každou oblast Ω , platí *rovnice kontinuity*

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \text{div} (\vec{v} \rho_A) = 0. \quad (3.32)$$

Rozepišíme totální diferenciál ρ_A

$$\frac{d\rho_A}{dt} = \frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \frac{\partial \rho_A}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial t} = \frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \vec{v} \cdot \text{grad } \rho_A \quad (3.33)$$

a rozderivujeme vztah

$$\text{div} (\vec{v} \rho_A) = \vec{v} \text{grad } \rho_A + \rho_A \text{div } \vec{v}. \quad (3.34)$$

Porovnáním posledních tří vztahů můžeme rovnici kontinuity přepsat do druhého často používaného formátu

$$\frac{d\rho_A}{dt} + \rho_A \text{div } \vec{v} = 0. \quad (3.35)$$

V případě, že uvažujeme nestlačitelnou veličinu A , tedy platí $\rho_A = \text{konst.}$, z rovnice kontinuity plyne

$$\text{div } \vec{v} = 0. \quad (3.36)$$

3.7 Bernoulliho rovnice

Pro Bernoulliho rovnici požadujeme případ *stacionárního proudění*, tedy proudění, které je časově neměnné

$$\vec{v} = \vec{v}(\vec{x}). \quad (3.37)$$

Rovnice (3.27) se v tomto případě zjednoduší na tvar

$$(\vec{v} \cdot \text{grad})v = \vec{I} - \frac{1}{\rho} \text{grad } p. \quad (3.38)$$

Nyní budeme tuto rovnici integrovat podél jedné proudnice (rovnice je vynásobena jednotkovým vektorem ve směru proudnice)

$$\int v_j \frac{\partial v_i}{\partial y_j} \frac{v_i}{v} ds = \int I_i \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y_i} \frac{v_i}{v} ds + \text{konst.} \quad (3.39)$$

V případě konzervativního silového pole můžeme pro intenzitu silového pole psát

$$\vec{I} = \frac{\partial U}{\partial \vec{y}}, \quad (3.40)$$

dále pišme

$$\frac{\vec{v}}{v} ds = d\vec{y} \quad (3.41)$$

a tedy

$$\int \vec{I} \cdot \frac{\vec{v}}{v} ds = - \int \frac{\partial U}{\partial \vec{y}} \cdot d\vec{y} = - \int dU. \quad (3.42)$$

Dále

$$\int \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial \vec{y}} \cdot \frac{\vec{v}}{v} ds = \int \frac{dp}{\rho} \quad (3.43)$$

Nakonec známým trikem získáme

$$\int v_j \frac{\partial v_i}{\partial y_j} \frac{v_i}{v} ds = \int \frac{\partial(v^2/2)}{\partial y_j} dy_j = \int d\left(\frac{v^2}{2}\right). \quad (3.44)$$

Nakonec získáváme Bernoulliho rovnici pro stlačitelnou kapalinu

$$\frac{v^2}{2} + U + \int \frac{dp}{\rho} = \text{konst.} \quad (3.45)$$

V případě kapaliny

$$\frac{v^2}{2} + U + \frac{p}{\rho} = \text{konst.} \quad (3.46)$$

V případě konstantní hustoty můžeme Bernoulliho rovnici přepsat na známý tvar

$$1/2\rho v^2 + \rho U + p = \text{konst.} \quad (3.47)$$

3.8 Viskózní tekutiny a Navier-Stokesovy rovnice

V případě *viskózní kapaliny* nesmíme zanedbat smykové členy tenzoru napětí

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \sigma'_{ij}. \quad (3.48)$$

Přibude tedy napěťový člen odpovídající $\operatorname{div} \vec{v}$ a člen odpovídající malým deformacím

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \lambda \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right), \quad (3.49)$$

kde μ je *koeficient viskozity*.

V případě nestlačitelné kapaliny je $\lambda = 0$. Pro získání pohybové rovnice pro nestlačitelnou kapalinu dosadíme vyjádření tenzoru napětí do pohybové rovnice kontinua (3.25)

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \operatorname{grad}) \vec{v} = -\frac{1}{\rho} \operatorname{grad} p + \nu \Delta \vec{v} + \vec{I}, \quad (3.50)$$

kde $\nu = \mu/\rho$ je dynamická viskozita. Uvedená rovnice je slavná *Navièrr-Stokesova rovnice* pro nestlačitelnou tekutinu.

3.9 Laminární a turbulentní proudění

Proudění při kterém nedochází k mísení tekutiny a sice se jeho proudnice neprotínají nazýváme *laminárním prouděním*. V případě vířivého proudění, tedy když dochází k protínání jednotlivých proudnic, mluvíme o tzv. *turbulentním proudění*.

K jakému typu proudění dochází můžeme určit exaktním řešením Navièrr-Stokesovy rovnice. Pro hrubý odhad však postačí užití tzv. *Reynoldsova čísla*

$$Re = \frac{vR}{\nu}, \quad (3.51)$$

kde v je střední rychlost proudění a R charakteristický rozměr systému. Je-li Reynoldsovo číslo daleko menší než určitá kritická hodnota, dochází k laminárnímu proudění. Je-li toto číslo mnohem větší, než jeho kritická hodnota, je proudění turbulentní. V případě, že Reynoldsovo číslo odpovídá jeho kritické hodnotě, dochází k tzv. přechodovému proudění. Kritická hodnota Reynoldsova čísla se udává v rozmezí $< 1\,000; 20\,000 >$.

Literatura

- [1] Langer J., Podolský J. *Studijní text ke kontinuu* [online], [cit. 2013-04-28]
<http://utf.mff.cuni.cz/vyuka/OFY003/TEXTY/KONTINU.PS>
- [2] *Kurz fyziky pro DS*, KFPP MFF UK. [online], [cit. 2013-04-28]
http://physics.mff.cuni.cz/kfpp/skripta/kurz_fyziky_pro_DS/display.php/kont
- [3] Kvasnica, J., et al.: *Mechanika*. Academia, Praha, 2004. 2. vydání
- [4] Brdička, et al.: *Mechanika kontinua*. Academia, Praha, 2005, 3. vydání

4. Struktura látek

4.1 Skupenství a atomová struktura látek

Skupenství je stav látky charakterizovaný především uspořádáním částic v látce, popřípadě silovým působením mezi nimi. Pro označení skupenství se také používá pojem **fáze**, který je však obecnější než skupenství, neboť látka může za různých teplot a tlaků existovat v jednom skupenství, ale v různých fázích, lišících se např. krystalovou stavbou, magnetickým uspořádáním, atd.

Čistá látka může v rovnovážném stavu za dané teploty a tlaku existovat buď v jedné, ve dvou, nebo nejvýše ve třech fázích současně. To je graficky popisováno **fázovým diagramem** (Tp diagram). Jednotlivé oblasti roviny grafu odpovídají existenci jediné fáze, hraniční křivky mezi oblastmi odpovídají koexistenci dvou fází a v bodech, v nichž se setkávají tři křivky (tzv. trojný bod), mohou existovat současně tři fáze. Nejčastěji rozlišujeme tři skupenství pevné, kapalné a plynné, která jsou běžná v našem okolí. Jako čtvrté skupenství bývá často označováno plazma.

Pevná látka se vyznačuje pevným, často pravidelným uspořádáním částic. Těleso z pevné látky drží svůj tvar, i když není uzavřeno do nějakého objemu. Síly mezi částicemi pevné látky jsou obvykle silnější než síly, které by způsobily jeho rozpad.

V **kapalině** jsou částice látky stále drženy pohromadě slabými silami, ale již nejsou pevně uspořádány. Kapaliny jsou téměř nestlačitelné (ideální kapalina je nestlačitelná). Kapalinu je nutno uchovávat v nádobách, protože nedokáže udržet svůj tvar.

Částice **plynu** již nejsou drženy pohromadě žádnými silami a ovlivňují se pouze při vzájemných srážkách. Oproti kapalině jsou plyny mnohem snadněji stlačitelné. Plyn nelze skladovat v otevřené nádobě, musíme ho uzavřít ze všech stran, protože ačkoli střední volná dráha částic je obvykle poměrně malá, postupem času by z otevřené nádoby vyprchával a mísil se s atmosférou. Plyny řadíme společně s kapalinami mezi tekutiny. Za čtvrté skupenství se obvykle považuje **plazma**. Je to trochu zvláštní skupenství, protože chemie již nedokáže popsat chování látek v něm. Plazma je v podstatě plyn, ve kterém dochází k samovolné ionizaci.

Jako páté skupenství se někdy uvádí kvark-gluonové plazma, které se dosahuje při velmi vysoké teplotě (větší než 10^{12} K), kdy se kvarky a gluony začnou chovat jako volné částice. V tomto případě již ztrácí smysl mluvit o prvcích, ze kterých je látka složena. Poprvé bylo pozorováno v 90. letech 20. století při srážkách jader těžkých prvků na urychlovačích.

4.1.1 Přejechy mezi skupenstvími

4.1.1.1 Pevná látka – kapalina

Přejechu od pevné látky ke kapalině se říká tání. Opačný jev se nazývá tuhnutí. Aby těleso přešlo z pevné fáze do kapalné, musíme mu dodat skupenské teplo tání. Na mikroskopické úrovni se to rovná dodání energie částici, která bude větší než energie vazby, která částici v pevné látce drží. Není potřeba, aby pevné

těleso mělo nějakou konkrétní teplotu, aby se některé částice z něj uvolňovaly do kapalně fáze. V případě ale, že teplota dosáhne bodu tání, přechod do kapalně fáze nastane spontánně v celém jeho objemu.

4.1.1.2 Kapalína - plyn

Přechodu od kapaliny k plynu se říká vypařování. Opačný jev se nazývá kondenzace. Aby těleso přešlo z kapalně fáze do plynně, musíme mu dodat skupenské teplo varu. Na mikroskopické úrovni se to rovná dodání energie částici, která bude větší než energie vazby, která částici v kapalině drží. Není potřeba, aby kapalně těleso mělo nějakou konkrétní teplotu, aby se některé částice z něj uvolňovaly do plynně fáze. V případě ale, že teplota dosáhne bodu varu, přechod do plynně fáze nastane spontánně v celém jeho objemu. Tehdy mluvíme o varu.

4.1.1.3 Pevná látka – plyn

Pokud částici na mikroskopické úrovni dodáme tolik energie, že se přetrhne nejen vazba, která ji držela na pevném místě, ale také vazba, která by ji udržela v kapalině, částice se uvolní jako plyn. V některých vhodných případech lze tento přechod pozorovat i na makroskopické úrovni a říká se mu sublimace. Opačný jev se nazývá desublimace.

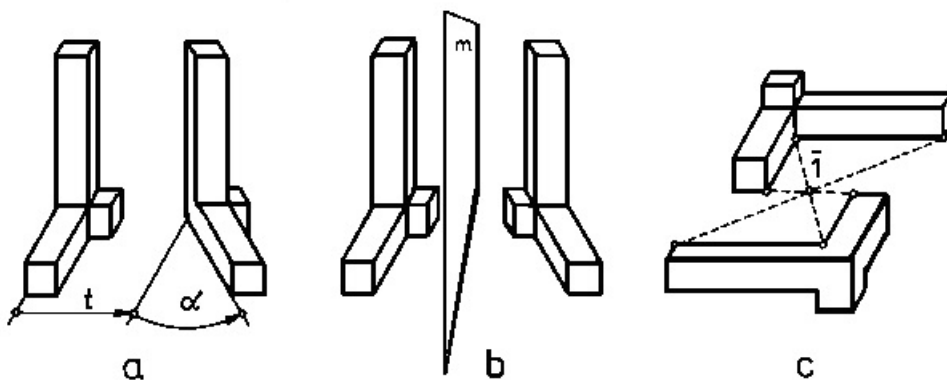
4.1.1.4 Přechod k plazmatu

Zde není rozhodující, zda první skupenství je plynně, kapalně nebo pevně. Látka se změní kvalitativně v úplně novém směru - uvolní část nebo všechny své elektrony z atomových obalů. Rozhodující přitom není, jak silná ionizace proběhne, ale zda tato ionizace bude mít vliv na kolektivní chování látky. I velmi slabě ionizovaná látka může být plazmatem (například ionosféra), ale na druhou stranu třeba plamen ohně se za plazma obvykle nepovažuje.

O bližší vnitřní struktuře látek můžeme hovořit v podstatě jen v pevném skupenství, ačkoliv existuje i takzvaný kapalně-krystalický stav. Nebo pokud máme například roztok polymerů, lze z rentgenové difrakce zjistit informace o vnitřní struktuře. V dalším výkladu se budeme ale zabývat atomovou strukturou pevných látek.

4.1.2 Atomová struktura pevných látek

Pevné látky můžeme z hlediska struktury rozdělit na **amorfní** a **krystalické**. Amorfní látky nemají žádnou pravidelnou vnitřní strukturu, u krystalických ji naopak pozorujeme. Krystalické látky mohou být **monokrystalické** - tzn., že látku tvoří jeden souvislý krystal, nebo **polykrystalické** - látka je tvořena ze spousty malých monokrystalických zrn, které vůči sobě nemusí být nijak pravidelně uspořádány. Význam pojmu krystal se s časem měnil. Prvotní přístup spočíval v charakteristice krystalů na základě jejich vnějšího tvaru. Existence vnějších přirozených krystalových ploch však není podstatná při posuzování, zda je látka krystalická, neboť tyto plochy nemusí při růstu krystalu vznikat nebo mohou být záměrně porušeny.



Obrázek 4.1: a) translace a rotace b) zrcadlení c) inverze

Dnes se pod pojmem krystal rozumí trojrozměrně periodická atomová struktura a patří sem nejenom minerály, ale i například slitiny kovů.

Pro popis struktury a symetrie je dobré zavést **ideální krystal**. Ideální krystal je nekonečný a jeho struktura je zcela pravidelná. Tímto zavedením jsme tedy zanedbali atomy na povrchu krystalu - všechny atomy považujeme za vnitřní. Základním rysem ideálního krystalu je translační periodicitu. Projevuje se pravidelným opakováním nějakého motivu (hmotné báze) ve třech rozměrech. Hmotnou bázi může tvořit jeden atom, ale také až tisíce atomů (u některých organických struktur), základní motiv je obecně asymetrický a může nabývat "pravých" a "levých" poloh (viz. dále).

4.1.2.1 Prvky symetrie

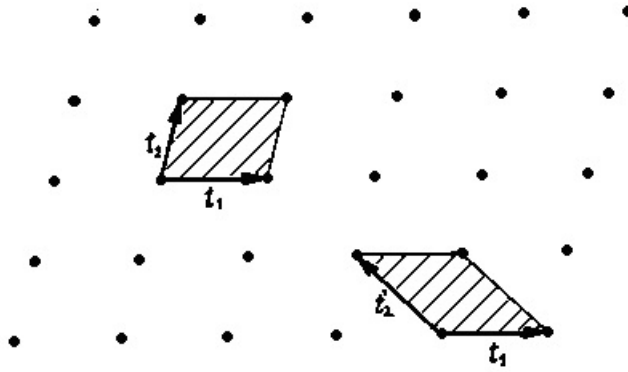
Pravidelný vzor lze ze základního motivu vytvořit operacemi opakování - translace, rotace, zrcadlení a inverze, nebo operacemi z předchozích složených. Inverze a zrcadlení převádí "pravé" objekty na "levé" (viz. obrázek 1.1).

[?] Pravidelný vzor vytvořený těmito operacemi opakování je pak symetrický, tj. přechází sám v sebe operacemi symetrie, neboli je symetrický vůči určitým prvkům symetrie a jejich kombinacím.

Prvkem symetrie nazýváme množina bodů, které se při operaci symetrie nepohybují. Takovými prvky symetrie jsou např. n -četná osa otáčení (označení n), rovina zrcadlení (označení m z angl. "mirror"- zrcadlo) nebo střed symetrie (označení i od "inverze").

Zajímáme-li se spíše o geometrii vzoru vzniklého translačním opakováním ve třech rozměrech než o detaily opakování motivu, může být vzor reprezentován body, které se opakují ve třech směrech s periodami t_1 , t_2 a t_3 .

Takováto trojrozměrně periodická množina bodů se nazývá prostorová mříž. Je-li libovolný motiv umístěn tak, že jeho vybraný bod padne na jeden z bodů mříže, pak se automaticky objeví tento motiv v okolí každého mřížového bodu a motivy jsou umístěny tak, že koincidují vždy stejným bodem s body mříže. **Mříž je tedy geometrické místo bodů, které mají stejné a stejně orientované okolí.** Z této definice vyplývá, že volba počátku mříže je libovolná. Často bývá nesprávně mříž pokládána za množinu bodů odpovídajících středům všech atomů v dané struktuře. Mřížové body nemusí ležet ve středech atomů, ale když je počátek mříže zvolen ve středu jednoho z atomů, pak se další mřížové body mohou



Obrázek 4.2: Výběr základních translací, primitivní buňka

vyskytovat pouze ve středech atomů totožných s atomem v počátku (avšak pouze takových, které mají stejnou polohu v opakovaném motivu).

4.1.2.2 Základní buňka

Mříž může být reprezentována trojicí vektorů \vec{t}_1 , \vec{t}_2 a \vec{t}_3 , zvolených tak, že libovolnému mřížovému bodu odpovídá vektor

$$\vec{T} = u\vec{t}_1 + v\vec{t}_2 + w\vec{t}_3 \quad (4.1)$$

a u , v , w jsou celá čísla. Jsou-li vybrány vektory \vec{t}_1 , \vec{t}_2 a \vec{t}_3 , je mříž jednoznačně definována vztahem (1.1). Naopak však daná mříž neurčuje jedinou trojici základních translací, jak je vidět ve dvojrozměrném případě na obr. 1.2.

V podstatě můžeme zvolit základní translace dvojím způsobem:

a) Obsahuje-li rovnoběžnostěn vymezený základními translacemi pouze jediný mřížový bod, je tento rovnoběžnostěn nazýván primitivní buňka.

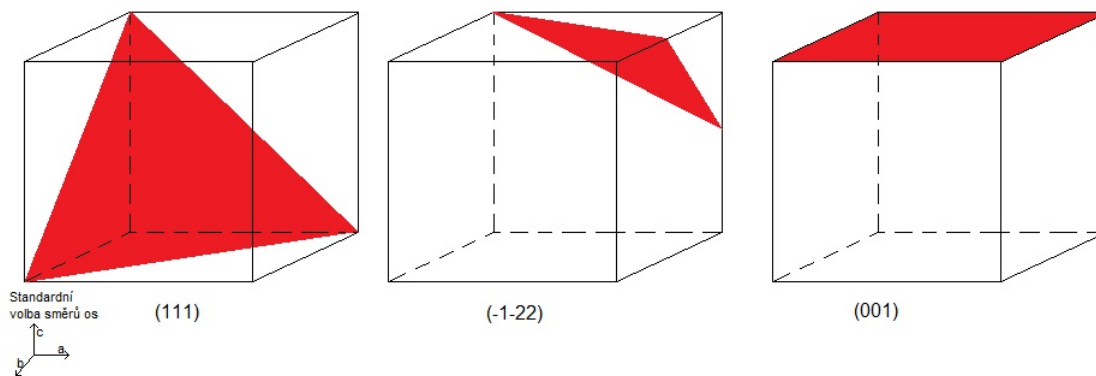
b) Obsahuje-li rovnoběžnostěn vymezený základními translacemi více mřížových bodů, je tento rovnoběžnostěn nazýván centrovaná buňka.

Lze snadno dokázat, že všechny primitivní buňky mají stejný objem (viz obr. 1.2) a že tento objem je minimální, jaký může buňka mříže mít. Centrovaná buňka má pak objem o celistvém násobku primitivní buňky.

4.1.2.3 Krystalografické směry a roviny

Rovina, která prochází třemi mřížkovými body, které neleží na jedné přímce, se nazývá mřížová rovina. Existuje celá posloupnost takovýchto navzájem rovnoběžných rovin - osnova. Orientaci mřížové roviny (respektive celé osnovy) vůči krystalografickým osám popisují Millerovy indexy h , k , l . Jsou to celá nesoudělná čísla, udávající, jaký úsek vytne rovina na krystalografických osách a , b , c (respektive na kolik dílů rozdělí osnova krystalografické osy). Pokud je rovina rovnoběžná s nějakou z os, příslušný Millerův index je 0. Roviny zapisujeme v kulatých závorkách (hkl) . Jak to funguje snadno pochopíte z následujícího obrázku 1.3.

Podle zadaných indexů je nutné si pro pohodlí při zakreslování dobře zvolit počátek - směry os jsou naznačeny na obrázku vlevo dole, na levém a pravém



Obrázek 4.3: Příklady indexování mřížových rovin

obrázku je počátek vlevo dole vzadu, na prostředním je počátek vzadu vpravo nahoře.

Jednotlivé roviny osnovy mají od sebe konstantní vzdálenost - mezirovinnou vzdálenost. Uvědomíme-li si, že počátkem souřadných os prochází také jedna rovina osnovy, pak můžeme mezirovinnou vzdálenost chápat jako vzdálenost počátku od nejbližší roviny. Obecně platí:

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{h}{a}\right)^2 + \left(\frac{k}{b}\right)^2 + \left(\frac{l}{c}\right)^2}} \quad (4.2)$$

což se volbou krystalové soustavy (viz. dále) může zjednodušit. Například pro kubickou:

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (4.3)$$

Krystalografické směry se popisují symbolem $[uvw]$, kde u , v , w jsou nesoumělná celá čísla odpovídající složkám vektoru mířícího z počátku do mřížového bodu:

$$\vec{t} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c} \quad (4.4)$$

4.1.2.4 Mřížce

Pokud má být prvek symetrie přítomen v krystalech, musí být zároveň zachována translační periodicitata. To například pro rotaci znamená, že jsou povoleny jen určité n -četné osy. Jsou povoleny pouze 2, 3, 4 a 6-ti četné (1-četná = identita). Absenci 5-ti četné osy můžeme pro rovinné mřížce lehce vysvětlit tak, že nemůžeme pravidelnými pětiúhelníky vyplnit celou rovinu, aniž by nevznikly nějaké díry. To ovšem neznamenaá, že se v přírodě 5-ti četná osa symetrie nevyskytuje. 5-ti četnou osu můžeme najít například u kvazikrystalů (viz. například <http://cs.wikipedia.org/wiki/Kvazikrystal>).

4.1.2.5 Krystalové soustavy

Soubor prvků symetrie krystalu se nazývá bodová grupa a prostorová mříž krystalu musí být v souladu s jeho bodovou grupou. Dá se ukázat, že existují určité prvky symetrie společné vždy pro určitou skupinu bodových grup, což vede k přirozenému rozdělení krystalů do krystalových soustav podle těchto společných

prvků symetrie. Krystalové soustavy byly vzhledem ke své užitečnosti pojmenovány. Jsou uvedeny v tabulce 1.1 (názvosloví není zcela jednotné, v závorce jsou uvedeny ekvivalentní označení) spolu se společnými minimálními prvky symetrie, což jsou minimální symetrie postačující k zařazení krystalu do dané krystalové soustavy - jsou diagnostickými prvky každé soustavy.

Tabulka 1.1: Krystalové soustavy

krystalová soustava	minimální symetrie
triklinická (trojklonná)	žádná
monoklinická (jednoklonná)	jedna 2-četná osa podél c
Ortorombická (rombická, kosočtverečná)	tři 2-četné osy podél a, b, c
tetragonální (čtverečná)	jedna 4-četná osa podél c
kubická (izometrická)	čtyři 3-četné osy podél tělesových úhlopříček krychle
hexagonální (šesterečná)	jedna 6-četná osa podél c
Trigonální (romboedrická, klencová)	jedna 3-četná osa podél hexagon. buňky

Existuje pouze pět různých typů rovinných mříží (obr. 1.4), tyto mříže vyhovují operacím symetrie prvků 1,2,3,4,6 a m. Nejobecnější rovinná mříž - rovnoběžníková - je konzistentní s 1 a 2. Rovina zrcadlení m vyžaduje kolmost řad mřížových bodů k m a této podmínce vyhovuje mříž pravoúhlá a diamantová. Trojúhelníková mříž s úhlem mezi osami 120° vyhovuje 3 a 6 a čtvercová mříž je konzistentní se 4. Osy otáčení a roviny zrcadlení jsou kolmé k rovině mříže. Mříže s vyšší symetrií obsahují též prvky symetrie mříží o nižší symetrii.

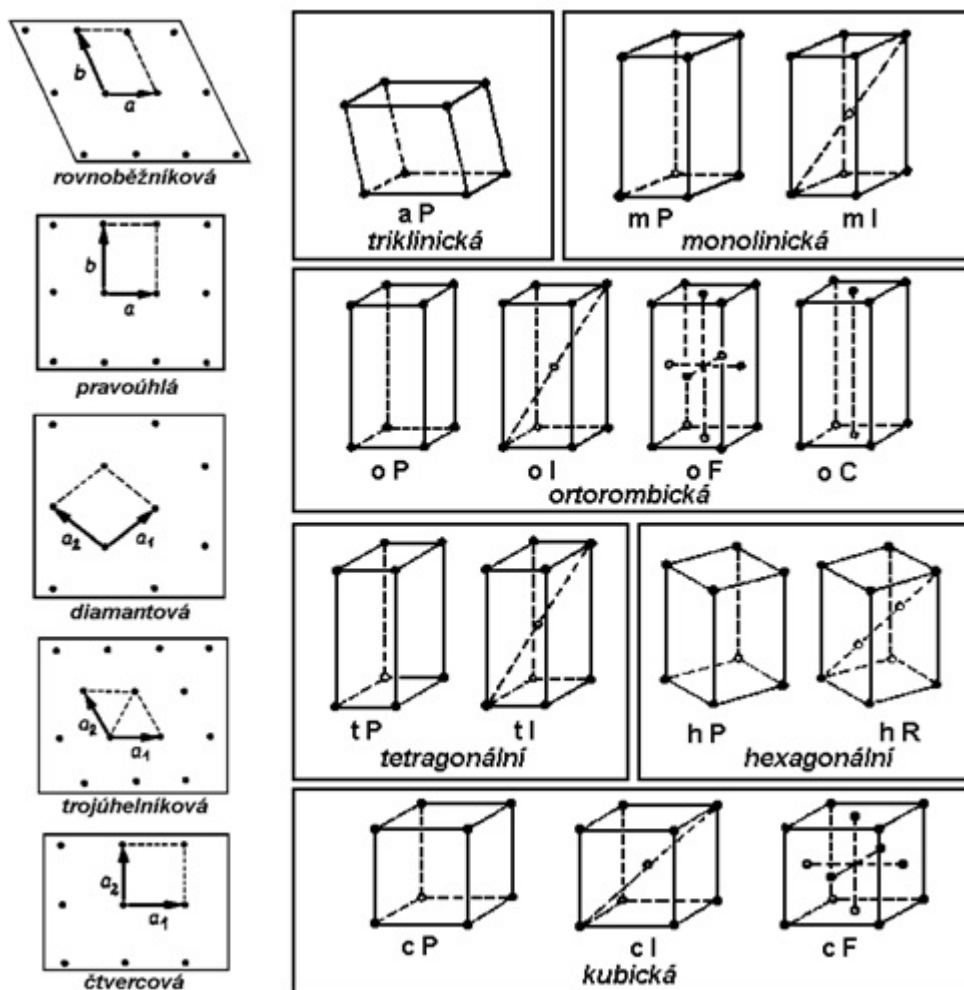
Trojrozměrné mříže si můžeme představit jako sled rovinných mříží vzniklý periodickým opakováním těchto rovinných mříží translací ve třetím rozměru. Dá se dokázat (např. systematickým vyšetřováním možných způsobů vrstvení rovinných mříží), že existuje pouze 14 různých prostorových mříží. Nazývají se také Bravaisovy mříže podle autora prvního úplného odvození (r. 1850). Jejich grafické znázornění je na obr. 1.4.

Tab.1.2: Typy prostorových mříží z hlediska centrování

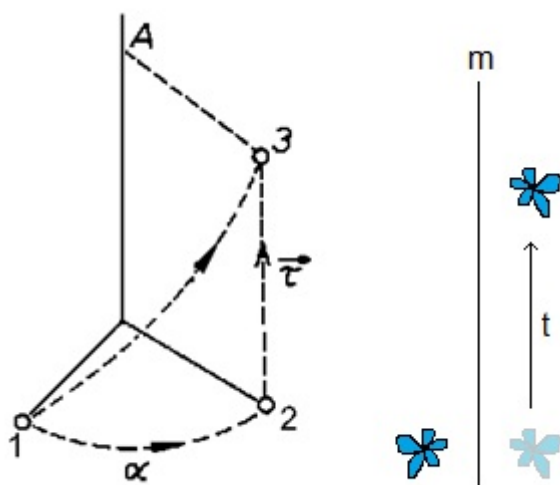
Symbol	Typ centrování	Souřadnice mřížových bodů v buňce
P	Primitivní	0, 0, 0
C	bazálně centrovaná	0, 0, 0; 1/2, 1/2, 0
A	bazálně centrovaná	0, 0, 0; 0, 1/2, 1/2
B	bazálně centrovaná	0, 0, 0; 1/2, 0, 1/2
I	prostorově centrovaná	0, 0, 0; 1/2, 1/2, 1/2
F	plošně centrovaná	0, 0, 0; 1/2, 1/2, 0; 0, 1/2, 1/2; 1/2, 0, 1/2
R	romboedricky centrovaná vzhledem k hexagonálním osám	0, 0, 0; 2/3, 1/3, 1/3; 1/3, 2/3, 2/3
R	primitivní vzhledem k romboedrickým osám	0, 0, 0

Nakonec můžeme k zatím studovaným prvkům symetrie přidat další - šroubové osy a roviny skluzu. V případě šroubové osy se jedná o kombinaci rotační osy a posunutí ve směru rovnoběžném s osou. V případě roviny skluzu je to kombinace zrcadlení a posunutí ve směru rovnoběžném s rovinou zrcadlení.

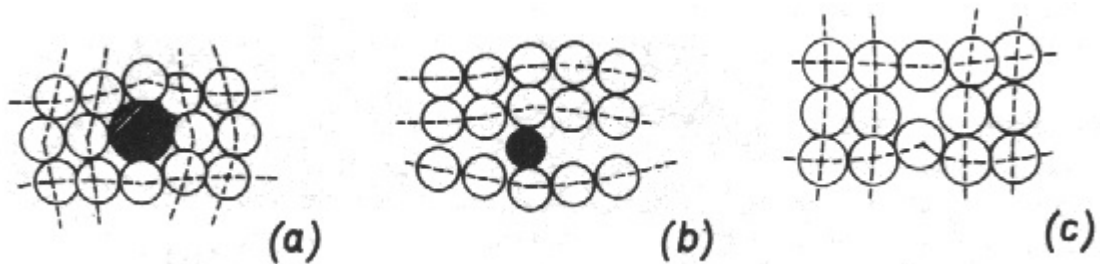
Přidáním těchto prvků symetrie dostaneme prostorové grupy. Takovýchto **prostorových grup** symetrie může být pouze 230.



Obrázek 4.4: Rovinné a prostorové mříže



Obrázek 4.5: Šroubová osa a skluzová rovina



Obrázek 4.6: a) substituce b) intersticiál c) vakance

4.1.2.6 Nejtěsnější uspořádání

Pokud budeme brát jednotlivé atomy jako koule, lze atomy uspořádat v mřížce tak, aby zaujímali co nejmenší objem. Takovéto struktury se vyskytují tam, kde jsou vzájemné síly sféricky (nebo alespoň přibližně sféricky) symetrické (viz. odstavec o vazbách). Pokud budeme na sebe vrstvit roviny s atomy v hexagonální struktuře, nejtěsnějšího uspořádání docílíme dvěma způsoby. Koule z vyšší vrstvy musí vždy padnout do "díry", která je mezi koulemi v nižší vrstvě. Takto se dá docílit vrstvení typu ABABAB a ABCABC (při vrstvení třetí roviny máme totiž dvě možnosti, jak rovinu umístíme). Koordinační číslo (počet nejbližších sousedních atomů) v těsném prostorovém uspořádání je 12. S takovýmto koordinačním číslem zaplní koule 74% celkového objemu.

4.1.2.7 Poruchy krystalových struktur

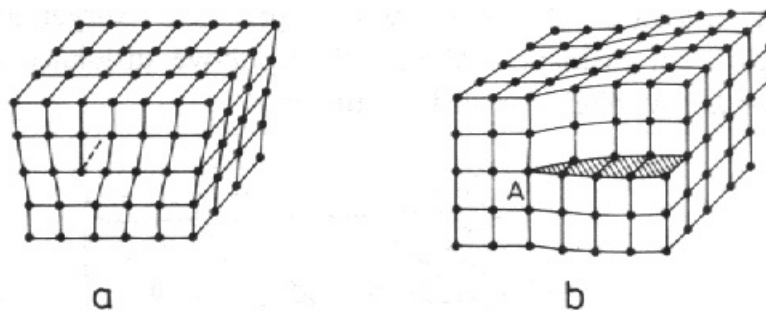
Doposud jsme se zabývali ideálními krystaly. V reálných krystalech se však vždy vyskytují určité odchylky od ideální periodické krystalové struktury. Každou takovou odchylku nazýváme porucha. Velmi často a obvykle dělíme poruchy krystalové mřížky do několika skupin podle toho, v kolika dimenzích se jejich rozměry liší od rozměrů atomů. Podle této geometrické klasifikace rozlišujeme poruchy **bodové**, **čárové**, **plošné a objemové**. Mnohé vlastnosti reálných krystalů, které jsou vždy nedokonalé, jsou velmi silně závislé na množství a druhu poruch krystalové struktury.

Bodové poruchy - vakance, substitučně zabudovaný atom, intersticiálně zabudovaný atom, nebo kombinace předchozích.

Dislokace - na obr. 1.7a je znázorněna hranová dislokace. Její vznik si můžeme představit tak, že krystal byl rozříznut podél roviny procházející shora dolů a do vzniklého řezu byla vložena polorovina. Podobnou situaci bychom obdrželi, kdybychom v dolní části krystalu jednu atomovou polorovinu odstranili. Okraj vložené poloroviny je čárová porucha.

Šroubová dislokace je znázorněna na obr. 1.7b. Její vznik si můžeme představit tak, že krystal byl rozříznut v rovině, která je na obr. 1.7b vyšrafovaná až k přímce procházející bodem A kolmo na čelní stěnu. Horní část krystalu byla zasunuta dozadu o jednu meziatomovou vzdálenost a pak byl krystal opět spojen. Maximální porušení je podél přímky procházející bodem A, kolem dislokační čáry.

Plošné poruchy - změna koordinace atomů celé roviny může vzniknout například poruchou v pravidelnosti vrstvení rovin během krystalizace (viz. např. odstavec o nejtěsnějším uspořádání). Změna v pravidelnosti vrstvení atomových rovin se nazývá **vrstevná porucha**.



Obrázek 4.7: a) Hranová dislokace b) Šroubová dislokace

Objemové poruchy - stejně jako se u dislokací projevuje tendence ke shlukování podél rovin, tak také bodové poruchy mají tendenci ke shlukování. Vakance se mohou např. shlukovat a vytvářet větší dutiny v krystalech, které se mohou dále rozpadnout na dislokace nebo tvořit trhliny. Intersticiální atomy se mohou shlukovat a vytvářet precipitáty různých tvarů, např. shlukováním podél určitých rovin vznikají dvojrozměrné precipitáty.

4.1.3 Difrakce

Pro studium vnitřní struktury pevných látek se používá rentgenová, popřípadě elektronová nebo neutronová difrakce. Důvod, proč se nepoužívá světlo z viditelného spektra je ten, že vlnová délka musí být srovnatelná s meziatomovými vzdálenostmi, které jsou v řádech Angströmů.

Abychom dokázali difrakci na krystalu popsat, musíme zavést reciprokou mřížku. Její translační vektory definujeme pomocí translačních vektorů přímé mřížky vztahem:

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \quad (4.5)$$

a cyklicky dále. Nebo můžeme tento vztah zapsat jako

$$\begin{pmatrix} \vec{b}_1 & \vec{b}_2 & \vec{b}_3 \end{pmatrix}^T = 2\pi (\vec{a}_1 \vec{a}_2 \vec{a}_3)^{-1}, \quad (4.6)$$

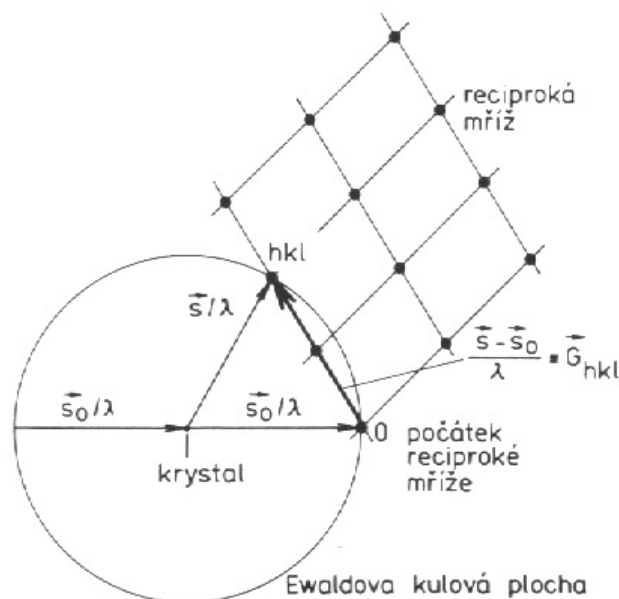
kde $\begin{pmatrix} \vec{b}_1 & \vec{b}_2 & \vec{b}_3 \end{pmatrix}$ chápeme jako matici, která má ve sloupcích vektory \vec{b}_1 , \vec{b}_2 , \vec{b}_3 analogicky matice na pravé straně rovnice. Libovolný vektor reciproké mřížky je pak

$$\vec{G}_{uvw} = u\vec{b}_1 + v\vec{b}_2 + w\vec{b}_3, \quad (4.7)$$

kde u , v a w jsou celá čísla. Dá se odvodit, že velikost vektoru reciproké mříže souvisí s mezirovinnou vzdáleností:

$$d_{hkl} = \frac{1}{|\vec{G}_{uvw}|} \quad (4.8)$$

Důvod, proč zavádíme reciprokou mříž je ten, že výsledný difrakční obrazec je její mapa. Reciproká mříž je Fourierův obraz přímé mříže.



Obrázek 4.8: Ewaldova konstrukce

4.1.3.1 Ewaldova konstrukce, Braggův zákon a Laueho podmínky

Difrakce na krystalu je v podstatě odraz vlnění od osnovy krystalových rovin. Při difrakci na krystalu musí být splněny Laueho podmínky:

$$\begin{aligned} \vec{a} \cdot (\vec{s} - \vec{s}_0) &= h\lambda \\ \vec{b} \cdot (\vec{s} - \vec{s}_0) &= k\lambda \\ \vec{c} \cdot (\vec{s} - \vec{s}_0) &= l\lambda, \end{aligned} \quad (4.9)$$

kde \vec{s}_0 je vlnový vektor dopadající vlny, \vec{s} vlny rozptýlené, λ vlnová délka dopadajícího záření. Laueho podmínky lze vyjádřit pomocí geometrické (Ewaldovy) konstrukce (obr. 1.8):

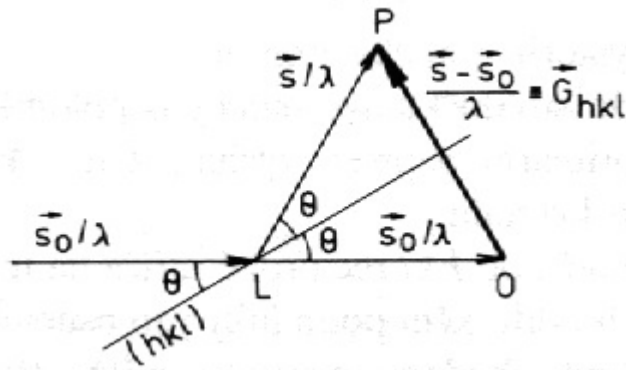
1. Krystal umístíme do středu kulové plochy o poloměru $\frac{1}{\lambda}$.
2. Do bodu 0, kde primární paprsek vychází z této kulové plochy, umístíme počátek reciproké mříže krystalu.
3. Leží-li nějaký mřížový bod hkl reciproké mříže na této tzv. Ewaldově kulové ploše, jsou splněny Laueho difrakční podmínky pro osnovu rovin (hkl) a difraktovaný svazek prochází tímto bodem reciproké mříže (tento bod leží na konci vektoru \vec{G}_{hkl} , který je kolmý k rovinám (hkl)).

Z Ewaldovy konstrukce a Laueho podmínek vyplývá, že difrakční obraz je vlastně zobrazením reciproké mříže krystalu. Tato konstrukce je také vodítkem pro realizaci difrakce monochromatického záření na vybrané osnově rovin.

Z této jednoduché geometrie se dá odvodit Braggův zákon:

$$2d_{hkl} \sin \theta = \lambda, \quad (4.10)$$

kde d_{hkl} je mezirovinná vzdálenost, θ je Braggův úhel (2θ je difrakční úhel). Je vhodné si zavést atomový a strukturní faktor - atomový faktor nám udává,



Obrázek 4.9: k odvození Braggova zákona

jak se odráží záření na atomu (respektive elektronech v elektronovém obalu).

$$f(\vec{G}) = \int \rho(\vec{r}) e^{2\pi i \vec{G} \cdot \vec{r}} dV, \quad (4.11)$$

kde $\rho(\vec{r})$ je elektronová hustota. Strukturální faktor pak zohledňuje interferenci záření od jednotlivých atomů v mřížce.

$$F_{hkl}(\vec{G}) = \sum_j f_j(\vec{G}) e^{2\pi i \vec{G} \cdot \vec{r}_j} = \sum_j f_j(\vec{G}) e^{2\pi i (x_j h + y_j k + z_j l)} \quad (4.12)$$

Zavedení strukturálního faktoru je vhodné pro studium vyhasínání reflexí.

4.2 Vazby mezi atomy

Vazby mezi atomy určují prostorové uspořádání atomů v látce. Vazby samotné jsou určeny interakcí elektronů, především elektronů valenčních. Stacionární stavy elektronů v poli jádra jsou popsány vlnovými funkcemi

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (4.13)$$

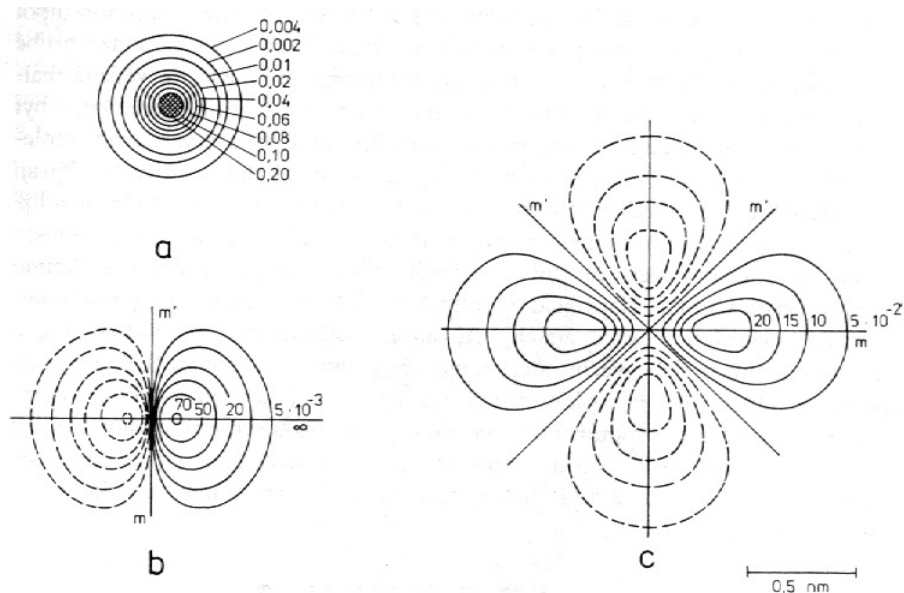
kde $R_{nl}(r)$ představuje radiální část a $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ je úhlová část (kulová funkce). Funkce řeší Schrödingerovu rovnici. Takto popsané stacionární stavy jsou kvantovány a to takto:

n - hlavní kvantové číslo, určuje energetickou hladinu elektronu, u známých atomů nabývá hodnoty $n = 1, \dots, 7$. V Bohrově modelu náleží každé n jedné elektronové slupce ($n = 1$ náleží ke slupce K, $n = 2$ k L, atd...)

l - vedlejší kvantové číslo, z hlediska kvantové mechaniky může nabývat hodnot $l = 0, 1, \dots, n - 1$. U všech známých prvků nabývá hodnot $l = 0, 1, 2, 3$ a tyto stavy označujeme s, p, d, f.

m - magnetické kvantové číslo, může nabývat hodnot $m = -l, \dots, +l$. Namísto tohoto označení se někdy používá označení ve smyslu orientace vůči souřadným osám x,y,z.

Vlnové funkce popsány těmito třemi kvantovými čísly, které popisují rozložení elektronů v obalu se nazývají atomové orbitály. Kvadrát vlnové funkce nám dává



Obrázek 4.10: a) ψ_{100} , tzn. 1s-orbital, b) ψ_{210} , tzn. 2p-orbital, c) ψ_{332}

pravděpodobnost nalezení elektronu v určitém místě, z vlnové funkce můžeme tedy určit elektronovou hustotu. Čtvrtým kvantovým číslem, které přísluší jen samotnému elektronu, je spin.

Na následujících obrázcích jsou ukázány řezy některými vlnovými funkcemi.

Jak je vidět, sféricky symetrický je pouze s-orbital. Atomy se zcela zaplněnými elektronovými slupkami mají rovněž rozložení elektronové hustoty sféricky symetrické. Ostatní orbitály jsou anizotropní - z geometrického hlediska můžeme tedy zavést pojem směrové a nesměrové vazby (viz. dále).

4.2.1 Typy vazeb

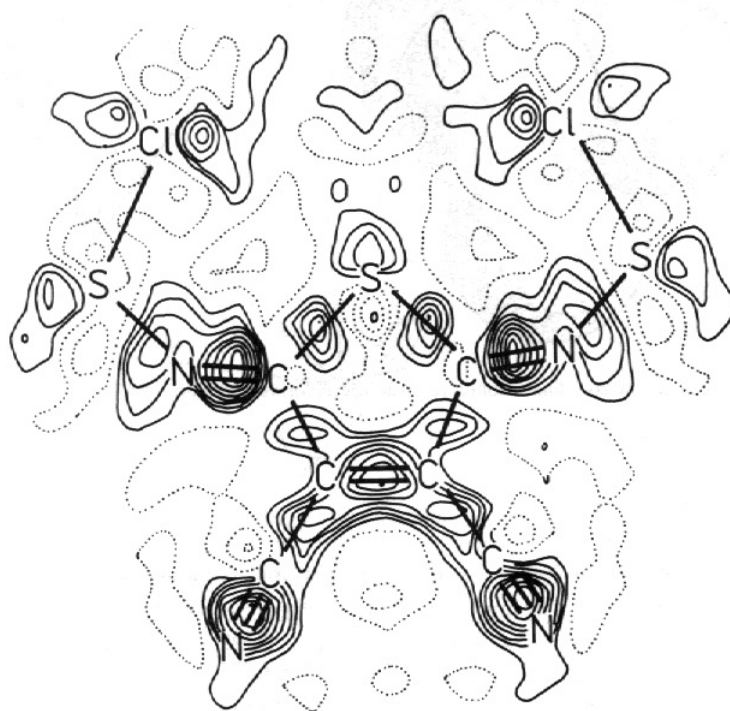
Vazby mezi atomy můžeme podle energie a charakteru interakcí rozdělit do pěti skupin:

Tabulka 2.1 - druhy vazeb

Typy vazeb	Energie vazby [$10^5 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$]
Kovalentní	4 až 6
Kovová	2 až 4
Iontová	2 až 4
Vodíková	0,2 až 0,3
van der Waalsova	0,04 až 0,08

Podle energie můžeme vazby rozdělit na silné - kovalentní, kovová, iontová, a slabé. Ve většině reálných struktur se vyskytují různé druhy vazeb. Silné vazby rozhodují o rozmístění nejbližších atomů, slabé určují například vzhled krystalu a mechanické vlastnosti látek. Krystal roste nejpomaleji ve směru slabých vazeb a štípe se pak nejsnáze kolmo k těmto vazbám.

Příkladem může být grafit - silné vazby, v tomto případě kovalentní, podmiňují vznik rovinné hexagonální struktury, slabé vazby mezi těmito rovinami jsou pak příčinou snadného skluzu atomových rovin vůči sobě a vysvětlují mazací schopnosti grafitu.



Obrázek 4.11: elektronová hustota pomocí vrstevnic

Struktury s vysokou symetrií vznikají tehdy, jsou-li energetické rozdíly mezi vazbami nejbližších atomárních sousedů malé (tj. vazby skoro stejné). Vazby můžeme dále rozdělit na směrové - kovalentní, vodíková, a nesměrové - kovová, iontová, van der Waalsova.

Atomy vázané směrovými vazbami jsou uspořádány nejvýhodnějším energetickým způsobem. Důležitou roli hraje například vznik hybridních orbitalů, které jsou silně směrové. (viz. například sp^3 hybridizace, která je příčinou toho, že vodíkové atomy vázané kovalentní vazbou k uhlíku v molekule metanu leží ve vrcholech tetraedru.)

Nesměrové vazby vznikají mezi atomy a ionty se sféricky symetrickou elektronovou hustotou.

Kovalentní vazba - je vysvětlována sdílením společných elektronových párů. Kvantová chemie vysvětluje vznik vazby pomocí metody LCAO (lineární kombinace atomových orbitalů). Kombinací atomových orbitalů vzniká pár molekulových orbitalů - vazebný a antivazebný. Vazebný je obsazován a antivazebný zůstává prázdný. V místě překryvu orbitalů vrostle elektronová hustota, kterou můžeme pozorovat i v experimentech při rentgenové difrakci (viz. následující obrázek).

Nábojová hustota je však většinou nesymetrická, a tak kovalentní vazba vede v limitním případě k iontové vazbě. Představa kombinace orbitalů je rovněž nepostačující k vysvětlení násobných vazeb, kde se některé elektrony rozprostírají přes celou molekulu a tudíž je nelze lokalizovat. S podobnou delokalizací se setkáváme i u kovů. Kovová vazba je tedy další limitou kovalentní.

Iontová vazba - je důsledkem elektrostatické interakce opačně nabitých iontů (opačné náboje se přitahují). Dá se zjistit, že celočíselný náboj iontů není vlastně celočíselný - u iontů můžeme poměrně snadno spočítat jejich objem (neboť elek-

tronová hustota jde mezi ionty poměrně rychle k nule) a tím náboj v něm obsažený.

Kovová vazba - vzniká u prvků, které snadno uvolňují svoje valenční elektrony. Ty jsou pak silně delokalizovány v meziatomovém prostoru a střední elektronová hustota je tam nenulová a konstatní. Zbývající elektronová hustota se jeví jako sféricky symetrická. Proto většina kovů tvoří struktury s nejtěsnějším uspořádáním.

Vodíková vazba - vyskytuje se u vodíku vázaného kovalentně k jinému atomu, nejčastěji dusíku nebo kyslíku. Protože je vodíkový elektron účastníkem v kovalentní vazbě, těžiště elektronové hustoty je blíže k navázanému atomu a vodík se tak začne projevovat jako elektrický dipól. Tím pádem dochází k přitahování elektronegativních atomů nebo volných elektronových párů. Drží pohromadě například molekuly vody v ledu a hrají důležitou roli v biologických účincích bílkovin a nukleových kyselin.

van der Waalsova vazba - podílí se na všech interakcích mezi atomy, v čisté podobě je však pouze u inertních plynů. Velmi energeticky slabá. Je způsobena existencí permanentních a dočasných dipólů.

4.3 Brownův pohyb

Brownův pohyb je náhodný pohyb mikroskopických částic v kapalině nebo plynu. Příčinou pohybu je to, že se molekuly vlivem tepelného pohybu neustále srážejí s pozorovanou částicí, přičemž směr a síla těchto srážek jsou náhodné, díky čemuž je i okamžitá poloha částice náhodná. Intenzita Brownova pohybu je úměrná teplotě systému, nepřímo úměrná velikosti částice a viskozitě tekutiny, ve které částici pozorujeme.

Poprvé Brownův pohyb pozoroval v roce 1827 biolog Robert Brown, když pozoroval pylová zrnka ve vodě. Brownův pohyb objasnil až Albert Einstein v roce 1905 pomocí kinetické teorie látek, za což dostal i Nobelovu cenu.

Pokud má částice velikost zhruba μ , je neustále v kontaktu přibližně se sto tisíci molekulami roztoku. Silový účinek těchto srážek ale není nulový, takže se neustále mění směr a rychlost částice. Tyto změny probíhají ale tak rychle, že každou jednotlivou změnu nelze pozorovat. Výsledné posunutí částice přesto ve výsledku nemusí být nulové.

Chceme-li vše vyjádřit kvantitativně, vyjdeme z pohybové rovnice, která například pro x-ovou složku vypadá takto:

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -\mu \frac{dx}{dt} + F_x, \quad (4.14)$$

kde m je efektivní hmotnost částice, F_x je x-ová složka síly, která vyvolává pohyb a $-\mu \frac{dx}{dt}$ značí sílu, která pohyb brzdí. Předpokládejme, že její velikost je přímo úměrná rychlosti částice v . Pozn.: Tuto sílu můžeme i přímo změřit - například, když bude částice padat tekutinou ke dnu nádoby pod vlivem tíhového pole. Po jisté době se bude částice pohybovat konstantní rychlostí, vyrovná se tedy tíhová a odporová síla $\mu v = mg$. Budeme uvažovat Stokesův vztah pro pohyb kulových částic v prostředí o viskozitě η .

$$|F_{odpor}| = 6\pi r \eta v, \text{ tedy } \mu = 6\pi r \eta, \quad (4.15)$$

kde r je poloměr částice. Protože je střední hodnota libovolné složky rychlosti molekul v roztoku nulová, bude nulová i střední hodnota složek rychlosti částice. Posunutí částice v kladném i záporném smyslu v libovolném směru je stejně pravděpodobné, střední hodnota posunutí částice v libovolném směru bude tedy také nulová. Náš cíl bude tedy hledat střední hodnotu druhé mocniny posunutí částice, tedy $\langle x^2 \rangle$. Rovnici (1.14) vynásobíme x :

$$mx \frac{d^2x}{dt^2} = -\mu x \frac{dx}{dt} + xF_x \quad (4.16)$$

Derivace můžeme upravit takto:

$$x \frac{d^2x}{dt^2} = \frac{d}{dt} \left(x \frac{dx}{dt} \right) - \left(\frac{dx}{dt} \right)^2$$

$$x \frac{dx}{dt} = \frac{1}{2} \frac{dx^2}{dt}$$

Dosazením zpět do (1.16) dostaneme:

$$m \frac{d}{dt} \left(x \frac{dx}{dt} \right) - m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + \mu \frac{1}{2} \frac{dx^2}{dt} = xF_x \quad (4.17)$$

Nyní celou rovnici (1.17) vystředujeme. Střední hodnota x a $\frac{dx}{dt}$ je nulová. To neimplikuje nulovost střední hodnoty jejich součinu, nicméně uvažme, že x nezávisí na $\frac{dx}{dt}$ a naopak (vysvětleno v *Molekulová fyzika - Bakule, Svoboda*). Proto bude střední hodnota jejich součinu nulová. Ze stejného důvodu bude nulová i střední hodnota součinu polohy a síly na pravé straně rovnice (1.17). Po vystředování tedy dostaneme:

$$m \langle v^2 \rangle + \mu \frac{1}{2} \frac{d \langle x^2 \rangle}{dt} = 0, \quad (4.18)$$

kde $\langle v^2 \rangle$ je střední kvadratická rychlost. Aplikujeme kinetickou teorii - částice jsou v rovnováze s molekulami prostředí, to znamená, že na každý stupeň volnosti připadá na částici energie $\frac{k_B T}{2}$, tedy $m \langle v^2 \rangle = k_B T$. Dostáváme tedy:

$$\frac{dx^2}{dt} = \frac{2k_B T}{\mu} \quad (4.19)$$

Jednoduchou integrací dostáváme (s úvahou, že $\langle x^2 \rangle = 0$ v čase $t = 0$), že střední kvadratické posunutí podél osy x je přímo úměrné času, tedy

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2k_B T}{\mu} t \quad (4.20)$$

Směr osy x jsme vybrali náhodně, střední kvadratické posunutí podél dalších os vyjde stejně. Máme tedy:

$$\langle R^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle + \langle z^2 \rangle = 3 \langle x^2 \rangle \quad (4.21)$$

Po dosazení pro μ ze Stokesova vztahu (1.15) dostáváme:

$$\langle R^2 \rangle = \frac{k_B T}{\pi r \eta} t \quad (4.22)$$

Tento výraz má značný význam - měření Brownova pohybu nám dobře umožňuje určit Boltzmannovu konstantu.

5. Základy termodynamiky a statistické fyziky

Teplota, teplota, tepelná kapacita. Termodynamické potenciály. Hlavní věty termodynamiky. Ideální plyn. Stavová rovnice, Carnotův cyklus. Fázový prostor, rozdělovací funkce. Liouvilleova rovnice. Základní statistická rozdělení. Entropie ve statistické fyzice.

Termodynamika představuje přemostění mezi fyzikou mikrosvěta a makrosvěta. Podává statistický popis velkého souboru částic nacházejícího se v termodynamické rovnováze. Klíčovou zákonitostí, kterou se při hledání rovnováhy musíme řídit, je princip maximalisace entropie, v určitých případech výhodně zaměnitelný za princip minimalisace některého z termodynamických potenciálů.

5.1 Stavové veličiny a rovnice

Termodynamický systém v rovnovážném stavu je popsán malým počtem stavových veličin (U, V, S, P, T), jež představují prostorové a časové vystředování vlastností všech částic systému. Vztahy mezi stavovými veličinami (platné opět jen v rovnováze!) nazýváme stavovými rovnicemi. Z výše uvedených pěti veličin můžeme sestavit třicet rovnic tvaru $A = A(B, C)$, tato soustava pak podává úplnou makroskopickou informaci o systému. K úspoře místa a inkoustu však postačí znát rovnici jedinou, mistrovskou, ze které všechny ostatní odvodíme.

$$U = U(S, V) \quad \text{nebo} \quad S = S(U, V) \quad \text{nebo} \quad V = V(U, S) \quad (5.1)$$

Rovnovážný stav

Uspořádání systému nezávislé na minulosti, reprodukovatelné, bez makroskopických toků energie a hmoty. Každý izolovaný systém k rovnovážnému stavu spěje a pouze v něm je konsistentně popisován nástroji termodynamiky.

Intenzivní veličina

Parametr systému, který se při propojení dvou shodných termodynamických systémů v rovnováze nezmění. Například teplota T , tlak P , chemický potenciál μ . Taktéž podíl dvou extenzivních veličin je veličinou intenzivní.

Extenzivní veličina

Parametr, který se při propojení dvou shodných termodynamických systémů zdvojnásobí. Například objem V , počet částic N , vnitřní energie U .

Makrostav

Zobrazení maximální zjistitelné informace o termodynamickém systému určené všemi makroskopickými experimenty. (Součet teček na dvou kostkách, zadání teploty a objemu.)

Mikrostav

Zobrazení nejpodrobnější principiální informace o termodynamickém systému. (Uvedení počtu teček na každé kostce, zadání souřadnic a hybností všech částic.)

5.2 Hlavní věty termodynamiky

5.2.1 První věta termodynamiky

První věta termodynamiky má význam zákona zachování energie a praví, že změna vnitřní energie termodynamického systému je rovna rozdílu dodaného tepla a odevzdané práce. V diferenciální formě ji zapíšeme jako

$$dU = \delta Q - \delta W \quad (5.2)$$

kde δ značí "neúplný" diferenciál, jenž se různí podél různých spojnic dvou rovnovážných stavů (přesněji řečeno jeho integrál závisí na cestě, viz [2]).

Teplo

Forma přenosu energie mezi systémem a okolím. Jedná se o energii neuspořádaného pohybu všech částic systému. Nelze je bezprostředně měřit.

Práce

Je-li konána systémem, pokládejme výše uvedené δW kladné. Charakterisujeme ji změnou v okolí. Systém konal práci, pokud podléhal dějům, které lze převést na "zdvihání cihly" v okolním vesmíru. Při adiabatické volné expansi ideálního plynu se práce nekoná.

5.2.2 Druhá věta termodynamiky

Druhá věta termodynamiky předkládá omezení na činnost tepelných strojů. Teplo z tepelného reservoáru nelze navěky beztržně převádět na práci, což lze vyjádřit různými způsoby.

Teplo nemůže samovolně přecházet ze soustavy o nižší teplotě do soustavy o teplotě vyšší. (R. Clausius)

Nelze sestavit perpetuum mobile druhého druhu. (W. Oswald)

Není možné zkonstruovat periodicky pracující stroj, který by odebíral teplo z reservoáru a vykonával práci. (M. Planck)

Tepelný stroj

Zařízení převádějící teplo na práci (či naopak). Pracovní látka je přitom periodicky zahřívána a ochlazována kontaktem se dvěma tepelnými reservoáry. Účinnost tepelného stroje definujeme jako poměr vykonané práce W k dodanému teplu Q_1 . Písmenko Q_2 představuje teplo odevzdané chladiči.

$$\eta = \frac{W}{Q_1} = 1 - \frac{Q_2}{Q_1} \quad (5.3)$$

5.2.3 Třetí věta termodynamiky

Za třetí větu termodynamiky bývá označován Nernstův postulát, který říká, že entropie při absolutní nule vymizí (což ovšem neplatí zcela přesně, opět viz [2]). **Entropie** S je extenzivní stavovou veličinou, která při vratném ději splňuje

$$dS = \frac{\delta Q}{T}, \quad (5.4)$$

v obecném případě však bývá větší. Z mikroskopického hlediska je provázána s multiplicitou makrostavu Ω skrze známou Boltzmannovu definici

$$S = k_b \ln \Omega \quad (5.5)$$

Princip maximalisace entropie zde pak odpovídá hledání stavu s nejvyšší multiplicitou. Systém je v rovnováze, pokud se nachází v nejpravděpodobnějším uspořádání.

Multiplicita

Počet mikrostavů odpovídajících danému makrostavu.

5.3 Carnotův cyklus

Horní hranice účinnosti tepelného stroje je nastavena Carnotovým cyklem. Označme teplejší rezervoár písmenem H, chladnější písmenem C, a mějme válec naplněný pracovní látkou (plynem) a opatřený pístem. Carnotův cyklus pak lze popsat ve čtyřech krocích.

1. Válec přiložíme k tepelnému rezervoáru H a necháme jej **isotermicky expandovat**. Práce se odvádí do pracovního rezervoáru, válec přijímá teplo od H.
-W, +Q
2. Oddělíme válec od zdroje H a necháme jej **adiabaticky expandovat**, dokud se neochladí na teplotu C. Vykonaná práce je opět odvedena do pracovního rezervoáru.
-W
3. Válec přiložíme k tepelnému rezervoáru C a necháme jej **isotermicky komprimovat**. Tentokrát je práce do systému dodávána a teplo se odvádí do C.
+W, -Q
4. Oddělíme válec od chladiče C a necháme jej **adiabaticky komprimovat**, dokud se nepřevéde do počátečního stavu. Práce byla do systému opět dodána.
+W

V první větvi cyklu bylo válcem přijato teplo $Q_1 = T_h \Delta S$, ve třetí naopak odevzdal teplo $Q_3 = T_c \Delta S$. Rozdíl těchto dvou tepel $(T_h - T_c) \Delta S$ odpovídá celkové práci vykonané systémem, neboť změna vnitřní energie musí být u cyklického

procesu nulová. Účinnost Carnotova cyklu závisí pouze na teplotách reservoárů C a H. Ve skutečných strojích ovšem neprobíhají rovnovážné děje a jejich účinnost tak dosahuje nejvýše 30% až 40%.

5.4 Ideální plyn

Většinu plynů lze za dostatečně vysoké teploty a nízkého tlaku popsat jako ideální plyn, tedy soubor bodových, neinteragujících a náhodně se pohybujících částic. Ideální plyn je charakterizován rovnicemi

$$PV = nRT \quad \text{a} \quad U = cNRT \quad (5.6)$$

Jeho vnitřní energie tedy nezávisí na objemu. Pro jednoatomový plyn pokládáme $c = \frac{3}{2}$ a pro dvouatomový $c = \frac{5}{2}$. Molární tepelné kapacity při konstantním tlaku, respektive objemu splňují

$$c_p - c_v = R \quad (5.7)$$

Tepelná kapacita

Množství tepla potřebné k požadované změně teploty $(\frac{\partial Q}{\partial T})$, měřené buď za konstantního tlaku jako c_p nebo za konstantního objemu jako c_v . V tepelné kapacitě při konstantním tlaku je zahrnuta i práce potřebná ke zdvihání pístu, proto platí $c_p > c_v$. Mnohé pevné látky podléhají Dulong-Petitovu pravidlu, podle něž je molární tepelná kapacita rovna $3R$.

5.5 Termodynamické potenciály

Ačkoliv mezi termodynamické potenciály patří i vnitřní energie systému (tzv. adiabatický potenciál), pro popis některých experimentů se lépe hodí užívat jiné veličiny. Tyto pak zjednodušují termodynamické úvahy, mají snadno kontrolovatelné extrémální vlastnosti a přímou souvislost s mikroskopickými jevy. Každý termodynamický potenciál se spontánně minimalisuje, jsou-li drženy konstantní jeho přirozené proměnné a počet částic.

Vnitřní energie

U , energie potřebná k vytvoření termodynamického systému, shora ohraničující práci konanou při adiabatickém ději. Jejími přirozenými proměnnými jsou S, V .

Helmholtzova volná energie

$F = U - TS$, energie potřebná k vytvoření systému, který bude ve stálém kontaktu s tepelným reservoárem, dodávajícím mu teplo TS . Shora ohraničuje práci konanou při isotermickém ději. Jejími přirozenými proměnnými jsou T, V .

Enthalpie

$H = U + PV$, energie potřebná k vytvoření systému a místa pro tento systém v prostředí o stálém tlaku P . Jejími přirozenými proměnnými jsou S, P .

Gibbsova volná energie

$G = U - TS + PV$, kombinace dvou výše uvedených. Vytváříme systém ve stálém kontaktu s tepelným reservoárem a vymezujeme mu místo v prostředí o konstantním tlaku. Přirozenými proměnnými jsou tedy T, P .

5.6 Fázový prostor a základní rozdělení

Soubor N částic, z nichž každá je popsána třemi složkami vektorů polohy a hybnosti, lze zpodobnit bodem v $6N$ -rozměrném fázovém prostoru. Jelikož však hovoříme o částicích mikroskopických, vstupuje do hry princip neurčitosti, rozmazává všechny body do oblasti o objemu h^k , kde k značí polovinu dimenze prostoru (pro částici na úsečce je $k=1$). Soubor částic může ve fázovém prostoru zaujímat všechny stavy povolené jeho fyzikálními vlastnostmi. Těmto stavům přiřazujeme pravděpodobnosti, nejpravděpodobnější stav pak odpovídá systému v rovnováze. V dalším výkladu má slovo "soubor" (ensemble) význam množiny všech povolených mikrostavů.

Boltzmannovo rozdělení

Udává pravděpodobnost p_i , že se soubor rozlišitelných identických kvantových částic nachází ve stavu o energii ε_i .

$$p_i = \frac{N_i}{N} = \frac{g_i e^{-\frac{\varepsilon_i}{k_B T}}}{Z(T)} \quad \text{kde} \quad Z(T) = \sum_i g_i e^{-\frac{\varepsilon_i}{k_B T}} \quad (5.8)$$

Zde g_i značí degeneraci stavu, N_i je počet částic na požadované energetické hladině a $Z(T)$ nazýváme stavovou sumou.

Maxwell-Boltzmannovo rozdělení

Rozdělení rychlostí v atomů nebo molekul plynu, jejichž jedinou přijatelnou interakcí jsou pružné srážky. Vycházení z rozdělení Boltzmannova, odvození viz [3], [3].

$$n(v)dv = \frac{\sqrt{2\pi Nm^{\frac{3}{2}}}}{(\pi kT)^{\frac{3}{2}}} v^2 e^{-\frac{mv^2}{2kT}} dv \quad (5.9)$$

Bose-Einsteinovo rozdělení

Rozdělení nerozlišitelných kvantových částic. Počet částic N_i nacházející se ve stavu o energii ε_i a degeneraci g_i je

$$N_i = \frac{g_i}{e^{(\varepsilon_i - \mu)/kT} - 1} \quad (5.10)$$

kde μ značí chemický potenciál.

Mikrokanonický soubor

Množina mikrostavů uzavřeného termodynamického systému, tedy systému s pevně zadaným objemem V , energií E i počtem částic N . Všechny odpovídající mikrostavy jsou dosahovány s toutéž pravděpodobností, je mezi nimi náhodně přeskakováno. Entropii spočteme přímo z Boltzmannovy definice (5.5).

Kanonický soubor

Popis termodynamického systému v kontaktu s tepelným reservoárem (systém a reservoár dohromady tvoří mikrokanonický soubor). Pevně je zadán objem a počet částic a teplota T , pro celkovou energii můžeme určit pouze její střední hodnotu, závisující na teplotě. Obsazování energetických stavů se řídí Boltzmannovým rozdělením. K vyjádření entropie musíme nalézt Helmholtzův potenciál $F = -\frac{1}{\beta} \ln Z$.

Grandkanonický soubor

Popis termodynamického systému v kontaktu s tepelným i "částicovým" reservoárem. Pevně zadáváme objem, teplotu a chemický potenciál, pro energii a počet částic můžeme určit pouze střední hodnoty. Formalismus je obdobný kanonickému, s malou změnou stavové sumy Q a záměnou Helmholtzova potenciálu za grandkanonický.

$$\Omega = U - TS - \mu N \quad Q(\mu, V, T) = \sum_i e^{\frac{N_i \mu - \varepsilon_i}{k_B T}} \quad (5.11)$$

5.7 Liouvilleova rovnice

Všechny povolené mikrostavy systému částic lze znázornit jako množinu bodů ve fázovém prostoru. Počet bodů připadající na jednotkový objem fázového prostoru popisujeme rozdělovací funkcí $\rho(p, q, t)$. Liouvilleova věta říká, že "fázová kapalina" je nestlačitelná a rozdělovací funkce zůstává konstantní podél každé trajektorie (podél každého vývoje systému).

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_i^n \left(\frac{\partial \rho}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) = 0 \quad (5.12)$$

Pokud například systém v reálném světě stlačíme, pak se jeho znázornění ve fázovém prostoru zúží pro souřadnice q_i , avšak rozšíří pro p_i a fázový objem zůstane nezměněn. Podrobnější povídání s obrázky lze nalézt v [6].

Literatura

- [1] Callen, H. *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*, 1985
- [2] Arovas, D. *Lecture Notes on Thermodynamics and Statistical Mechanics*, 2012
- [3] Beiser, A. *Úvod do moderní fyziky*, 1975
- [4] Poznámky z přednášky prof. Chvosty
- [5] en.wikipedia.org
- [6] <http://www.av8n.com/physics/liouville-intro.htm>

6. Základy kinetické teorie

6.1 Maxwell-Boltzmannovo rozdělení, tlak, teplota, vnitřní energie

V následujícím se budeme snažit popsat soubor mnoha částic s obecně různými rychlostmi. Vlastnosti takového souboru můžeme snadno vystihnout pomocí počtu částic v jednotkovém objemu šestirozměrného fázového prostoru. Pro popis je vhodné zavést hustotu pravděpodobnosti (anglicky probability density function (PDF)) $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$, které se také někdy říká jednočásticová rozdělovací funkce. Počet částic v jednotkovém objemu fázového prostoru pak snadno spočítáme jako $\int f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v} d\mathbf{r}$.

Pokud známe hustotu pravděpodobnosti, můžeme snadno vypočítat číselnou hustotu jako integrál přes rychlosti

$$n(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \quad (6.1)$$

Hustotu můžeme poté vypočítat přenásobením číselné hustoty hmotností jedné částice.

Často je také užitečné vypočítat celkovou unášivou rychlost jako první moment rozdělovací funkce

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{v} \mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) / \int d\mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t). \quad (6.2)$$

Je dobré podotknout, že rychlosti částic jsou často řádově větší než unášivá rychlost souboru.

Další důležitou veličinou je střední kinetická energie jedné částice, která je dána vztahem

$$\left\langle \frac{1}{2} m(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \right\rangle = \int d\mathbf{v} \frac{1}{2} m(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) / \int d\mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t). \quad (6.3)$$

Vnitřní energie je obecně součet celkových energií všech částic v systému. Pro ideální plyn zanedbáváme vzájemné silové působení a jejich energie je tedy dána pouze jejich kinetickou energií. Volnou energii ideálního plynu proto můžeme spočítat přenásobením střední energie připadající na jednu částici celkovým počtem částic.

Se střední energií také souvisí hydrostatický tlak. Přestože tlak souboru částic může na první pohled působit zvláště, je snadné ho objasnit následující představou. V souboru částic dochází ke srážkám (stážet se mohou částice mezi sebou nebo se může jednat o srážky částic s okolím uvažovaného souboru). Při takovýchto srážkách nutně dochází ke změně hybnosti a tedy musí být dle druhého Newtonova pohybového zákona přítomna síla. Tuto sílu můžeme považovat za hydrostatickou tlakovou sílu. Obecně lze tlak popsat vztahem

$$p = n(2/N) \left\langle \frac{1}{2} m(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \right\rangle, \quad (6.4)$$

kde N je počet stupňů volnosti rychlosti.

Pro systémy v rovnováze platí Maxwell-Boltzmannovo rozdělení dané rozdělovací funkcí

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = n \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left[-\frac{\frac{1}{2}m(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{kT} \right], \quad (6.5)$$

kde k je Boltzmannova konstanta. Konstantu před exponenciálou dostaneme z podmínky, že integrál hustoty pravděpodobnosti přes celý prostor musí být roven jedné.

Vidíme, že ve vztahu (6.5) se vyskytuje teplota jako parametr. Fyzikální význam teplota dostává pouze v rovnováze, kdy platí ekvipartiční teorém

$$\left\langle \frac{1}{2}m(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \right\rangle = NkT/2, \quad (6.6)$$

kde N je počet prostorových stupňů volnosti.

Z (6.5) a (6.6) pak dostáváme stavovou rovnici ideálního plynu

$$p = nkT \quad (6.7)$$

Podotýkám, že v rámci konzistence s předchozím výkladem značí n číselnou hustotu a ne látkové množství, které se v této rovnici právě jako n běžně označuje.

Derivací rozdělovací funkce dostaneme nejpravděpodobnější rychlost

$$\sqrt{\frac{2kT}{m}}, \quad (6.8)$$

jako druhý moment rozdělení pak střední kvadratickou rychlost

$$\sqrt{\frac{3kT}{m}}. \quad (6.9)$$

6.2 Transportní jevy

Transportní jevy jsou nevratné procesy vycházející ze statistického chování souborů jehož důsledkem je snaha o vyrovnání gradientů různých fyzikálních veličin. Obecně můžeme transportní jevy popsat rovnicí

$$\mathbf{i} = \alpha \nabla A, \quad (6.10)$$

kde \mathbf{i} je tok veličiny jednotkovou plochou, α je konstanta charakterizující daný proces a A je příslušná veličina.

Mezi transportní jevy patří difuze (vyvolaná koncentračním gradientem), tepelná vodivost (teplotní gradient) a viskozita (přenos efektivní hybnosti způsobený gradientem rychlosti).

Pro difuzi platí

$$\mathbf{i} = -D \nabla n, \quad (6.11)$$

kde n je koncentrace a $D = (1/3)\bar{v}\bar{l}$. \bar{l} je střední volná dráha částice, kterou můžeme dostat ze vztahu $\bar{l} = 1/(4\pi r^2 \sqrt{2}n_0)$.

Pokud navíc uvážíme zákon zachování počtu částic $\partial n/\partial t + \nabla \cdot \mathbf{i} = 0$ dostaneme Fickův zákon difuze

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D\Delta n. \quad (6.12)$$

Vedení tepla můžeme popsat rovnicí

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\lambda}{\rho c_V} \nabla^2 T = 0, \quad (6.13)$$

kde $\lambda = (1/2)\bar{v}\bar{l}\rho c_V$ se nazývá součinitel teplotní vodivosti.

Jak již bylo uvedeno výše, můžeme viskozitu chápat jako přenos efektivní hybnosti. Analogicky s předchozími transportními jevy to můžeme popsat rovnicí

$$\mathbf{i} = \nu \nabla v, \quad (6.14)$$

kde $\nu = (1/2)\bar{v}\bar{l}\rho$ se nazývá dynamická viskozita.

6.3 Molekulární jevy v kapalinách

U kapalin se projevují všechny transportní jevy popsané výše. Kromě nich se u kapalin ještě projevují povrchové jevy a kapilární jevy.

Pro vysvětlení některých povrchových jevů bych použil analogii s pevnou látkou. Představme si situaci, kdy kapalinu rozdělíme na dvě části. Při rozdělení došlo k přerušení vazeb mezi molekulami kapaliny a bylo tedy potřeba vykonat práci. Nezměnil se počet molů látky a nezměnila se ani molární volná energie. Vykonaná práce dF odpovídá nárůstu povrchové volné energie. Volná energie roste úměrně změně plochy dle vztahu

$$dF = \sigma dA, \quad (6.15)$$

kde σ je konstanta úměrnosti nazývaná povrchové napětí.

Povrchovou volnou energii můžeme také vysvětlit jako rozdíl potenciálních energií na povrchu látky a v jejím objemu.

Díky principu maximalizace entropie a důsledně minimalizaci volné energie se kapaliny snaží zaujmout objem s minimálním povrchem.

Kapilární jevy jsou důsledkem mezimolekulárních sil. V důsledku různých sil mezi kapalinou, materiálem nádoby a látkou nad kapalinou dojde ke změně výšky hladiny u okraje nádoby. Říkáme, že kapalina smáčí nebo nesmáčí nádobu. V důsledku zakřivení vzniká těsně pod hladinou kohezní tlak daný vztahem $p = 2\sigma/R$. Dojde k elevaci kapaliny v kapiláře a tento tlak je poté vykompenzován hydrostatickým tlakem. Pro elevační výšku platí vztah

$$h = \frac{2\sigma \cos \Theta}{\rho g r}, \quad (6.16)$$

kde Θ je kontaktní úhel mezi kapalinou a nádobou, r je poloměr kapiláry. Pro smáčivou kapalinu dochází ke kapilární elevaci, pro nesmáčivou kapalinu dochází k depresi.

6.4 Avogadrova konstanta

Avogadrova konstanta $N_A = 6.023 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ je počet částic v jednom molu látky. Jeden mol je látkové množství soustavy, jejíž počet entit (elementárních jedinců) se rovná počtu atomů v 0,012 kg uhlíku 12 (^{12}C).

Jejím měřením se zabývá jedna úloha v prvním praktiku. Avogadrova konstanta se určuje z Einsteinova vztahu

$$\bar{x}^2 = \frac{RT}{3\pi\eta r N_A} t, \quad (6.17)$$

kde R je molární plynová konstanta, T je teplota a η je dynamická viskozita.

7. Elektrická intenzita:

Silové působení nábojů na další náboj Q můžeme vyjádřit vztahem:

$$\vec{F} = Q\vec{E}(r),$$

kde

$$\vec{E}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^N \frac{Q_i}{|\vec{r} - \vec{r}_i|^3} (\vec{r} - \vec{r}_i)$$

je intenzita elektrostatického pole, tedy síla na jednotkový kladný náboj. Vyjádřím-li sílu působící na náboj Q pomocí intenzity, získám tak význačné rysy, které platí i pro obecnější typy polí:

- 1) Síla působící na náboj v jakémkoliv místě prostoru je úměrná hodnotě tohoto náboje.
- 2) Lokálnost pole - K určení síly působící na bodový náboj stačí znát pouze vektor intenzity pole v daném bodě a neuplatňuje se zde vliv okolí.

Jednotkou intenzity je z definice $\left[\frac{N}{C}\right]$. V SI je odvozena od potenciálu tedy je to $\left[\frac{V}{m}\right]$.

Platí princip superpozice:

$$\vec{E}(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \vec{E}_i(\vec{r})$$

Průběh intenzity znázorňují siločáry (kladný, záporný náboj), které se díky jednoznačnosti definice elektrické intenzity nemohou protínat. Hustou siločar lze vyjádřit velikost intenzity.

Tok intenzity elektrostatického pole bodových nábojů:

Z analogické představy o toku kapaliny. Je tok kapaliny plochou S vyjádřen:

$$\Phi = \vec{v} \cdot \vec{S}, \quad \text{kde} \quad \vec{S} = S\vec{n}$$

Rychlost nahradíme intenzitou a dostáváme pro tok intenzity elektrostatického pole vztah:

$$\Phi = \int_S \vec{E} \cdot d\vec{S}$$

Lze ukázat, že ať mám libovolnou (velikost i tvar) uzavřenou plochu kolem bodového náboje, je tok touto plochou stále stejný, a proto mohu uvažovat kulovou plochu K_i kolem náboje Q_i , a pak platí:

$$\Phi_i = \int_{K_i} \vec{E}_i \cdot d\vec{S} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} Q_i \int_{4\pi} d\Omega = \frac{Q_i}{\epsilon_0}$$

S využitím principu super pozice, pak formulujeme **Gaussův zákon**:

Celkový tok Φ intenzity elektrického pole soustavy bodových nábojů libovolnou uzavřenou plochou S je roven $\frac{Q_c}{\epsilon_0}$, kde Q_c značí celkový náboj uzavřený v ploše:

$$\oint_S \vec{E} d\vec{S} = \frac{Q_c}{\epsilon_0} \quad \text{či} \quad \operatorname{div} \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}$$

Gaussův zákon je přímý důsledek Coulombova zákona a výsledky experimentů z Gaussova zákona lze použít k ověření platnosti Coulombova zákona. Gaussův zákon je také obecnější a lze z něj odvodit zákon Coulombův.

Potenciál elektrostatického pole bodových nábojů:

Potenciálem $\varphi(\vec{r})$ nazveme následující veličinu:

$$\varphi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^N \frac{Q_i}{|\vec{r} - \vec{r}_i|} + C,$$

kteřá splňuje následující vztah, který je vesměs definiční:

$$\vec{E}(\vec{r}) = -\operatorname{grad}\varphi(\vec{r}).$$

Jedná se o skalární veličinu, jejíž popis soustavy nábojů je ekvivalentní popisu pomocí elektrické intenzity (měl by být jednodušší). Potenciál není definován jednoznačně, může se lišit o konstantu. Jeho význam je patrný z vyjádření vykonané práce v elektrickém poli:

$$W_{\vec{r}, \vec{r}_0} = -\int_l \vec{F} d\vec{l} = -Q \int_l \vec{E} d\vec{l} = Q \int_l \operatorname{grad}\varphi d\vec{l} = Q \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} d\varphi = Q[\varphi(\vec{r}) - \varphi(\vec{r}_0)]$$

Potenciál elektrostatického pole v daném bodě představuje potenciální energii náboje Q v bodě \vec{r} vzhledem k bodu \vec{r}_0 . Jednotkou potenciálu je v SI [V].

Výsledná potenciální energie soustavy nábojů je:

$$W = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N Q_j \varphi_j.$$

V elektrostatickém poli nezávisí vykonaná práce na trajektorii (tedy po uzavřené křivce je nulová) což dává:

$$\oint_l \vec{E} \cdot d\vec{l} = \oint_S \operatorname{rot} \vec{E} \cdot d\vec{S} = 0 \quad \text{či} \quad \operatorname{rot} \vec{E} = -\operatorname{rot} \operatorname{grad} \varphi = 0$$

Elektrická indukce:

Uvažme látkové prostředí. Toto látkové prostředí tvořené molekulami či atomy představuje velmi složité rozložení bodových nábojů. Využijeme představu, že atomy a molekuly jsou elektricky neutrální soustavy nábojů, můžeme tedy toto pole na vzdálenost převyšující jejich velikost vyjádřit jako pole multiplových momentů různých řádů. V našem přiblížení vezmeme jen dipólový moment. Podle původu dipólového momentu lze látku rozdělit do dvou typů:

1) Polární dielektrika: Již molekuly mají vlastní náhodně orientované elektrické dipóly –

$$\text{molekula H}_2\text{O} \left(3 \cdot 10^{-30} \frac{\text{C}}{\text{m}} \right), \text{HCl}, \dots$$

2) Nepochární dielektrika: Nemají vlastní dipólový moment.

Vložení těchto látek do elektrického pole dojde k jejich polarizaci, a to následujícím způsobem.

U polárních dielektrik dojde k natočení elektrických dipólů do směru vektoru elektrické intenzity (orientační polarizace). Jsou-li pole velmi silná, může dojít k přeskupení elektrického rozložení náboje v molekule či atomu a vznikne tak moment indukovaný, který je ale slabší $\approx 10^{-35} \frac{\text{C}}{\text{m}}$. A u polárních dielektrik ho zanedbáváme.

U nepolárních dielektrik v úvahu připadají pouze momenty indukované.

Pro charakterizaci dipólů rozložených v objemu V zavádíme vektor polarizace $\vec{P}(\vec{r})$:

$$\vec{p}_V = \int_V \vec{P}(\vec{r}) dV,$$

kde \vec{p}_V je výsledný dipólový moment. $\vec{P}(\vec{r})$ je objemová hustota dipólového momentu. Při hledání výsledného potenciálu takto objemově rozložených dipólů se dojde k závěru, že výsledné elektrostatické pole lze formálně zapsat jako superpozici elektrostatického pole nábojů objemově rozložených v tomto objemu s hustotou ρ_p a elektrického pole nábojů plošně rozložených na povrchu uvažovaného objemu V s hustotou σ_p , tyto hustoty lze vyjádřit pomocí vektoru polarizace:

$$\sigma_p(\vec{r}) = \vec{P}(\vec{r}) \cdot \vec{n} \quad \rho_p(\vec{r}) = -\text{div} \vec{P}(\vec{r}),$$

kde \vec{n} je normála k povrchu uvažovaného objemu. $\rho_p(\vec{r})$ je různé od nuly pouze v případě nehomogenní polarizace.

Tyto výsledky použijeme na dielektrikum. Náboje vzniklé polarizací označíme za vázané a přidáme do dielektrika náboje volné ρ , výsledná objemová hustota ρ_C je poté rovna:

$$\rho_C = \rho + \rho_p.$$

Výsledná intenzita pole je pak dána superpozicí příslušných polí.

I v přítomnosti vázaných nábojů zůstává pole potenciální, tedy:

$$\oint_l \vec{E} \cdot d\vec{l} = \oint_S \text{rot} \vec{E} \cdot d\vec{S} = 0 \quad \text{či} \quad \text{rot} \vec{E} = -\text{rot} \text{grad} \varphi = 0$$

Dále platí Gaussův zákon:

$$\oint_S \vec{E} \cdot d\vec{S} = \frac{Q + Q_p}{\epsilon_0} = \frac{Q_C}{\epsilon_0}$$

Náboj Q_p vyjádříme:

$$Q_p = \int_V \rho_p dV = - \int_V \operatorname{div} \vec{P} dV = - \oint_S \vec{P} \cdot d\vec{S}$$

po dosazení do Gaussova zákona a úpravě dostáváme:

$$\oint_S (\varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P}) \cdot d\vec{S} = Q$$

Zavedeme vektor **elektrické indukce**:

$$\vec{D}(\vec{r}) = \varepsilon_0 \vec{E}(\vec{r}) + \vec{P}(\vec{r})$$

Gaussův zákon pak lze přepsat do tvaru, kde vystupují jen volné náboje:

$$\oint_S (\vec{D}) \cdot d\vec{S} = Q \quad \text{či} \quad \operatorname{div} \vec{D} = \rho$$

V případě plošných nábojů využiji výsledků z řešení problému nabitě plochy v elektrostatickém poli, kde plošná divergence $\operatorname{Div} \vec{E}$ je dána vztahem:

$$\operatorname{Div} \vec{E} = E_{1n} - E_{2n} = \frac{\sigma}{\varepsilon_0}$$

$$\operatorname{Rot} \vec{E} = 0$$

Budu uvažovat opět volné plošné náboje σ a vázané σ_p na rozhraní dvou dielektrik o polarizaci \vec{P}_1 a \vec{P}_2 . Celkový plošný náboj je dán součtem $\sigma_p = \sigma_p^1 + \sigma_p^2$. Dosadím do vyjádření plošné divergence:

$$(\vec{E}_1 - \vec{E}_2) \cdot \vec{n}_1 = \frac{\sigma + \sigma_p}{\varepsilon_0}$$

vyžiji

$$\sigma_p^1 = -\vec{P}_1 \cdot \vec{n}_1 \quad \sigma_p^2 = \vec{P}_2 \cdot \vec{n}_1$$

a dostávám

$$(\varepsilon_0 \vec{E}_1 + \vec{P}_1) \cdot \vec{n}_1 - (\varepsilon_0 \vec{E}_2 + \vec{P}_2) \cdot \vec{n}_1 = \sigma$$

tedy

$$\operatorname{Div} \vec{D} = (\vec{D}_1 - \vec{D}_2) \cdot \vec{n}_1 = \sigma$$

$$\operatorname{Rot} \vec{E} = 0$$

Při průchodu plochou, kde jsou jen vázané náboje, je normálová složka elektrické indukce spojitá. Nespojitost je dána pouze přítomností volných plošných nábojů.

Materiálové vztahy:

V dielektriku je elektrostatické pole popsáno dvěma veličinami $\vec{E}(\vec{r})$ a $\vec{D}(\vec{r})$. Nalezení řešení $\vec{E}(\vec{r})$ a $\vec{D}(\vec{r})$ je však z Maxwellových rovnic zatím zadáno nedostatečně. Musíme zavést materiálový vztah mezi $\vec{E}(\vec{r})$ a $\vec{D}(\vec{r})$, respektive mezi $\vec{E}(\vec{r})$ a $\vec{P}(\vec{r})$. Podle toho dělíme dielektrika:

- 1) Ideálně tvrdá – předpoklad permanentní polarizace $\vec{P}_0(\vec{r})$ v daném bodě, která již na hodnotě intenzity pole nezávisí.
- 2) Ideálně měkká dielektrika – předpoklad lineární závislosti vektoru polarizace \vec{P} v daném bodě na výsledné intenzitě pole \vec{E} v tomto bodě. Pro izotropní a homogenní prostředí je možné tuto závislost zapsat ve tvaru:

$$\vec{P}(\vec{r}) = \epsilon_0 \chi_e \vec{E}(\vec{r})$$

χ_e je elektrická susceptibilita, bezrozměrná veličina, kladná, různá pro různé materiály. Dosazením do předchozích definičních vztahů dostávám:

$$\vec{D}(\vec{r}) = \epsilon_0 (1 + \chi_e) \vec{E}(\vec{r}),$$

kde

$$(1 + \chi_e) = \epsilon_r$$

nazvu relativní permitivitou. U nehomogenních dielektrik je permitivita tenzor.

Magnetická indukce:

Magnetické pole může být v prostoru vytvořeno permanentním magnetem nebo náboji pohybujícími se v makroskopickém měřítku. Magnetické pole se projevuje na vodiče protékané proudem, na pohybující se tělesa nesoucí náboj atd. Popisujeme ho pomocí vektorového pole, které vytváří zmagnetovaná tělesa kolem sebe. Charakteristickou veličinou je magnetická indukce $\vec{B}(r)$. Celková síla, která působí na pohybující se částici rychlosti \vec{v} je dána Lorenzovým vzorcem:

$$\vec{F} = q[\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}]$$

Za definiční vztah magnetické indukce lze považovat:

$$\vec{F} = q[\vec{v} \times \vec{B}]$$

Jednotka magnetické indukce v SI je $[T] = \left[\frac{N}{A \cdot m} \right]$.

Zavádí se také magnetický tok Φ pro libovolnou orientovanou plochu S :

$$\Phi = \int_S \vec{B} \cdot d\vec{S}.$$

Jednotkou magnetického toku je $[Wb] = \left[\frac{J \cdot s}{C} \right] = [V \cdot s]$.

Je-li magnetické pole původem od vodičů protékaných proudem (v případě ideálního nekonečného vodiče), pak vektor magnetické indukce má směr tečny ke koncentrickým kružnicím. A velikost je dána vztahem:

$$B = C \frac{I}{a},$$

kde I je proud, a je vzdálenost od vodiče a C je konstanta úměrnosti. Poté sílu působící mezi dvěma rovnoběžnými úseky vodiče délky l vyjádříme:

$$F = 2 \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{II' l}{a},$$

kde $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \frac{H}{m}$. Přičemž $[H] = \left[\frac{N \cdot m}{A \cdot m} \right] = \left[\frac{V \cdot s}{A} \right]$.

Lze ukázat, že cirkulace vektoru magnetické indukce po uzavřené libovolné křivce l neobsahující vodič protékaný proudem je nulová:

$$\oint_l \vec{B} \cdot d\vec{l} = 0$$

Naopak pro tutéž křivku, která obepínající vodič protékaný proudem, platí:

$$\oint_l \vec{B} \cdot d\vec{l} = B \oint_k dl = 2\pi r B = 2\pi r \frac{\mu_0 I}{2\pi r} = \mu_0 I,$$

což je Ampérův zákon:

$$\oint_l \vec{B} \cdot d\vec{l} = \mu_0 I$$

Ampérův zákon platí pro libovolný tvar vodičů a pro libovolnou uzavřenou křivku. Pokud křivka oběhne vodič N -krát, pak je pravá strana N -krát větší. Ampérův zákon říká, že magnetické pole nemůže být potenciální oproti elektrickému. Je to analogie ke Gaussovu zákonu v elektrostatice.

Proud v I lze vyjádřit pomocí objemové hustoty j :

$$I = \int_s \vec{j} \cdot d\vec{S}$$

Po dosazení do Ampérova zákona a použitím Stokesovy věty:

$$\int_s [\text{rot} \vec{B} - \mu_0 \cdot \vec{j}] \cdot d\vec{S} = 0$$

dostávám ampérův zákon v diferenciálním tvaru:

$$\text{rot} \vec{B} = \mu_0 \vec{j}$$

Vektorový potenciál, Biotův – Savartův vzorec:

Analogicky s vektorovým polem uvažujeme magnetický tok Φ , který je pro danou uzavřenou plochu S roven nule.

$$\oint_S \vec{B} \cdot d\vec{S} = 0 \quad \text{či} \quad \text{div} \vec{B} = 0$$

Tento vztah vylučuje existenci magnetických nábojů a magnetické siločáry jsou uzavřené křivky. Pole je tedy solenoidální. Magnetické pole lze vyjádřit pomocí nového vektorového pole vyhovující vztahu:

$$\vec{B}(\vec{r}) = \text{rot} \vec{A}(\vec{r}),$$

kde $\vec{A}(\vec{r})$ je vektorový potenciál. Vektorový potenciál není určen jednoznačně, může se lišit o příslušný gradient libovolné funkce:

$$\vec{A}'(\vec{r}) = \vec{A}(\vec{r}) + \text{grad} \xi(\vec{r})$$

Tato nejednoznačnost dává možnost další podmínce, kterou můžeme požadovat. Tu nazýváme kalibrační:

$$\text{div} \vec{A}(\vec{r}) = 0.$$

Vyjádřím-li Ampérův zákon pomocí vektorového potenciálu a využiji identity:

$\text{rot rot} = \text{grad div} - \Delta$

dostanu Poissonovu rovnici:

$$\Delta \vec{A}(\vec{r}) = -\mu_0 \vec{j}(\vec{r}).$$

Její řešení vypadá:

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_V \frac{\vec{j}(\vec{r}')}{R} dV' \quad \vec{R} = \vec{r} - \vec{r}'.$$

Provedením rotace dostáváme:

$$\vec{B}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_V \frac{\vec{j}(\vec{r}') \times \vec{R}}{R^3} dV',$$

což je Biot-Savartův vzorec.

Magnetické pole lze chápat jako superpozici jednotlivých proudových elementů.

Magnetická intenzita:

Každému atomu, či molekule lze přiřadit hodnotu magnetického momentu. Tedy magnetické pole vytvořené zmagnetovanými látkami, lze považovat za magnetické pole soustavy prostorově rozložených magnetických dipólů.

Pro charakterizaci magnetických dipólů rozložených v objemu V zavádíme vektor $\vec{M}(\vec{r})$:

$$\vec{m}_V = \int_V \vec{M}(\vec{r}) dV,$$

kde \vec{m}_V je výsledný magnetický dipólový moment. Magnetizace $\vec{M}(\vec{r})$ je objemová hustota dipólového magnetického momentu. Díky formální shodnosti výsledného magnetického pole od magnetického dipólu a elektrického pole od elektrického dipólu je vektor $\vec{M}(\vec{r})$ magnetickou analogií vektoru $\vec{P}(\vec{r})$. Stejně jako u elektrického pole dipólu máme místo nábojů objemové $\vec{j}(\vec{r})$ a plošné $\vec{j}_S(\vec{r})$ hustoty magnetických proudů. Tyto hustoty lze vyjádřit pomocí vektoru magnetizace:

$$\vec{j}_{mS}(\vec{r}) = \vec{M}(\vec{r}) \times \vec{n} \quad \vec{j}_m(\vec{r}) = \text{rot} \vec{M}(\vec{r}),$$

kde \vec{n} je normála k povrchu uvažovaného objemu.

Magnetizační proud protékající libovolnou plochou je dán vztahem:

$$I_m = \int_S \vec{j}(\vec{r}) \cdot d\vec{S}$$

Po dosazení za objemovou hustotu magnetizačního proudu a použití Stokesovy věty dostávám:

$$I_m = \int_S \text{rot} \vec{M} \cdot d\vec{S} = \oint_l \vec{M} \cdot d\vec{l}$$

K určení výsledného magnetického pole budu uvažovat volné a vázané proudy reprezentující magnetizaci příslušných látek, jako v případě elektrického pole volné a vázané náboje. Výsledný magnetizační proud bude dán součtem volného proudu I a vázaného proudu I_m .

I v látkovém prostředí zůstane zachována uzavřenost indukčních čar. Tok vektoru magnetické indukce libovolnou uzavřenou plochou S bude vždy nulový, nezávisle na tom, leží-li tato plocha ve vakuu či v látkovém prostředí:

$$\oint_S \vec{B} \cdot d\vec{S} = 0 \quad \text{tedy} \quad \text{div} \vec{B} = 0$$

Pro libovolnou uzavřenou křivku platí Ampérův zákon:

$$\oint_l \vec{B} \cdot d\vec{l} = \mu_0 (I + I_m)$$

dosazením za vázaný proud:

$$\oint_l (\vec{B} - \mu_0 \vec{M}) \cdot d\vec{l} = \mu_0 I$$

Zavedeme vektor magnetické intenzity:

$$\vec{H}(\vec{r}) = \frac{\vec{B}(\vec{r})}{\mu_0} - \vec{M}(\vec{r})$$

Poté Ampérův zákon vypadá:

$$\oint_l \vec{H} \cdot d\vec{l} = I \quad \text{či} \quad \text{rot } \vec{H} = \vec{j}$$

V případě plošných vázaných proudů využijí výsledků z řešení problému pole plošných proudů, kde plošná divergence a rotace jsou dána vztahem:

$$\begin{aligned} \text{Div } \vec{B} &= (\vec{B}_1 - \vec{B}_2) \cdot \vec{n} = 0 \\ \text{Rot } \vec{B} &= \vec{n} \times (\vec{B}_1 - \vec{B}_2) = \mu_0 \vec{j}_s \end{aligned}$$

V látkovém prostředí:

$$\begin{aligned} \text{Rot } \vec{B} &= \vec{n} \times (\vec{B}_1 - \vec{B}_2) = \mu_0 (\vec{j}_s + \vec{j}_{ms}) \\ \text{Div } \vec{B} &= (\vec{B}_1 - \vec{B}_2) \cdot \vec{n} = 0 \\ \text{Rot } \vec{H} &= \vec{n} \times (\vec{H}_1 - \vec{H}_2) = \vec{j}_s \end{aligned}$$

Lze také zavést veličinu magnetické polarizace $\vec{P}_m(\vec{r})$:

$$\vec{P}_m(\vec{r}) = \mu_0 \vec{M}(\vec{r})$$

Jednotky magnetické polarizace a magnetizace jsou následující:

$$\vec{P}_m(\vec{r}) = [T] \quad \vec{M}(\vec{r}) = \left[\frac{A}{m} \right]$$

Použitím vektoru intenzity k popisu magnetického pole zmagetovaných látek umožňuje vyloučit z explicitních úvah vázané proudy. Pro bezprostřední vyjádření fyzikálních účinků magnetického pole (sil na pohybující se náboje) zůstává v látkovém prostředí určující veličinou vektor magnetické indukce.

Materiálové vztahy:

Pro popis magnetických vlastností látek je nejdůležitější stanovit souvislost mezi magnetizací a magnetickým polem uvnitř látek. Vzhledem k tomu, že magnetické vlastnosti látek se zkoumají ve vnějším poli vybuzeném proudem ve vodičích vhodného tvaru, je výhodné určovat souvislost mezi magnetizací a intenzitou pole uvnitř látky. Intenzita má bezprostřední vztah k volným proudům, jimiž je pole zadáno, než vektor magnetické indukce.

Magnetické látky dělíme:

- 1) **Slabě magnetické látky** – lineární závislost mezi intenzitou pole a magnetizací
- 2) **Silně magnetické látky** – magnetizace dosahuje větších hodnot a závislost magnetizace na intenzitě pole je složitá.

1) Slabě magnetické látky:

$$\vec{M}(\vec{r}) = \chi_m \vec{H}(\vec{r})$$

konstanta úměrnosti se nazývá magnetická susceptibilita látky. Dosazením do definičního vztahu magnetické intenzity a úpravou dostáváme:

$$\vec{B}(\vec{r}) = \mu_0 \vec{H}(\vec{r}) + \vec{P}_m(\vec{r}) = \mu_0 (1 + \chi_m) \vec{H}(\vec{r})$$

Veličina μ_r se nazývá relativní permeabilita:

$$\mu_r = 1 + \chi_m$$

Magnetická susceptibilita je v anizotropních látkách tenzor.

Magnetická susceptibilita může být: záporná – látky diamagnetické
kladná – látky paramagnetické

U většiny paramagnetických látek dochází ke změnám susceptibility s teplotou, platí tzv. Curierův zákon:

$$\chi_m = \frac{C}{T},$$

kde T je teplota a C je Curierova konstanta, charakteristická pro danou látku.

2) Silně magnetické látky:

Reprezentantem jsou látky feromagnetické – při cyklickém magnetování je závislost magnetizace hysterézní smyčka.

Typickými feromagnety za pokojové teploty jsou látky: Fe, Co, Ni, Gd.

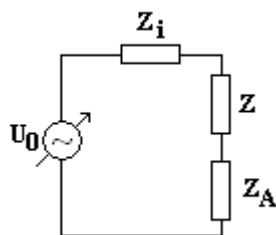
Feromagnetika dělíme na měkká a tvrdá....

Spontání magnetizace feromagnetika závisí na teplotě. S rostoucí teplotou klesá a od určité teploty (Curierovy teploty) je již paramagnetikem.

Metody měření elektrických a magnetických veličin:

Měření proudu:

Ampérmetr zapojíme sériově do obvodu. Budu předpokládat, že zdroj napětí U_0 má vnitřní impedanci Z_i a ampérmetr má vnitřní impedanci Z_A . Chci měřit proud protékající impedancí Z . Schéma zapojení je následující:



Bez ampérmetru teče obvodem proud I :

$$I = \frac{U_0}{Z_i + Z}$$

S ampérmetrem teče obvodem proud I' :

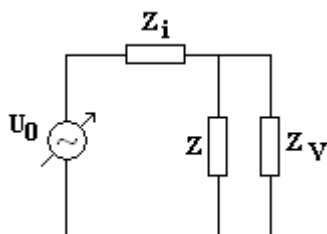
$$I' = \frac{U_0}{Z_i + Z + Z_A}$$

Srovnáním a úpravou dostávám: přičemž chyba bude zanedbatelná, bude-li splněna podmínka:

$$\frac{I - I'}{I} = \frac{Z_A}{Z_i + Z} \quad Z_A \ll |Z_i + Z|$$

Měření napětí:

Analogicky provedu tuto úvahu pro voltmetr, ten zapojujeme paralelně. Budu předpokládat, že zdroj napětí U_0 má vnitřní impedanci Z_i a voltmetr má vnitřní impedanci Z_V . Chci měřit napětí na impedanci Z . Schéma zapojení je následující:



Bez voltmetru je správné napětí U rovno:

$$U = U_0 \frac{Z}{Z_i + Z}$$

S voltmetrem je napětí rovno U' :

$$U' = U_0 \frac{ZZ_V}{Z_i Z_V + Z_i Z + ZZ_V}$$

Úpravou posledního vztahu dostanu: přičemž chyba bude zanedbatelná, bude-li splněna podmínka:

$$\frac{U - U'}{U'} = \frac{1}{Z_V} \frac{ZZ_i}{Z + Z_i} \quad Z_V \ll \left| \frac{ZZ_i}{Z + Z_i} \right|$$

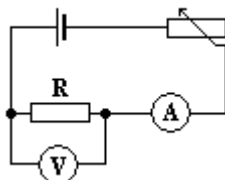
Rozsah voltmetru se dá zvětšit předřadným odporem, jenž je zapojen do série s voltmetrem.

Uvedená úvaha při měření napětí a proudu je platná i pro obvody s střídavým napětím.

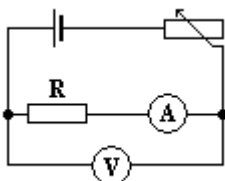
Měření odporu:

Zde rozlišujeme několik metod:

- 1) *Metoda přímá* – měřím napětí a proud u daného odporu a využiji Ohmův zákon.
 - a) Pro měření malých odporů máme zapojení:

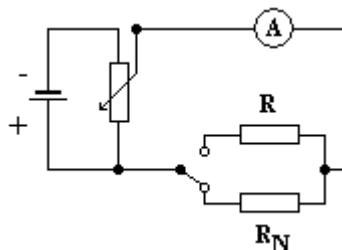


- b) Pro měření velkých odporů máme zapojení:

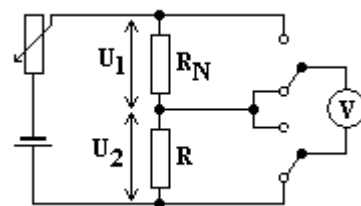


Tato metoda je vhodná pro měření odporů v rozsahu: $10^{-3} - 10^8 \Omega$

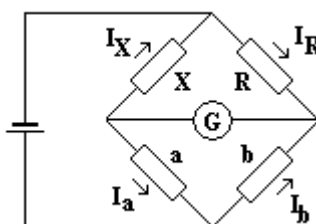
- 2) *Metoda substituční* – v následujícím zapojení měníme odpor R_N tak, aby se proud procházející galvanometrem nezměnil. Žádoucí jsou malé proudy, aby se měřený odpor nezhříval.



- 3) *Metoda srovnávací* – je založena na porovnání napětí na odporu známé velikosti a na měřeném odporu



- 4) *Metoda můstková* - Zapojení můstku je následující:



Neprotéká-li indikátorem proudu žádný proud, je můstek v rovnováze a platí:

$$X = R \frac{a}{b}$$

V případě měření střídavého proudu stojí za připomenutí, že měřím následující efektivní hodnoty, kde U_{max} a I_{max} jsou příslušné amplitudy harmonického průběhu:

$$U_{ef} = \frac{U_{max}}{\sqrt{2}} \qquad I_{ef} = \frac{I_{max}}{\sqrt{2}}$$

Magnetická měření:

Spočívají ve vyšetřování magnetického pole (určení magnetické intenzity pole ve vzduchu například mezi cívkami) a zjišťování magnetických vlastností látek (měření magnetizačních křivek a stanovení velič s nimi souvisejících, Curierova teplota,...).

Měření dělíme:

- 1) *Magnetometrické metody* – zjišťuje se magnetická polarizace měřeného tělesa z hodnoty intenzity magnetického pole H , které vyvolává zmagnetované těleso ve svém okolí.
- 2) *Využití jevu elektromagnetické indukce* – měřím indukované napětí, které se indukuje v závitěch vinutých kolem měřeného tělesa vlivem změny magnetického indukčního toku v tomto tělese. Používá se balistického galvanometru, a proto se metody označují také jako *balistické*.
- 3) *Měření otáčivého silového momentu tělesa působený homogenním magnetickým tokem* – používá se k určení magnetického momentu permanentních magnetů.
- 4) Měření translační síly, které těleso podléhá v nehomogenním magnetickém poli – využívá se k určení susceptibility diamagnetických látek a paramagnetických látek.

Magnetická měření na rozdíl od jiných měření jsou velmi ovlivněna tím, jaký tvar má měřený vzorek.

Vložením feromagnetických látek do magnetického pole se uvnitř vytvoří demagnetizační pole, toto pole se snažíme zmenšit vhodným tvarem vzorku, který volíme podle toho, jaký je směr magnetizace.

Další chybou vnáší fakt, že není-li vzorek elipsoidálního tvaru není úplně homogenně zmagnetován.

Chyba může vzniknout nesprávnou orientací vzorku při měření vůči zemskému magnetickému poli, či celkovému magnetickému poli v místě měření vzorku.

Další chybou může být předchozí magnetizace vzorku atd...

Státnice - otázka 8.

Tereza Jeřábková

28. dubna 2013

V tomto textu budeme postupovat fenomenologicky, tedy budeme postupně shromažďovat empiricky zjištěné informace a na jejich základě dospějeme k Maxwellovým rovnicím. Je samozřejmě možné postulovat Maxwellovy rovnice a pak ukázat konzistenci s experimentem.

1 Stacionární, kvazistacionární a nestacionární pole

1.1 Stacionární pole

1.1.1 Stacionární elektrické pole

Stacionární pole je charakterizováno nezávislostí makroskopických veličin na čase. A to tak, že pokud v kterýkoli čas, určíme náboj Q , proud I či intenzitu E dostaneme vždy stejnou hodnotu. Proud a náboj jsou svázány definiční rovnicí buď v diferenciální či integrální formě

$$I = \frac{dQ}{dt},$$
$$Q = \int_0^t I(t') dt',$$

které v případě stacionárního proudu přecházejí v $Q = It$. Pokud uvážíme zachování náboje¹ platí rovnice kontinuity

$$\nabla \cdot \mathbf{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0, \quad (1)$$

která pro stacionární pole má tvar

$$\nabla \cdot \mathbf{j} = 0. \quad (2)$$

¹Je zajímavé, že nemáme k dispozici jednoduše interpretovatelnou symetrii, která by implikovala zachování náboje.

Pro intenzitu elektrického pole platí jednoduchý vztah

$$\nabla \times \mathbf{E} = 0 \Leftrightarrow \oint_{\Gamma} \mathbf{E} \cdot d\mathbf{l} = \int_S (\nabla \times \mathbf{E})_n dS = 0$$

čímž vyjadřujeme konzervativitu pole, jak lépe demonstruje ekvivalentní integrální výraz, kde Γ je libovolná uzavřená křivka a S je plocha uvnitř ní. Stejně tak naznačuje přechod mezi diferenciální a integrální podobou rovnic, zde pomocí Stokesovy věty a libovolnosti křivky Γ . Proč tomu tak je, budeme věnovat pozornost v poslední sekci - kdyby totiž pole nebylo konzervativní, dochází k disipaci energie.

Pro elektrostatické pole platí Gaussův zákon, který plyne ze superpozice polí nábojů. Pro jeden bodový náboj snadno spočteme tok kulovou plochou jej obklopující a pak je jen otázkou matematiky ukázat, že

$$\oint_S \mathbf{E} \cdot d\mathbf{S} = \int_V \nabla \cdot \mathbf{E} dV = \frac{q}{\varepsilon_0} = \int_V \frac{\rho}{\varepsilon_0} dV \Leftrightarrow \nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0},$$

kde jsme užili Gaussovy věty a libovolnosti plochy S . Jeden z hlavních rozdílů mezi elektrostatickým a stacionárním elektrickým polem je v okrajových podmínkách. Rovnice jsou tytéž, ale ve stacionárním případě může být uvnitř vodičů trvale nenulové elektrické pole - jedná se konstantní elektrický proud. Při této příležitosti zmíníme Ohmův zákon

$$U = \varphi_1 - \varphi_2 = \int_{(1)}^{(2)} \mathbf{E} \cdot d\mathbf{l},$$

$$\Delta U = \mathbf{E} \cdot \Delta \mathbf{l} \Rightarrow \mathbf{j} = \gamma \mathbf{E}.$$

1.1.2 Stacionární magnetické pole

Budeme vycházet z pozorované skutečnosti - kde je proud je i magnetické pole, které popisujeme jako vektorovou funkci \mathbf{B} . Kvantitativně můžeme účinky magnetického pole na nabitou částici o náboji q popsat Lorenzovou silou

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}),$$

kde v je její rychlost v dané inerciální soustavě. Takto můžeme v každém bodě zavést vektory \mathbf{E} a \mathbf{B} . Tok magnetické indukce zavedeme vztahem

$$\Phi = \int_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S}. \quad (3)$$

Zkoumejme nyní magnetické pole dlouhého (nejlépe nekonečného) vodiče protékaného konstantním (zkoumáme stacionární magnetické pole) proudem I . Experimentálně se zjistilo, že magnetická indukce \mathbf{B} má směr tečny ke koncentrickým kružnicím, které jsou kolmé na vodič a mají střed v jeho ose. Velikost pole přímo úměrná proudu a nepřímo vzdálenosti. Z tohoto plyne Ampérův zákon

$$\oint_{\Gamma} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{l} = \mu_0 I = \int_S \mathbf{j} \cdot d\mathbf{S} \Leftrightarrow \nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{j}.$$

Experimentálně se ukázalo, že tento vztah platí obecně pro libovolné \mathbf{B} , libovolnou jednoduchou křivku Γ a též libovolný vodič. Pomocí Stokesovy věty a objemové hustoty proudu jsme naznačili převedení na diferenciální tvar.

Zatím nikdo neobjevil magnetický monopol, magnetické pole je pole vírové, jeho siločáry jsou uzavřené křivky. Z toho plyne

$$\oint_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = 0 \Leftrightarrow \nabla \cdot \mathbf{B} = 0. \quad (4)$$

Což je první kompletní Maxwellova rovnice, ta už se nijak měnit nebude. Tuto rovnici identicky splníme zavedení vektorového potenciálu \mathbf{A}

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}). \quad (5)$$

Magnetická indukce \mathbf{B} se nezmění při přičtení $\nabla \xi(\mathbf{r})$ a proto můžeme vždy splnit podmínku $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$. Pokud toho využijeme dostaneme

$$\Delta \mathbf{A} = -\mu_0 \mathbf{j},$$

jejíž řešením dostaneme

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_V \frac{\mathbf{j}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dV'.$$

Vyjádření magnetické indukce, tedy Biot-Savartův zákon dostaneme uplatněním definice \mathbf{A} (5)

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_V \frac{\mathbf{j}(\mathbf{r}') \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} dV'.$$

1.2 Kvazistacionární pole

Uvažujeme již časovou závislost polních veličin, avšak za předpokladu, že platí "stacionární" tvar rovnice kontinuity (2).

V kvazistacionární aproximaci již pozorujeme propojení mezi elektrickým a magnetickým polem - elektromagnetickou indukcí. Obecně lze tento jen popsat vztahem

$$U(t) = -\frac{d\Psi}{dt}, \quad (6)$$

kde Ψ značí tok magnetického pole. Pokud uvažíme speciální případ, kde se mění pouze magnetické pole. Při pohybu smyčky, ve které se indukuje napětí, bychom museli následně vztahy patřičně pozměnit. Do vztahu (6) dosadíme (3) a bez jakýchkoli předpokladů prohodíme derivaci a integrál

$$U(t) = -\int_S \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \cdot d\mathbf{S}. \quad (7)$$

Zde docházíme v rozporu s literaturou - Sedlák a Štol ponechávají pro kvazistacionární pole rovnice (3). Naproti Ledvinka již v kvazistacionárním přiblížení započítá elektromagnetickou indukci. Uvažme tedy libovolnou křivku Γ , která je v klidu vůči pozorovateli. Při přenesení jednotkového náboje po této křivce vykonáme práci

$$\oint_{\Gamma} \mathbf{E} \cdot d\mathbf{l}.$$

Podél křivky je indukované napětí U , které je v případě nehybného vodiče dáno vztahem (7). Protože práci lze vyjádřit pomocí napětí vztahem $W = U \cdot Q$ a uvažujeme jednotkový náboj, porovnáním dostaneme

$$\oint_{\Gamma} \mathbf{E} \cdot d\mathbf{l} = - \int_S \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \cdot d\mathbf{S} \Leftrightarrow \nabla \times \mathbf{E} = - \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}.$$

1.3 Nestacionární pole

Rovnice kontinuity zde bude nabývat plného tvaru (1). Všechny rovnice až na Ampérův zákon zůstávají stejné jako v kvazistacionární aproximaci. Aplikací divergence na diferenciální tvar Ampérova zákona dostaneme $\nabla \cdot \mathbf{j} = 0$, ale ukazuje celý tvar rovnice kontinuity, tento člen obecně nulový není. Protože je experimentálně ověřena platnost Gaussova zákona i pro nestacionární pole, je snadné rovnici přepsat, tak aby byla s rovnicí kontinuity konzistentní

$$\nabla \times \frac{\mathbf{B}}{\mu_0} = \mathbf{j} + \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}.$$

2 Maxwellovy rovnice

Maxwellovy rovnice můžeme buď přímo postulovat a následně ukázat konzistenci s ostatními teoriemi. Nebo rovnice vystavět na fenomenologicky určených zákonech (Gaussov, Farradaův . . .), tak budeme postupovat zde, jak jsme ukázali v předchozí sekci. Úplný tvar Maxwellových rovnic ve vakuu tedy je

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{E} &= \frac{\rho}{\varepsilon_0}, \\ \nabla \times \mathbf{E} &= - \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \\ \nabla \times \frac{\mathbf{B}}{\mu_0} &= \mathbf{j} + \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \\ \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0. \end{aligned}$$

Pořadě reprezentují Gaussův zákon dávající vztah mezi tokem plochou a nábojem uvnitř. Faradayův zákon elektromagnetické indukce, který je přepisem toho, že při změně toku magnetického pole dochází k indukci napětí ve vodičích. Další rovnice je Ampérův zákon

vyjadřující vazbu mezi magnetickým polem vodiče protékaným proudem. Časová derivace elektrické intenzity reprezentuje Maxwellův proud, jehož jednoduchou demonstraci vidíme například v elektrickém obvodu, kde je zapojen kondenzátor, který nabíjíme. Tím zřejmě vyváříme magnetické pole. Počítejme jeho tok plochou, která je nejprve celá před kondenzátorem a podruhé uvnitř. Díky Maxwellově proudu nedojde k zániku magnetického pole uvnitř kondenzátoru, kde je nulový proud.

3 Elektromagnetické potenciály

Existují dva potenciály - vektorový potenciál \mathbf{A} a potenciál příslušející elektrickému poli φ . Jsou definovány vztahy

$$\begin{aligned}\mathbf{B} &= \nabla \times \mathbf{A}, \\ \mathbf{E} &= -\nabla\varphi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}.\end{aligned}$$

Úpravou Maxwellových rovnic a užití vhodných kalibračních podmínek dostaneme přepis Maxwellových rovnic čistě pomocí potenciálů. Maxwellovy rovnice v Columbově kalibraci ($\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$)

$$\begin{aligned}\square\mathbf{A} &= \left(\Delta - \frac{\partial^2}{\mu_0\varepsilon_0\partial t^2}\right)\mathbf{A} = -\mu_0\mathbf{j} + \frac{1}{\mu_0\varepsilon_0}\frac{\partial\nabla\varphi}{\partial t}, \\ \Delta\varphi &= -\frac{\rho}{\varepsilon_0}.\end{aligned}$$

Nebo v Lorenzově kalibraci, kde $\nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{1}{\mu_0\varepsilon_0}\frac{\partial\varphi}{\partial t} = 0$. Pak

$$\begin{aligned}\square\mathbf{A} &= -\mu_0\mathbf{j}, \\ \square\varphi &= -\frac{\rho}{\varepsilon_0}.\end{aligned}$$

4 Zákony zachování v teorii ElMag pole

Protože to zatím vypadá, že kdysi dávno, ještě dřív, než kam dohlédne družice Planck, byl náš vesmír symetrický vzhledem k času. Proto očekáváme, že se energie bude zachovávat. Není zrovna krátké ukázat, že platí rovnost

$$\int_{\Omega} -\mathbf{j} \cdot \mathbf{E} \, dV = \int_{\Omega} \left(\mathbf{E} \cdot \frac{\partial\mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{H} \cdot \frac{\partial\mathbf{B}}{\partial t} \right) dV + \oint_{\partial\Omega} (\mathbf{E} \times \mathbf{H}) \, dS,$$

která vyjadřuje rovnováhu mezi výkonem mechanických sil, vycházejících z působení proti Lorentzově síle a výkonem potřebným ke změně elektromagnetického pole v součtu s výkonem odcházejícím povrchem. Kde člen určující změny elektromag. pole pro lin. a ne-disperzní prostředí zavádí hustotu energie

$$\omega = \frac{1}{2}\mathbf{E} \cdot \mathbf{D} + \frac{1}{2}\mathbf{H} \cdot \mathbf{B}.$$

Součin $\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}$ je zván Poyntingův vektor.

9. Základní principy speciální teorie relativity

Zadání otázky: Otázka éteru a Michelsonův-Morleyův experiment. Výchozí principy STR, Lorentzova transformace. Minkowského prostoročas, světelný kužel. Relativistická pohybová rovnice, ekvivalence hmotnosti a energie. Maxwellovy rovnice ve čtyřrozměrném tvaru.

Celý text této kapitoly vznikl ořezáním skript docenta Semeráka. Komu to připadá příliš stručné, necht' si raději přečte zmiňovaná skvělá skripta.

Relativita náhledu na tentýž jev z různých systémů je triviální zjištění známé dávno před Einsteinem (Aryabatha, Galilei). Nejdůležitější obsah STR spočívá v hledání invariantních (absolutních, obecných) veličin a zákonů vůči Lorentzově transformaci. Ukazuje se, že všechny inerciální systémy jsou z hlediska fyzikálních zákonů ekvivalentní. STR není ani tak teorie jako spíše princip, který by měly splňovat ostatní teorie - elektrodynamika tento princip splňuje, mechanika vzniká díky STR nová, oblast nutnosti jejího použití roste s rychlostí. V STR čas není absolutní (rovnoměrně plynoucí, nezávislý na místě) ale provázaný s prostorovými souřadnicemi: úvahy budeme provádět ve čtyřrozměrném prostoročase.

Jednou z centrálních vlastností vesmíru se zdá být rychlost světla c , která je konstantní, navíc nezávislá na směru, čase, poloze a špatně zapojených kabelech v Gran Sasso. Z hlediska kauzality je maximální rychlostí šíření signálu.

9.1 Otázka éteru a Michelsonův-Morleyův experiment

Ve fyzice se éter ve spojení s šířením světla objevil poprvé v práci Newtona. V jeho korpuskulární teorii světla (1672) sloužil éter k vysvětlení lomu a ohybu: částice světla rotují, při pohybu éterem zatáčejí a jsou rozptylovány (jako rotující tenisové míčky ve vzduchu - tzv. Magnusův jev). Ve vlnové teorii Chistiana Huygense (1678) se již éter vyskytuje jako zprostředkující medium nesoucí světelné signály. Na to navázal Fresnel ve své teorii světla jako příčného vlnění éteru.

Vlastnosti éteru: světelné vlnění má fungovat dle mechanické představy (jako šíření vln elastického napětí), ale éter musí prostupovat látkou bez mechanické interakce (jinak by kladl odpor vesmírným tělesům). Jeho soustava musí být inerciální a navíc v klidu vůči Newtonovu absolutnímu prostoru.

Maxwell roku 1864 vytvořil teorii elektromagnetického vlnění, které se šíří konečnou rychlostí c . Teorie nebyla invariantní vůči Galileově transformaci a tedy dávala různé výsledky v různých inerciálních soustavách. To podnítilo snahu vědců identifikovat klidovou soustavu éteru, vůči níž se Země zcela jistě pohybuje. Pokud se světlo šíří rychlostí c vůči éteru, pak je jeho rychlost vůči laboratoři dána složením s rychlostí laboratoře v .

Michelson-Morleyův experiment využívá systému polopropustné desky, dvou zrcadel a dalekohledu. Přes polopropustnou desku je veden monochromatický svazek, je rozdělen do dvou kolmých směrů, paprsky jsou následně svedeny zpět a interferují v dalekohledu. Pootáčením zařízení se obecně mění doba, za které paprsky projdou své dráhy a tedy by se měl změnit i interferenční obrazec.

Necht' l_1 a l_2 jsou délky ramen interferometru a laboratoř letí rychlostí v ve

směru ramene 1 vůči éteru. Interferenční obrazec je určen dobou, po kterou paprsky cestují odděleně, tedy rozdílem $\Delta t = t_2 - t_1$. Čas t_1 spočteme v laboratorní soustavě: jednou letí světlo rychlostí $c - v$, jednou rychlostí $c + v$, proto

$$t_1 = \frac{l_1}{c+v} + \frac{l_1}{c-v} = \frac{2l_1}{c} \frac{1}{1 - \frac{v^2}{c^2}}.$$

Čas t_2 naopak snadno určíme v soustavě éteru, v němž paprsek letí po ramenech rovnoramenného trojúhelníku výšky l_2 . Z Pythagorovy věty:

$$\left(\frac{ct_2}{2}\right)^2 = (l_2)^2 + \left(\frac{vt_2}{2}\right)^2 \Rightarrow t_2 = \frac{2l_2}{c} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}.$$

Potom

$$\Delta t = \frac{2}{c} \left(\frac{l_2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - \frac{l_1}{1 - \frac{v^2}{c^2}} \right).$$

Při pootočení přístroje o 90° dostaneme analogicky

$$\Delta \tilde{t} = \frac{2}{c} \left(\frac{l_2}{1 - \frac{v^2}{c^2}} - \frac{l_1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \right).$$

O ZMĚNĚ obrazce BĚHEM OTOČENÍ rozhoduje, jak se liší Δt a $\Delta \tilde{t}$, tedy

$$\begin{aligned} \Delta \tilde{t} - \Delta t &= \frac{2(l_1 + l_2)}{c} \left(\frac{1}{1 - \frac{v^2}{c^2}} - \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \right) \cong \\ &\cong \frac{2(l_1 + l_2)}{c} \left(1 + \frac{v^2}{c^2} - 1 - \frac{v^2}{2c^2} \right) = \frac{l_1 + l_2}{c} \frac{v^2}{c^2}. \end{aligned}$$

Zde jsme použili řádový odhad rychlosti v , která je blízká rychlosti oběhu kolem Slunce, tedy $v = 30 \text{ km.s}^{-1} = 10^{-4} c$. Potom platí rozvoj do lineárního řádu

$$\frac{1}{\sqrt{1-x}} \cong \frac{1}{1 - \frac{x}{2}} \cong 1 + \frac{x}{2}.$$

Je něco takového vůbec měřitelné? Posun o 1 interferenční proužek odpovídá posunu skládajících se vlnění o jednu vlnovou délku, tedy

$$\Delta \tilde{t} - \Delta t = \frac{\lambda}{c} \Leftrightarrow (l_1 + l_2) \frac{v^2}{c^2} = \lambda.$$

Dosažením rozumných hodnot vyjde součet v řádech 10 m, což lze v pohodě realizovat třeba pomocí vícenásobných odrazů.

Výsledek experimentu: žádný posun proužků se nenaměřil.

9.2 Výchozí principy STR a Lorentzova transformace

Principy jsou tři. Jedná se o předpoklady jednoduchosti (symetrie) světa.

Newtonův zákon vychází z Galileiho principu setrvačnosti: existuje kartézský systém, vůči němuž se všechny volné hmotné body pohybují rovnoměrně přímočaře a nazýváme ho inerciální (IS). Pak jich ale existuje nekonečně mnoho (stačí, aby se vůči původnímu pohybovaly rovnoměrně přímočaře). Aby byl bod volný, nesmí na něj působit pravé síly - proto v STR neuvažujeme gravitaci (šlo by vzít homogenní pole, ale nedělá se to). Inerciální soustavy představují ideální tuhé tyče a ideální hodiny v každém bodě prostoru, které jsou v klidu, jsou volné a světelně synchronizované.

Princip speciální relativity říká, že všechny fyzikální zákony lze formulovat ve tvaru, který je ve všech IS stejný. Zákony jsou nezávislé na místě, směru a čase.

Princip invariance a konečné rychlosti světla říká, že ve vakuu se světlo vůči všem IS pohybuje rovnoměrně přímočaře konečnou rychlostí c . Vyplývá z principu relativity, protože kdyby c nebyla ve všech IS stejná, nebyly by tyto systémy rovnocenné.

Lorentzova transformace je nutná vzhledem k požadované konečnosti c , Galileiho transformace by totiž bez problémů dávala nekonečné rychlosti. Uvažujme shodně orientované IS (x, y, z) a $IS'(x', y', z')$, jejichž počátky jsou v čase $t = 0 = t'$ totožné a IS' se vůči IS pohybuje rychlostí v v kladném směru osy x . Toto nastavení JE újmou na obecnosti (nikoliv však na obecnosti fyzikálních dějů) - mluvíme o speciální Lorentzově transformaci. Tvar transformace omezují výchozí principy: přechod mezi inerciálními soustavami musí pro zachování Newtonova zákona znamenat, že se rovnoměrný přímočarý pohyb transformuje na rovnoměrný přímočarý pohyb - odtud linearita:

$$\begin{aligned}t' &= At + Bx, \\x' &= Ct + Dx.\end{aligned}$$

Prostoročas předpokládáme homogenní, proto by měly být rovnoprávné všechny směry kolmé k rychlosti \vec{v} , navíc transformace musí mít stejný tvar směrem do IS' i zpět - odtud $y' = y, z' = z$.

- Počátek IS' se pohybuje dle rovnice $x = vt$. Potom $x' = 0 = Ct + Dx = Ct + Dvt \Rightarrow C = -Dv$. Odtud $x' = D(x - vt)$.
- Díky rovnocennosti systémů musí mít inverzní transformace stejný tvar jako přímá: $x = D(x' - v't')$ (protože $v = -v'$).

Pokud vyšleme z počátků světelný signál v čase, kdy skrz sebe procházejí, bude se světlo šířit podél x i x' dle rovnic $x = ct$ a $x' = ct'$, které dosadíme do přímého a zpětného vztahu, rovnice mezi sebou vynásobíme a úpravou dostáváme Lorentzův faktor

$$D = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \equiv \gamma,$$

a transformační vztahy

$$x' = \gamma(x - vt), x = \gamma(x' + vt').$$

Pro odvození transformace času první z rovnic násobíme γ a obě rovnice sečteme:

$$\gamma x' + x = \gamma^2 x - \gamma^2 vt + \gamma x' + \gamma vt' \Rightarrow \gamma vt' = \gamma^2 vt + (1 - \gamma^2)x = \gamma^2 vt - \frac{v^2}{c^2} \gamma^2 x,$$

respektive

$$t' = \gamma \left(t - \frac{v}{c^2} x \right).$$

Podívejme se na důsledky transformace (pro jednoduchost se omezíme jen na osu x , resp x' , směry y, z nejsou důležité). **Relativitu souměrnosti** obdržíme, pokud se 2 události stanou v IS' na stejném místě $x'_2 = x'_1$. Pak je prostorová odlehlost $\Delta x' = x'_2 - x'_1 = 0$ v IS', ale v IS máme díky Lorentzově transformaci

$$0 = \Delta x' = \gamma(\Delta x - v\Delta t) \Rightarrow \Delta x = v\Delta t.$$

Pokud by se události staly ve stejném čase, bude $\Delta t = 0$ a budou souměrné vždy.

Mějme naopak 2 události, jež se stanou v IS současně: $\Delta t = t_2 - t_1 = 0$. Díky transformaci času je:

$$\Delta t' = \gamma \left(\Delta t - \frac{v}{c^2} \Delta x \right) = -\gamma \frac{v}{c^2} \Delta x.$$

Relativita současnosti je něco nového - dle Galileiho a Newtona byl čas absolutní.

Tyč klidná v IS' mířící ve směru x' má klidovou délku $l_0 \equiv \Delta x' = \gamma(\Delta x - v\Delta t)$. Měření délky v IS je ekvivalentní registraci současné polohy konců tyče vzhledem k IS. Zápis polohy musí proběhnout ve stejném nečárkovaném čase, potom $\Delta t = 0$ a ihned vidíme **kontrakci délek**

$$l_0 = \gamma \Delta x = \gamma l,$$

tedy objekty jsou nejdelší vůči svému klidovému systému. Poznamenejme, že současné měření v IS se nejví současně z IS': tam to vypadá, že pán/paní s metrem v IS změřil(a) přední konec dřívě.

Mějme nepohybující se hodiny v IS' (tedy $\Delta x' = 0$), které změří časový interval $\Delta t'$. Odpovídající nečárkovaný čas podléhá **dilataci času**

$$\Delta t = \gamma \left(\Delta t' + \frac{v}{c^2} \Delta x' \right) = \gamma \Delta t' \equiv \Delta \tau,$$

kde $\Delta \tau$ značí interval vlastního času, který se měří na klidových hodinách a je nejkratším časem, který lze mezi událostmi naměřit. Δt v podstatě představuje rozdíl údajů na dvou synchronizovaných hodinách vzdálených $v\Delta t$, protože IS' se vůči IS pohybuje.

Pokud se těleso pohybuje vůči IS 3-rychlostí $\vec{w} = \frac{d\vec{x}}{dt}$, určíme jeho **transformovanou rychlost** v IS' z Lorentzovy transformace:

$$w'_x = \frac{d[\gamma(x - vt)]}{d[\gamma(t - \frac{v}{c^2}x)]} = \frac{dx - vdt}{dt - \frac{v}{c^2}dx} = \frac{\frac{dx}{dt} - v}{1 - \frac{v}{c^2} \frac{dx}{dt}} = \frac{w_x - v}{1 - \frac{v}{c^2} w_x},$$

$$w'_y = \frac{dy}{d[\gamma(t - \frac{v}{c^2}x)]} = \frac{1}{\gamma} \frac{\frac{dy}{dt}}{1 - \frac{v}{c^2} \frac{dx}{dt}} = \frac{1}{\gamma} \frac{w_y}{1 - \frac{v}{c^2} w_x},$$

vztah pro w_z je analogický.

V Galileiho transformaci byla invariantní časová odlehlost dt a prostorová odlehlost $dl = \sqrt{dx^2 + dy^2 + dz^2}$. V Lorentzově transformaci je **invariantní prostoročasový interval** $ds^2 = -c^2 dt^2 + dl^2$, protože

$$\begin{aligned} ds'^2 &= -c^2 \left[\gamma \left(dt - \frac{v}{c^2} dx \right) \right]^2 + [\gamma(dx - vdt)]^2 + dy^2 + dz^2 = \\ &= \gamma^2 \left(-c^2 dt^2 + 2vdt dx - \frac{v^2}{c^2} dx^2 + dx^2 - 2vdt dx + v^2 dt^2 \right) + dy^2 + dz^2 = \\ &= \gamma^2 \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right) (-c^2 dt^2 + dx^2) + dy^2 + dz^2 = ds^2. \end{aligned}$$

Ale pozor, prostoročasový interval není čtyřrozměrným ekvivalentem vzdálenosti.

9.3 Minkowského prostoročas

Připomeňme konvence užívané v STR. Užívá se Einsteinovo sumační pravidlo aplikované na sčítací index: vyskytuje-li se v součinu stejný horní a dolní index, pak se sčítá přes všechny hodnoty, jichž může nabývat. Takovou dvojici indexů můžeme přeznačovat (ovšem ne symbolem, který už ve členu jednou vystupuje!). Řecké indexy běží od 0 do 3, latinské od 1 do 3. Veličiny jsou vyjádřeny v soustavě SI. Metrický tenzor $g_{\mu\nu} \equiv \eta_{\mu\nu}$ se nazývá Minkowského a je definován $\text{diag}(-1, 1, 1, 1)$. Parciální derivaci lze značit čárkou v indexech: $\frac{\partial X^\mu}{\partial x^\alpha} \equiv X^\mu_{,\alpha}$. Vektorové indexy píšeme nahoru, index k nim duálních lineárních funkcionalů/kovektorů píšeme dolů.

Potkáme hodně tenzorů, což jsou učeně¹: multilineární zobrazení z kartézského součinu r kovektorových a s vektorových prostorů, které označujeme jako r -krát kontravariantní a s -krát kovariantní (nebo typu (r, s)). Počet složek tenzoru je: $(\text{dimenze})^{r+s}$. Tenzory se hodí proto, že jsou definovány bez vazby na souřadnicovou bázi, tedy obsahují jakousi invariantní informaci platnou ve všech IS. Zákony budeme chtít zapsat ve tvaru, kdy na obou stranách budou tenzory stejného typu. Mluvíme pak o kovariantním tvaru.

O tom, zda je veličina vektor, kovektor nebo tenzor, rozhoduje, jak se veličina transformuje při změně souřadnic $x^\nu \rightarrow x'^\mu (x^\nu)$. Vektory transformujeme pomocí přímých Jacobiho matic, kovektory pomocí inverzních Jacobiho matic a tenzory typu (r, s) pomocí r přímých a s inverzních matic. Konkrétně:

$$\begin{aligned} V'^\mu(x') &= \frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\nu} V^\nu(x), \\ C'_\alpha(x') &= \frac{\partial x^\beta}{\partial x'^\alpha} C_\beta(x), \\ T'^{\mu\dots}_{\alpha\dots}(x') &= \frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\nu} \dots \frac{\partial x^\beta}{\partial x'^\alpha} \dots T^{\nu\dots}_{\beta\dots}(x). \end{aligned}$$

Invariantem jsou **skaláry** (tenzory bez indexů), **kontrakce tenzorů** (kontrahovaný tenzor vzniká vysčítání přes 2 indexy, např. $T^{\dots\mu\dots}_{\dots\mu\dots}$) a **vnitřní (skalární) součin**, jehož invariance se ukáže jako

$$\eta_{\mu\nu} V'^\mu W'^\nu = \eta_{\mu\nu} \frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\rho} V^\rho \frac{\partial x'^\nu}{\partial x^\sigma} W^\sigma = \eta_{\mu\nu} \delta^\mu_\rho \delta^\nu_\sigma V^\rho W^\sigma,$$

¹Méně učeně je to krabice, do které strčíme r kovektorů, s vektorů a ona pak vyzvrátí číslo. Pokud tam vrazíme méně kovektorů/vektorů, dostaneme tenzor typu $(r - u, s - v)$

což je ekvivalentní relacím ortogonality (stačí z rovnice „vynechat“ vektory). Takovýto skalární součin je indefinitní.

Metrický tenzor tedy definuje skalární součin, a také umožňuje zvyšovat a snižovat indexy, neboť k němu existuje inverze $\eta^{\mu\nu}$. Ta má v STR úplně stejný tvar jako původní $\eta_{\mu\nu}$ a platí $\eta^{\mu\rho}\eta_{\rho\alpha} = \delta_{\alpha}^{\mu}$. Změna indexu se prostě provede:

$$\eta_{\alpha\beta}T^{\dots\beta\dots} = T^{\dots\alpha\dots}.$$

Při transformaci mezi IS budou samozřejmě čárkované a nečárkované souřadnice spojeny maticí Lorentzovy transformace Λ^{μ}_{ν} , což je speciální případ obecné Jacobiho matice a potom $dx'^{\mu} = \Lambda^{\mu}_{\nu}dx^{\nu}$. Z linearity transformací plyne nezávislost matic na souřadnicích a obdobný vztah tedy musí platit i pro samotné souřadnice: $x'^{\mu} = \Lambda^{\mu}_{\nu}x^{\nu}$. Pokud si uvědomíme, že $(x^0, x^1, x^2, x^3) \equiv (ct, x, y, z)$, dostaneme srovnáním s předpisy speciální Lorentzovy transformace složky matice:

$$(\Lambda^{\mu}_{\nu})_{\text{spec}} = \begin{pmatrix} \gamma & -\gamma\frac{v}{c} & 0 & 0 \\ -\gamma\frac{v}{c} & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Relace ortogonality jsou potom

$$\eta_{\mu\nu}\Lambda^{\mu}_{\rho}\Lambda^{\nu}_{\sigma} = \eta_{\rho\sigma}.$$

Z algebry víme, že pro ortogonální matice je inverzní matice rovna transponované. Nutno ovšem uvážit opačnou rychlost systémů, potom bude inverzní Λ_{ν}^{μ} stejná jako matice výše, až na znaménko u v .

Pro počítání s tenzory je dobré vědět:

- Pokud se v součinu sčítá přes 2 indexy, je jedno, zda je první z nich nahoře nebo dole.
- Vnitřní násobení je komutativní - nezávisí na pořadí tenzorů (pokud není tenzor operátorem).
- Parciální derivace se vůči lineárním transformacím chová jako kovektor.
- Metrický tenzor je symetrický (nezávisí na pořadí indexů, pro obecný tenzor by na pořadí indexů záviselo).
- Tenzor řádu ≥ 2 lze rozepsat na symetrickou a antisymetrickou část v daných dvou indexech. Stopa vnitřního součinu symetrického a antisymetrického tenzoru je nulová.

Poslední tvrzení plyne z maticových vlastností: necht $S_{\mu\nu}$ je ve svých indexech symetrický, $A_{\mu\nu}$ antisymetrický. Pak můžeme psát

$$S_{\mu\nu}A_{\mu\nu} = S_{\nu\mu}A_{\nu\mu} = -S_{\mu\nu}A_{\mu\nu} \Rightarrow S_{\mu\nu}A_{\mu\nu} = 0,$$

kde za prvním rovnítkem pouze přeznačujeme sčítací indexy, za druhým rovnítkem indexy prohazujeme - antisymetrická matice se změní o mínus. Bez nulovosti stopy by rovnost nemohla být splněna. Z toho plyne často používaný závěr: součin

tenzoru symetrického/antisymetrického v jistých indexech s tenzorem antisymetrickým/symetrickým v těch samých indexech je nula.

Prostorčasový diagram vypadá tak, že na svislou osu vyneseme časovou souřadnici ct , ve vodorovných rovinách žijí prostorové souřadnice, ale kreslí se pochopitelně jen x . Událost se zobrazí jako bod, časový vývoj události se zobrazí jako světočára. Je-li světočára historií pohybu, pak sklon tečny ke světočáře $\frac{dx^i}{dt}$ je rychlostí pohybu v daném místě. Pro nulové rychlosti je tečna svislá, s rostoucí rychlostí se odklání k vodorovnému směru, který by odpovídal nekonečné rychlosti. Pohyb rychlostí světla je popsán $x = \pm ct$ - tomu odpovídají diagonální směry v diagramu, v 3D diagramu by to byl kužel - odtud název **světelný kužel**. Oblast podsvětelných rychlostí je tedy mezi kuželem a svislou osou.

Rozlišujeme 3 druhy 4-vektorů a ploch, podle toho, jak se zobrazují v diagramu: časupodobné, prostorupodobné a světelné. Pro časupodobné vektory (míří spíš podle osy ct) platí vztah mezi složkami a skalárním součinem

$$\begin{aligned}\eta_{\mu\nu}V^\mu V^\nu &= -(V^0)^2 + (V^1)^2 + (V^2)^2 + (V^3)^2 < 0 \\ \Leftrightarrow |V^0| &> \sqrt{(V^1)^2 + (V^2)^2 + (V^3)^2},\end{aligned}$$

pro prostorupodobné jsou nerovnosti obrácené, pro časupodobné je tam rovnost. Plochy nejlépe posuzujeme dle normálových polí: je-li normála časupodobná, je plocha prostorupodobná atd.. Je-li prostorčasový interval mezi 2 událostmi záporný/kladný/nulový, pak každá událost leží uvnitř/vně/na světelném kuželu druhé události, tedy jsou vzdáleny více v čase/více v prostoru/stejně v čase i prostoru. Pokud by se mezi takovými událostmi něco pohybovalo, pak podsvětelnou/nadsvětelnou/světelnou rychlostí.

Jak se v diagramu zobrazují osy nějakého IS'? Osa ct' je dána rovnicí $x' = 0$, potom $0 = \gamma(x - \frac{v}{c}ct)$ a z toho hned plyne $ct = \pm \frac{c}{v}x$, kde plus i minus je proto, že nás zajímá transformace jak ve směru x , tak ve směru $-x$. Osu x' dostaneme z analogické podmínky pro $ct' = 0$ jako $ct = \pm \frac{v}{c}x$. Osy se tedy vzrůstem rychlosti přiklánějí ke světelnému kuželu a naopak. **Relativita souměrnosti** plyne z toho, že přímky $x' = \text{konst}$ jsou skloněny vůči $x = \text{konst}$. Stejně tak **relativita současnosti** plyne ze sklonění přímek $ct' = \text{konst}$. Světelný kužel se transformací nemění. Je-li prostorčasový interval mezi dvěma událostmi prostorupodobný, lze osu x' sklonit tak, že v IS' jsou události současné, a existuje nekonečně mnoho systémů, v nichž se staly tyto události v opačném pořadí. Je-li prostorčasový interval mezi dvěma událostmi časupodobný, nelze osu x' dostat nad světelný kužel a pořadí událostí zůstává zachováno. Potom rozlišujeme absolutní minulost, budoucnost a relativní přítomnost, v níž nelze spojovat jiné události s vrcholovou událostí časupodobně - nejsou tedy v kauzálním kontaktu.

Transformací se deformují jednotky, takže abychom ukázali kontrakci délek a dilataci času, kreslí se síť invariantních vrstevnic ds^2 vzhledem k vrcholové události. Vrstevnice $ds^2 = 1 \text{ m}^2$ ukazují, kam sahá podél různých možných prostorových os jednotka délky. Události vzdálené 1 m v různých systémech tedy leží na hyperbole $dx = \pm \sqrt{1\text{m}^2 + c^2 dt^2}$. Jeden metr v časupodobných směrech plyne z podmínky $ds^2 = -c^2 d\tau^2 = -1 \text{ m}^2$ a je analogicky určen $cdt = \pm \sqrt{1\text{m}^2 + dx^2}$. Pak už stačí dokreslit nějaký IS' a zkoumat, co se děje se vzdálenostmi a časem.

9.4 Relativistická pohybová rovnice, ekvivalence hmotnosti a energie

STR vzešla z rozdílného chování elektrodynamiky a klasické mechaniky při transformaci mezi IS. Přepisem do tenzorové podoby se mechanika vytvoří nová - relativistická.

Namísto trajektorie se zavádí světočára $x^\mu = x^\mu(\tau)$ parametrizovaná vlastním časem, který je invariantní, což je dobře, protože pouze derivací dle invariantu vznikají z tenzorů zase tenzory. Uvažujeme pohyb hmotných částic - tedy po časupodobných světočarách.

4-rychlost je tečný vektor ke světočáře $u^\mu \equiv \frac{dx^\mu}{d\tau}$. Je jistě 4-vektorem, protože diferenciál polohy je 4-vektorem a derivujeme dle invariantu. Transformuje se tedy pomocí přímé Jacobiho (Lorentzovy) matice. Skalární součin je díky 4-vektorovosti invariantní

$$\eta_{\mu\nu} u^\mu u^\nu = \eta_{\mu\nu} \frac{dx^\mu}{d\tau} \frac{dx^\nu}{d\tau} = \frac{ds^2}{d\tau^2} = -c^2.$$

Vztah ke klasické rychlosti dostaneme z

$$u^\mu = \frac{dx^\mu}{d\tau} = \frac{dx^\mu}{dt} \frac{dt}{d\tau} = \frac{d(ct, \vec{x})}{dt} \gamma = \gamma(c, \vec{v}).$$

Vztah $\frac{dt}{d\tau} = \gamma$ je přepis dilatace času. Vidíme, že prostorová část 4-rychlosti je γv^i .

Z invariance 4-rychlosti plyne, že se nesmí měnit její velikost, pouze směr. **4-zrychlení** $a^\mu \equiv \frac{du^\mu}{d\tau}$ je tedy vždy kolmé na 4-rychlost.

Pro další počítání potřebujeme zjistit, jak se transformuje hmotnost. Nechme centrálně srazit 2 stejné izolované koule, za předpokladu zachování hmotnosti a 3-hybnosti ve všech IS.

V těžišťovém systému IS_T se koule pohybují stejně rychle (ale opačně) rychlostmi \vec{v}_T . Napíšeme rovnice zachování

$$\begin{aligned} m_T + m_T &= 2m_T = M_T \equiv M_0, \\ m_T \vec{v}_T^{(1)} + m_T \vec{v}_T^{(2)} &= m_T (v_T - v_T) = 0 = M_T \vec{V}_T. \end{aligned}$$

M_T je klidová hmotnost v okamžiku srážky, neboť $\vec{V}_T = \vec{0}$.

Z hlediska IS, který se pohybuje rychlostí v v kladném směru x_T , máme

$$m^{(1)} v^{(1)} + m^{(2)} v^{(2)} = MV = (m^{(1)} + m^{(2)}) V = (m^{(1)} + m^{(2)}) (-v).$$

Koule s v v okamžiku srážky v IS_T zastaví, z toho plyne poslední rovnost, díky pohybu IS. Nalevo dosadíme z Lorentzovy transformace

$$m^{(1)} \frac{v_T - v}{1 - \frac{v}{c^2} v_T} + m^{(2)} \frac{-v_T - v}{1 + \frac{v}{c^2} v_T} = - (m^{(1)} + m^{(2)}) v.$$

a úpravou

$$\frac{m^{(1)}}{1 - \frac{v}{c^2} v_T} = \frac{m^{(2)}}{1 + \frac{v}{c^2} v_T}.$$

Dále je potřeba mechanicky spočítat faktory γ odpovídající rychlostem $v^{(1,2)}$ koulí vůči IS. Dostaneme $\gamma^{(1,2)} = \gamma_T \gamma (1 \mp \frac{v}{c^2} v_T)$ a dosazením do rovnice výše

$$\frac{m^{(1)}}{\gamma^{(1)}} = \frac{m^{(2)}}{\gamma^{(2)}}.$$

Výsledek lze nahlížet i pro 1 těleso (hmotnost m) ve více se systémech (různá γ). Poměr m/γ je tedy invariant a má význam klidové hmotnosti, neboť $\gamma = 1$ pro $v = 0$.

$$m = m_0 \gamma.$$

Potom můžeme zavést **4-hybnost** $p^\mu \equiv m_0 u^\mu = m_0 \gamma (c, \vec{v}) = m (c, \vec{v}) = (mc, \vec{p})$.

Jelikož neinvariantní setrvačná hmotnost vystupuje v obvyklé **pohybové rovnici**, potřebujeme rovnici jinou. Na levou stranu se nabízí $\frac{dp^\mu}{d\tau}$ nebo $m_0 a^\mu$, jenže druhou variantu zamítneme (protože existují procesy, při nichž se práce může spotřebovat na změnu klidové hmotnosti). Vezmeme

$$F^\mu = \frac{dp^\mu}{d\tau} = \frac{dp^\mu}{dt} \frac{dt}{d\tau} = \gamma \frac{dp^\mu}{dt} = \gamma \frac{d(mc, \vec{p})}{dt} = \gamma \left(c \frac{dm}{dt}, \vec{f} \right),$$

kde \vec{f} je klasická síla. Uvědomme si, že v „klasické“ hybnosti je zahrnuta hmotnost, která závisí na rychlosti! Potom ale

$$\begin{aligned} \frac{dp^i}{dt} &= \frac{dm_0 \gamma v^i}{dt} = m \frac{dv^i}{dt} + m_0 \frac{d\gamma}{dt} v^i + \frac{dm_0}{dt} \gamma v^i = \\ &= m \frac{dv^i}{dt} + m_0 \gamma^3 \frac{\vec{v} \cdot \vec{a}}{c^2} v^i + \frac{dm_0}{dt} \gamma v^i = ma^i + \left(m_0 \gamma^2 \frac{\vec{v} \cdot \vec{a}}{c^2} + \frac{dm_0}{dt} \right) \gamma v^i, \end{aligned}$$

což se může rovnat klasickému ma^i jen tehdy je-li celá závorka výše nulová. To platí například při pohybu nabitě částice v magnetickém poli, kdy $\vec{v} \cdot \vec{a} = 0$.

Provedme 4-rozměrnou obdobu výkonu síly $\delta_{ij} f^i v^j$ jako

$$\begin{aligned} \eta_{\mu\nu} F^{\mu\nu} u^\nu &= \eta_{\mu\nu} \frac{dp^\mu}{d\tau} u^\nu = \eta_{\mu\nu} \frac{dm_0 u^\mu}{d\tau} u^\nu = \eta_{\mu\nu} \frac{dm_0}{d\tau} u^\mu u^\nu + \eta_{\mu\nu} m_0 \frac{du^\mu}{d\tau} u^\nu = \\ &= -c^2 \frac{dm_0}{d\tau} + \eta_{\mu\nu} m_0 a^\mu u^\nu = -c^2 \frac{dm_0}{d\tau}, \end{aligned}$$

kde poslední rovnost platí díky kolmosti 4-zrychlení na 4-rychlost. Výsledkem je invariantní vztah říkající, že **klidová hmotnost se mění**, pokud není 4-síla kolmá (prostorochasově) na 4-rychlost.

Pro odvození **Einsteinova vztahu pro energii** potřebujeme něco jako relativistický zákon zachování energie. Do rovnice výše dosadíme složky 4-vektorů nalevo:

$$-\gamma c F^0 + \gamma^2 \delta_{ij} f^i v^j = -c^2 \frac{dm_0}{d\tau} \Rightarrow F^0 \left(= \gamma c \frac{dm}{dt} \right) = c \frac{dm_0}{dt} + \frac{\gamma}{c} \vec{f} \cdot \vec{v}.$$

Rovnici vynásobíme $\frac{c}{\gamma} dt$. Potom

$$c^2 d = \frac{1}{\gamma} c^2 dm_0 + \vec{f} \cdot d\vec{r},$$

což je podobné jako 1. věta termodynamiky - členy nalevo mají roli dodané tepelné energie (která souvisí se změnou klidové hmotnosti) a přírůstků práce.

Pokud bude nyní působící síla \vec{f} jenom konat práci, bude změna kinetické energie

$$dT = \vec{f} \cdot d\vec{r} = dmc^2.$$

Kinetická energie se mění s rychlostí, integrujme tedy „přes rychlost“.

$$T - T_{in} = \int_{T_{in}}^T dT = \int_{v_{in}}^v dmc^2 = mc^2 - m_{in}c^2.$$

Při urychlování z klidu hraje m_{in} roli klidové hmotnosti a $T_{in} = 0$. A hle!

$$mc^2 = m_0c^2 + T \Rightarrow E = E_0 + T.$$

To znamená: celková energie tělesa je součtem jeho klidové a kinetické energie, hmotnost a energie jsou ekvivalentní (úměrné přes c^2). Klidová energie je jediným invariantem ve vztahu - těleso má energii už jen díky své existenci (a nemusí ani s ničím interagovat).

Vztah mezi energií a hybností určíme spočítáním prostoročasové normy p^μ nejprve dosazením definice, následně dosazením složek $(mc, \vec{p}) = (E/c, \vec{p})$:

$$\eta_{\mu\nu}p^\mu p^\nu = \begin{cases} m_0^2 \eta_{\mu\nu} u^\mu u^\nu = -m_0^2 c^2 \\ -m^2 c^2 + p^2 = -\frac{E^2}{c^2} + p^2 \end{cases} \Rightarrow E^2 = c^2 (m_0^2 c^2 + p^2).$$

Z toho plyne invariant $m_0^2 c^2 = \frac{E^2}{c^2} - p^2$ často používaný v částicové fyzice. Vztah výše lze také zlimitit. Je-li p^2 malé oproti $m_0^2 c^2$ tak výraz odmocníme, z odmocniny vytkneme $m_0^2 c^2$ a uděláme aproximaci $\sqrt{1+x} \approx (1 + \frac{x}{2})$. Opačnou limitou je limita $m_0 = 0$, pak se musí částice pohybovat rychlostí světla, aby mohla mít nenulovou energii, která je navíc kinetické povahy.

9.5 Maxwellovy rovnice ve čtyřrozměrném tvaru

Elektrodynamika je dle STR správně, jen ji přepíšeme do tenzorové podoby.

Začneme u zdrojů, jimiž jsou náboje a proudy s hustotami ρ respektive $\vec{J} = \rho \vec{v}$ (\vec{v} je rychlost pohybu nosičů náboje). S uvážením jednotek je jediná možnost na poskládání 4-vektoru:

$$J^\mu \equiv (\rho c, \vec{J}) = \rho (c, \vec{v}) = \frac{\rho}{\gamma} \gamma (c, \vec{v}) = \frac{\rho}{\gamma} u^\mu = \rho_0 u^\mu,$$

což je **čtyřrozměrná hustota proudu** (čtyřproud). Co se týče hustoty náboje: pokud se nosiče náboje pohybují vůči objemovému elementu, vejde se jich do objemu γ -krát více oproti klidu, ρ_0 je tedy nejmenší možná. Klidový objem a velikost elektrického náboje jsou invariantní, je tedy invariantní i ρ_0 . Pak je zavedený proud 4-vektorem a jeho prostoročasová norma je také invariantní

$$-c^2 \rho^2 + \vec{J} \cdot \vec{J} = \eta_{\mu\nu} J^\mu J^\nu = -c^2 \rho_0^2$$

4-potenciál lze také ze skalárního a vektorového potenciálu zkombinovat jen jedním způsobem $A^\mu \equiv \left(\frac{\phi}{c}, \vec{A}\right)$, ale o jeho transformaci nemůžeme zatím nic říct; navíc potenciály nejsou ani měřitelné.

Pro magnetické pole narážíme na problém v rovnici $\vec{B} = \text{rot}\vec{A}$, což přímočaře do 4-prostoru nerozšíříme. \vec{B} je totiž axiální vektor, což je antisymetrický tenzor 2. řádu (při inverzi souřadnic nemění znaménko), který má shodou okolností ve 3D jen 3 nezávislé složky, které se právě vejdu do 3D vektoru. Ve 4D jich už má 6. Tenzorový tvar je $B_{jk} = A_{k,j} - A_{j,k}$, který souvisí s axiálním vektorem B^i jako

$$B^i = \frac{1}{2}\epsilon^{ijk} B_{jk} \Leftrightarrow B_{jk} = \epsilon_{jkl} B^l.$$

Budeme rozšiřovat tenzorový tvar jako

$$F_{\mu\nu} \equiv A_{\nu,\mu} - A_{\mu,\nu}.$$

Jeho $F_{0j} = F_{j0}$ složky určíme ze znalosti $A_\mu = \left(-\frac{\phi}{c}, \vec{A}\right)$ a $E_j = -\phi_{,j} - A_{j,t}$ jako

$$F_{0j} = A_{j,0} - A_{0,j} = \frac{1}{c} \frac{\partial A_j}{\partial t} + \frac{1}{c} \frac{\partial \phi}{\partial x^j} = -\frac{E_j}{c}.$$

A už známe celou matici, protože nediagonální prostorové složky jsou $B_{jk} = \epsilon_{jkl} B^l$ a diagonální prostorové složky jsou nulové díky antisymetrii rozšiřovaného tenzoru.

$$F_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{E_x}{c} & -\frac{E_y}{c} & -\frac{E_z}{c} \\ \frac{E_x}{c} & 0 & B^z & -B^y \\ \frac{E_y}{c} & -B^z & 0 & B^x \\ \frac{E_z}{c} & B^y & -B^x & 0 \end{pmatrix}.$$

Dostali jsme **tenzor elektromagnetického pole**, \vec{E} už tedy rozšiřovat nebudeme. Tenzorovost závisí pouze na tom, zda je A_μ 4-vektor, protože gradient má povahu kovektoru. Kontravariantní $F^{\alpha\beta}$ dostaneme zvednutím indexů - to prohodí znaménka u složek \vec{E} a sníží/zvýší indexy.

$$F^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{E^x}{c} & \frac{E^y}{c} & \frac{E^z}{c} \\ -\frac{E^x}{c} & 0 & B_z & -B_y \\ -\frac{E^y}{c} & -B_z & 0 & B_x \\ -\frac{E^z}{c} & B_y & -B_x & 0 \end{pmatrix}.$$

Maxwellovy rovnice v klasickém tvaru mají nalevo derivace polních veličin \vec{E} a \vec{B} . Ve 4-D případě je tedy rozumné požadovat první derivace $F^{\alpha\beta}$. V první serii je napravo vektor proudové hustoty, takže vezmeme divergenci $F^{\alpha\beta}$ (ta je totiž taky vektor). **1. série**

$$F^{\alpha\beta}_{,\beta} = \mu J^\alpha$$

kde μ je permeabilita vakua. Ověříme, že je to správně

$$F^{0\beta}_{,\beta} = F^{0j}_{,j} = \frac{1}{c} E^j_{,j} = \frac{1}{c} \text{div}\vec{E} \quad (= \mu J^0 = \mu c \rho) \wedge \epsilon \mu c^2 = 1 \Rightarrow \text{div}\vec{D} = \rho,$$

$$F^{i\beta}_{,\beta} = F^{i0}_{,0} + F^{ij}_{,j} = -\frac{1}{c^2} E^i_{,t} + \epsilon^{ijk} B_{k,j} = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial E^i}{\partial t} + (\text{rot}\vec{B})^i \quad (= \mu J^i)$$

$$\wedge \quad \epsilon \mu c^2 = 1 \Rightarrow \text{rot}\vec{H} = \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}.$$

V **2. sérii**, kde zdroje nevystupují, chceme použít opět první derivaci $F^{\alpha\beta}$ a na to nám zbývá gradient. Ten má však $6 \times 4 = 24$ nezávislých složek a to je na získání 4 zbývajících Maxwellových rovnice moc. Naštěstí cyklická permutace dává:

$$F_{[\mu\nu,\rho]\text{cykl}} \equiv F_{\mu\nu,\rho} + F_{\rho\mu,\nu} + F_{\nu\rho,\mu} = A_{\nu,\mu\rho} - A_{\mu,\nu\rho} + A_{\mu,\rho\nu} - A_{\rho,\mu\nu} + A_{\rho,\nu\mu} - A_{\nu,\rho\mu} = 0,$$

a levá část výrazu je antisymetrická ve všech indexech (prostým prohozením dvou indexů je totiž např. $F_{[\rho\nu,\mu]\text{cykl}} = -F_{[\mu\nu,\rho]\text{cykl}}$). Díky této vlastnosti jsou nulové všechny složky, které obsahují dva indexy stejné hodnoty. Zbývají pouze možnosti $\mu\nu\rho = 123, 012, 013, 023$ a jejich permutace, ty ovšem jenom mění znaménko a novou informaci nepřinášejí - máme tedy 4 netriviální rovnice. Ověříme

$$\begin{aligned} 0 &= F_{[12,3]\text{cykl}} = F_{12,3} + F_{31,2} + F_{23,1} = \epsilon_{12i} B^i_{,3} + \epsilon_{31i} B^i_{,2} + \epsilon_{23i} B^i_{,1} = \\ &= B^3_{,3} + B^2_{,2} + B^1_{,1} = \text{div} \vec{B}, \end{aligned}$$

pro získání poslední Maxwellovy rovnice napíšeme nejprve

$$0 = F_{[0j,k]\text{cykl}} = F_{0j,k} + F_{k0,j} + F_{jk,0} = -\frac{1}{c} E_{j,k} + \frac{1}{c} E_{k,j} + \frac{1}{c} \epsilon_{jkl} B^l_{,t},$$

vynásobíme $c\epsilon^{ijk}$ a použijeme $-\epsilon^{ijk} E_{j,k} = \epsilon^{ikj} E_{j,k} = \epsilon^{ijk} E_{k,j}$ spolu s $\epsilon^{ijk} \epsilon_{jkl} = 2\delta^i_l$:

$$0 = \epsilon^{ijk} (E_{k,j} - E_{j,k}) + \epsilon^{ijk} \epsilon_{jkl} B^l_{,t} = 2\epsilon^{ijk} E_{k,j} + 2B^i_{,t} \Rightarrow \text{rot} \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}.$$

Divergencí první sady snadno dostaneme **rovnici kontinuity**, protože $F^{\alpha\beta}$ je antisymetrický tenzor a $F^{\alpha\beta}_{,\beta\alpha} = 0$ (díky antisymetrii provádíme zúžení ve dvou antisymetrických indexech, díky záměnnosti parciálních derivací provádíme zúžení též ve dvou symetrických indexech, to je jako dělat stopu součinu symetrické a antisymetrické matice, což je nula).

$$J^\mu_{,\mu} = J^0_{,0} + J^i_{,i} = 0 \Leftrightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \vec{J} = 0.$$

Divergence je skalární součin gradientu s vektorem, takže je to invariant. Pokud by nebyl invariantní náboj, nebyla by invariantní ani rovnice kontinuity a náboj by mohl vznikat/zanikat.

Tenzor elektromagnetického pole (a tedy i pole samotná) se nezmění, pokud provedeme **kalibrační transformaci** 4-potenciálu $\tilde{A}_\mu = A_\mu + \chi_{,\mu}$, tedy přičteme-li gradient skalární funkce. Často se volí **Lorenzova kalibrační podmínka**

$$A^\beta_{,\beta} = A^0_{,0} + A^i_{,i} = 0 \Leftrightarrow \frac{1}{c^2} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \text{div} \vec{A} = 0.$$

Pokud má transformovaný potenciál splňovat Lorenzovu podmínku ($\tilde{A}^\beta_{,\beta} = 0$), dosazením vpadne

$$\chi^{,\beta}_{,\beta} = \square \chi = -A^\beta_{,\beta}.$$

Čtvereček značí d'Alembertův operátor. Potenciál lze samozřejmě měnit o gradienty χ splňujících $\square \chi = 0$.

Dosadíme-li druhou sadu Maxwellových rovnic do sady první, obdržíme

$$A^{\beta,\alpha}{}_{,\beta} - A^{\alpha,\beta}{}_{,\beta} = \mu J^{\alpha}$$

První člen lze napsat $A^{\beta,\alpha}{}_{,\beta} = A^{\beta}{}_{,\beta}{}^{\alpha} = (A^{\beta}{}_{,\beta})^{\alpha}$, což se vynuluje použitím Lorenzovy kalibrační podmínky. Druhý člen obsahuje d'Alembertův operátor. Dostaneme **vlnovou rovnici**

$$\square A^{\alpha} = -\mu J^{\alpha}.$$

Jelikož je 4-proud 4-vektorem a d'Alembert invariantem (je to skalární součin dvou gradientů, které jsou invariantní), musí být i 4-potenciál 4-vektorem a vybudovaná teorie je správně.

10. Elektrické obvody stacionární, kvazistacionární a střídavé

10.1 Ustálený a neustálený stav

Prvky (součástky) dělíme podle **energetických vlastností** do dvou kategorií:

1. Aktivní prvky: součástky, které mohou být trvalým zdrojem elektrické energie (chemická baterie, elektromagnetický generátor)
2. Pasivní prvky: součástky, které tuto vlastnost nemají (rezistory, vodiče, diody, tranzistory)

Rozdělení elektrických prvků podle **způsobu zapojení** do obvodu:

1. Dvojpóly: jsou prvky, které jsou připojeny do obvodu dvěma svorkami (kondenzátor, cívka, dioda)
2. Čtyřpóly: prvky, zapojené do obvodu čtyřmi svorkami (transformátor, elektronka, tranzistor).

Rozdělení podle způsobu **chování v elektrickém obvodu**

1. lineární: splňují Ohmův zákon: prvky, jejichž parametry nezávisí na protékajícím proudu či přiloženém napětí (rezistor - pozn. elektrický odpor je vlastnost vodiče tj. nezávisí na přiloženém napětí popř. procházejícím proudu)
2. nelineární: nesplňují Ohmův zákon (cívka navinutá na feromagnetické jádro)

Elektrickým obvodem rozumíme vodivé spojení libovolné kombinace jednotlivých stavebních prvků (součástek).

KATEGORIE

Z energetického hlediska

1. Aktivní: takový obvod ve kterém se vyskytuje alespoň jeden aktivní prvek (např. obvod elektrolýzy)
2. Pasivní: obvody sestavené výhradně z pasivních prvků (např. elektromagnetický oscilátor)

Z hlediska chování Ohmova zákona

1. lineární: všechny součástky v obvodu jsou lineární
2. nelineární: obsahuje alespoň jeden prvek (součástku) nelineární

Klasifikace elektrického obvodu podle **časové závislosti** elektromotorického napětí nebo proudu procházejícím obvodem:

1. Stejnoseměrný obvod je takový, ve kterém působí jen zdroje s časově neproměnným elektromotorickým napětím (resp. proudem)
2. Střídavý obvod je takový, ve kterém má zdroj harmonické střídavé elektromotorické napětí (resp. proud) o dané úhlové frekvenci ω

Bezprostředně po zapnutí zdrojů mohou být proudy v jednotlivých prvcích stejnosměrného (střídavého) obvodu časově proměnné (nemusejí být harmonickou funkcí času). V tomto případě říkáme, že obvod je v *neustáleném stavu*. Po uplynutí dostatečně dlouhé doby přejde obvod do *ustáleného stavu*, který je charakterizován časově neproměnnými proudy (harmonickými funkcemi času) v jednotlivých prvcích. Stejnoseměrný obvod v ustáleném stavu je tedy obvodem stacionárním.

Uzel je místo, ve kterém se stýkají více než dva vodiče propojující prvky obvodu. **Větev** je část obvodu propojující dva sousední uzly.

Smyčka obvodu je soustava větví propojených tak, že tvoří uzavřenou křivku.

10.2 Elektrický obvod s rezistorem, cívkou a kapacitou

Dvojpól je nejjednodušší typ stavebního prvku elektrických obvodů. Jeho vlastnosti jsou zcela popsány vzájemnou funkcí mezi proudem a napětím na dvojpólu. Obecně mohou být tyto veličiny časově závislé. Pro lineární dvojpóly platí Ohmův zákon

$$U(t) = RI(t) . \quad (10.1)$$

V diferenciálním tvaru se uvádí jako součin měrné vodivosti γ a elektrické intenzity E

$$j = \gamma E , \quad (10.2)$$

kde j je proudová hustota. Pro nehomogenní vodiče platí Ohmův zákon v zobecněném tvaru

$$j = \gamma(E + E^*) , \quad (10.3)$$

kde E^* je vtištěná elektrická intenzita. Pak můžeme zavést elektromotorické napětí vztahem

$$U_e^{AB} = \int_A^B E^* dl \quad (10.4)$$

10.2.1 Obvod s rezistorem

Nejjednodušším příkladem dvojpólu je rezistor zhotovený z vodiče splňující Ohmův zákon (10.1). Slovní vyjádření Ohmova zákona může znít např. takto: „Napětí mezi konci vodiče je přímo úměrné proudu procházejícímu vodičem“. Odpor rezistoru R nezávisí na procházejícím proudu ani na napětí !!!

V případě skládání odporů rezistorů platí tyto vztahy:

1. sériově zapojené rezistory (za sebou) $R = \sum_i^n R_i$
2. paralelně zapojené (vedle sebe) $\frac{1}{R} = \sum_i^n \frac{1}{R_i}$,

kde R je celkový odpor a R_i jsou dílčí odpory na rezistorech a n je celkový počet rezistorů.

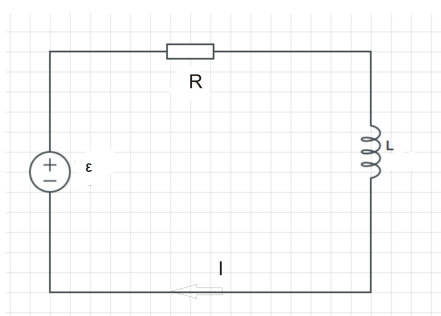
10.2.2 Obvod s cívkou (RL obvod)

Každá cívka je charakterizovaná svojí indukčností L . Okamžitou hodnotu napětí na cívce $U_L(t)$ lze definovat výrazem

$$U_L(t) = L \frac{dI(t)}{dt}, \quad (10.5)$$

kde $I(t)$ je průběh proudu (proud jako funkce času) a t je čas.

Pro případ zapojení rezistoru s cívkou, jako je na obr. 10.1 platí vztahy:



Obrázek 10.1: RL obvod

U_R je napětí na rezistoru, U_L je napětí na cívce a ϵ je celkové napětí v obvodu (elektromotorické).

$$U_R + U_L = \epsilon \quad (10.6)$$

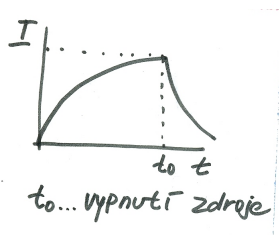
$$IR + L \frac{dI}{dt} = \epsilon \quad (10.7)$$

$$I(t) = \frac{\epsilon}{R} \left(1 - \exp\left(-\frac{R}{L}t\right) \right) \quad (10.8)$$

Po vypnutí zdroje přeskočí jiskra o velikosti proudu

$$I(t) = \frac{\epsilon}{R} \exp\left(-\frac{R}{L}t\right) \quad (10.9)$$

Průběh proud v závislosti na čase je na obr.10.2



Obrázek 10.2: Graf závislost proudu na čase pro RL obvod

10.2.3 Obvod s kapacitou (RC obvod)

Kondenzátor je charakterizován kapacitou C , která je definována

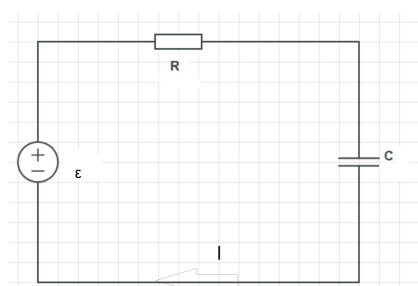
$$C = \frac{Q}{\phi}, \quad (10.10)$$

kde Q je náboj umístěný v místě potenciálu ϕ .

Proud protékající obvodem se samotnou cívku I_C je pak roven

$$I_C = C \frac{dU_c}{dt}, \quad (10.11)$$

kde U_c je napětí přiložené na kapacitě (rozdíl potenciálů na deskách kondenzátoru).



Obrázek 10.3: RC obvod

ϵ značí elektromotorické napětí v obvodu tj. celkové napětí v obvodu, U_C je napětí mezi deskami kondenzátoru a U_R je standardní napětí na rezistoru.

Pro obvod, jako je uveden na obr.10.3 platí rovnice

$$U_R + U_C = \epsilon \quad (10.12)$$

$$IR + \frac{Q(t)}{C} = \epsilon \quad / \frac{d}{dt} \quad (10.13)$$

$$R \frac{dI}{dt} + \frac{I(t)}{C} = \frac{d\epsilon}{dt} \quad (10.14)$$

pro časově nezávislý zdroj $\frac{d\epsilon}{dt} = 0$

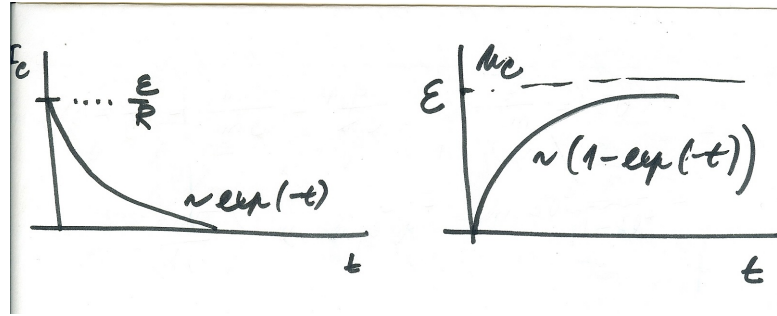
$$R \frac{dI}{dt} + \frac{I(t)}{C} = 0 \quad (10.15)$$

Řešením je vztah

$$I(t) = \frac{\epsilon}{R} \exp\left(-\frac{t}{RC}\right), \quad (10.16)$$

kde se občas výrazu ve jmenovateli exponenciály (RC) říká časová konstanta a značí se τ . Průběh napětí na kondenzátoru je roven

$$U_C = \epsilon - RI(t) = \epsilon \left(-\exp\left(-\frac{t}{RC}\right) \right) \quad (10.17)$$



Obrázek 10.4: Průběh proudu a napětí kondenzátoru

10.2.4 RLC obvody

V nejhorším případě neustáleného elektrického obvodu se řeší rovnice

$$U_R(t) + U_C(t) + U_L(t) = \epsilon(t) \quad (10.18)$$

$$R \frac{dI}{dt} + \frac{I(t)}{C} + L \frac{d^2 I}{dt^2} = \frac{d\epsilon(t)}{dt} \quad (10.19)$$

10.3 Metody řešení elektrických obvodů

Řešíme pomocí Ohmova zákona a Kirchhoffových pravidel. Pro obvody v **ustáleném stavu** existují algoritmy, pomocí kterých lze najít vztahy mezi parametry obvodu a proudem resp. napětím.

Obvody v ustáleném stavu

Přímá aplikace Kirchhoffových pravidel

- obvod má q uzlů a n větví, chceme určit proudy ve všech větvích obvodu
- vybereme $q - 1$ uzlů a napíšeme pro ně $q - 1$ rovnic podle 1. Kirchhoffova zákona
- sestavíme minimální počet větví tak, aby se dalo z každého uzlu přejít do každého
- vybereme smyčku tak, aby každá obsahovala právě jednu větev
- pro tuto smyčku napíšeme $n - q + 1$ nezávislých rovnic podle 2. Kirchhoffova zákona

Metoda smyčkových proudů

Ke každé nezávislé smyčce obvodu se přiřadí jediný tzv. smyčkový proud. Skutečný proud v dané větvi je pak součtem smyčkových proudů těch smyček, jejichž součástí je uvažovaná větev.

algoritmus:

- Vybereme $n - q + 1$ nezávislých smyček a každé se přiřadí smyčkový proud

- proud v jednotlivých větvích je daný součtem smyčkových proud
- smyčkový proud určíme pomocí 2. Kirchhoffova zákona

Metoda uzlových napětí

Na rozdíl od metody smyčkových proudů sestavíme rovnice pro jednotlivé uzly obvodu pomocí 1. Kirchhoffova zákona. Neznámými veličinami jsou napětí jednotlivých uzlech.

algoritmus:

- Každému uzlu přiřadíme uzlové napětí vzhledem k referenčnímu uzlu
- sestavíme rovnice pro jednotlivé uzly pomocí 1. Kirchhoffova zákona
- Vypočítáme uzlové napětí a pomocí nich určíme proudy v jednotlivých vrstvách z Ohmova zákona

Théveninova věta

Používá se v případě, když nás nezajímá řešení celého obvodu, ale především proud tekoucí jeho určitou větví. Pokud ve větvi není zdroj, chová se větev jako pasivní prvek obvodu a zbytek obvodu se chová vůči ní jako zdroj. Pak je užitečné „nahradit“ zbytek obvodu náhradním zdrojem elektromotorického napětí o určité impedanci tohoto zdroje.

Znění: „Proud libovolnou větví obvodu se nezmění, jestliže tuto větev vyjmeme z obvodu a připojíme jí ke zdroji jehož, elektromotorické napětí ϵ_0 je rovno napětí U_0 , které zbude na uzlech po vyjmutí větve, a jehož vnitřní impedance je rovna impedanci daného obvodu mezi těmito uzly po nahrazení všech zdrojů jejich vnitřní impedancemi“

Obvody v neustáleném stavu

Do Kirchhoffových pravidel je nutné dosadit časově proměnné napětí a proudy

$$U_R(t) = RI(t) \quad (10.20)$$

$$U_C(t) = \frac{Q(t)}{C} \quad (10.21)$$

$$U_L(t) = L \frac{dI(t)}{dt} \quad (10.22)$$

a vyřešit tak rovnice 10.19.

10.4 Kirchhoffova pravidla

10.4.1 1. Kirchhoffův zákon

Jedná se o důsledek rovnice kontinuity.

$$\operatorname{div}(j) + \frac{dQ}{dt} = 0 \quad (10.23)$$

ve stacionárním přiblížení má pak rovnice tvar

$$\operatorname{div}(j) = 0 \quad (10.24)$$

Jestliže tedy obklopíme uzel libovolnou uzavřenou plochou S , bude celkový proud vytékající z této plochy zřejmě roven algebraickému součtu proudů tekoucích jednotlivými vodiči. Po využití rovnice kontinuity pro stacionární stav, zřejmě platí

$$\oint_S j \cdot dS = \sum_{i=1}^N I_k = 0 \quad (10.25)$$

„Algebraický součet proudů vtékajícího do uzlu se musí rovnat v každém okamžiku nule“. Konvence je takové, že proud vtékající do uzlu je se znaménkem + a vytékající z uzlu je -.

$$\sum_{i=1}^n I_i = 0 \quad (10.26)$$

10.4.2 2. Kirchhoffův zákon

Důsledek Ohmova zákona pro danou smyčku v obvodu.

„Součet úbytku napětí na všech prvcích ve smyčce je roven celkovému elektromotorickému napětí ϵ působící v smyčce“

$$\sum_{i=1}^m U_i = \epsilon \quad (10.27)$$

10.4.3 Kirchhoffova pravidla v komplexní symbolice

Okamžité hodnoty proudu a napětí v komplexní symbolice jsou dány výrazy:

$$U(t) = \operatorname{Re}\{\bar{U} \exp(i\omega t)\} \quad (10.28)$$

$$I(t) = \operatorname{Re}\{\bar{I} \exp(i\omega t)\} \quad (10.29)$$

Protože výraz $\exp(i\omega t)$ nenese o veličinách $I(t)$ a $U(t)$ žádnou informaci, stačí tedy napětí a proudy reprezentovat jejich komplexními amplitudami.

$$\bar{U} = U_0 \exp(i\phi_U) \quad (10.30)$$

$$\bar{I} = I_0 \exp(i\phi_I) \quad (10.31)$$

kde U_0 a I_0 jsou příslušné amplitudy.

Pro odpor R , indukčnost L a kapacitu C platí tyto vztahy:

$$\bar{Z}_R = R \quad (10.32)$$

$$\bar{Z}_L = i\omega L \quad (10.33)$$

$$\bar{Z}_C = \frac{1}{i\omega C} \quad (10.34)$$

Poměr mezi komplexními amplitudami proudu a napětí můžeme obecně vyjádřit vztahem

$$\bar{U} = \bar{Z}\bar{I} \quad (10.35)$$

, kde \bar{Z} je celková impedance obvodu, která se chová stejně pro sériové a paralelní zapojení jako pro odpory. Tomuto vztahu se také nazývá komplexním vyjádřením Ohmova zákona pro střídavý obvod v ustáleném stavu. Tento vztah umožňuje aplikovat metody řešení stacionárních obvodů také na střídavé obvody v ustáleném stavu.

10.5 Jouleův zákon

Změny vnitřní energie vodičů způsobené průchodem proudu vedou ke zvýšení jejich teploty a k tepelné výměně mezi vodiči a okolím. Takto přenesená energie se nazývá Jouleovo teplo. Tepelný výkon P vznikající ve vodiče protékaného proudem I , na němž je napětí U , je dán vztahem

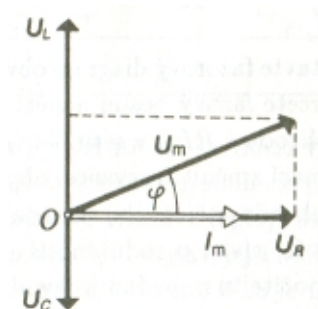
$$P = UI \quad (10.36)$$

hustota výkonu n je pak dána vztahem

$$n = jE \quad (10.37)$$

U střídavých obvodů se nevyužívá celá část výkonu UI . Kolik výkonu se spotřebuje určuje účinník $\cos\Phi$, kde Φ je rozdíl fáze proudu a napětí dle předešlého značení $\Phi = \phi_U - \phi_I$ (na pořadí v rozdílu nezáleží, protože kosinus je sudá funkce).

Mimo komplexní symboliky je vhodnou pomůckou i fázorový diagram, který je mnohdy rychlejší a méně matoucí. Podle potřeby se jedním pevným směrem vynáší velikost proudu (zapojení v sérii), nebo napětí (paralelní zapojení). Druhá veličina se pak vynáší příslušně posunuta a vše se vektorově skládá. Úhel Φ , který se dosazuje do účinníku je pak hezky vidět. Na obrázku je moje $\Phi = \varphi$



Obrázek 10.5: Fázorový diagram

11. - Elektromagnetické vlny

Pojem rovinné a kulové vlny, šíření v neomezeném prostředí. Polarizační vlastnosti rovinné vlny. Dipólové záření. Elektromagnetické vlny v látkách. Rovinná vlna na rozhraní, Fresnelovy vzorce. Elektromagnetická teorie světla. Index lomu, disperze.

11.1 Elektromagnetická teorie světla

Maxwellovy rovnice pro prostředí bez volných proudů a nábojů mají tvar

$$\begin{aligned}\nabla \times \vec{E} + \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} &= 0 \\ \nabla \times \vec{H} - \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} &= 0 \\ \nabla \cdot \vec{D} &= 0 \\ \nabla \cdot \vec{B} &= 0\end{aligned}\quad (1)$$

Jejich řešením jsou funkce $\vec{E}(\vec{r}, t)$, $\vec{H}(\vec{r}, t)$, $\vec{D}(\vec{r}, t)$, $\vec{B}(\vec{r}, t)$, které určují, jak se šíří elektromagnetické vlnění. Pro harmonické vlny je vhodné je zapisovat jako komplexní funkce.

Každé vlnění, které vyhovuje (1), také splňuje i vlnovou rovnici :

$$\Delta \vec{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (2)$$

Dk. pro izotropní prostředí:

$$\begin{aligned}\vec{D} &= \epsilon \vec{E} \\ \vec{B} &= \mu \vec{H}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\nabla \times \vec{E} + \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} &= 0 \\ \nabla \times (\nabla \times \vec{E} + \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}) &= \nabla (\nabla \cdot \vec{E}) - \nabla^2 \vec{E} + \frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \vec{B} = 0\end{aligned}$$

dosadit $\nabla \times \vec{B} = \mu \epsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$

$$\Rightarrow \Delta \vec{E} - \mu \epsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0$$

obdobně

$$\Rightarrow \Delta \vec{B} - \mu \epsilon \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2} = 0$$

$$\mu \epsilon = \frac{1}{c^2} \quad ; \quad \text{ve vakuu} \quad c = 2,9979 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$$

Poyntingův vektor – $\vec{S} = \vec{E} \times \vec{H}$ směr, velikost šíření energie
intenzita $I = \overline{\vec{S}}$ - střední hodnota

pro rovinnou vlnu je $\langle S \rangle = \frac{1}{2\mu_0 c} E_0^2 = \frac{\epsilon_0 c}{2} E_0^2$ (3)

11.2a Rovinná vlna

Důležitým případem elektromagnetických vln jsou **monochromatické vlny**, pro které jsou všechny tři složky elektrického a magnetického pole harmonickými funkcemi času se stejnou frekvencí:

$$\begin{aligned}\vec{E}(\vec{r}, t) &= \vec{E}_0 e^{i\omega t} \\ \vec{H}(\vec{r}, t) &= \vec{H}_0 e^{i\omega t}\end{aligned}$$
 (4)

Tyto vlny lze charakterizovat (až na amplitudu) jedinou hodnotou **úhlové frekvence** ω

$$\omega = kc = \frac{2\pi c}{\lambda} = 2\pi f$$
 (5)

Nejjednodušší případ řešení vlnové rovnice pro případ neomezeného homogenního a izotropního prostředí je rovinná vlna. Obecnou funkci prostoru a času popisující rovinnou vlnu se dá napsat jako

$$f(\vec{r}, t) = f\left(t \mp \frac{\vec{s} \cdot \vec{r}}{c}\right)$$
 (6)

Fáze této vlny je konstantní v bodech roviny $\vec{s} \cdot \vec{r} = konst$, tyto roviny kolmé na směr šíření nazýváme vlnoplochami.

Pro monochromatickou rovinnou vlnu:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$$
 (7)

můžeme zpětně dosadit do (1), a protože tyto rovnice svazují vektory \vec{E} a \vec{H} , dostaneme pro \vec{H} :

$$\vec{H} = \vec{H}_0 e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad \text{kde} \quad \vec{H}_0 = \frac{\vec{k} \times \vec{E}_0}{\mu \omega}$$
 (8)

obdobně $\vec{E}_0 \sim \vec{k} \times \vec{H}_0$, takže vektory $\{\vec{E}, \vec{H}, \vec{s}\}$ tvoří **pravotočivý ortogonální systém**.

Neexistuje zdroj monochromatické rovinné vlny (má zdroj v nekonečnu), a vektor \vec{k} je konstantní v celém prostoru.

11.2b Polarizace rovinné vlny

Vzhledem k tomu, že vektor \vec{E} kmitá v rovině kolmé na směr šíření, je rovinná vlna obecně **elipticky polarizovaná**. Je-li fázový rozdíl složek 0 nebo π , elipsa se degeneruje na přímku a jedná se o **lineárně polarizované** světlo. Pro fázový rozdíl $\frac{\pm\pi}{2}$ se naopak elipsa změní na kružnici, jedná se o světlo **kruhově polarizované**.

11.3 Kulová vlna

Jiné řešení vlnové rovnice dostaneme, když požadujeme sférickou symetrii, tj.

$$f(\vec{r}, t) = f(|\vec{r}|, t) \quad (9)$$

Můžeme přepsat operátor Laplace do sférických souřadnic:

$$\Delta f = f'' + \frac{2}{r} f' \quad (10)$$

řešení má tvar

$$f(\vec{r}, t) = \frac{f_1(t \mp \frac{r}{c})}{r} \quad (11)$$

Pro znaménko mínus se jedná o divergentní vlnu, znaménko plus odpovídá konvergentní vlně. Zdroj divergentní vlny je v místě $r=0$.

Příklad : harmonická kulová vlna-

$$f(r, t) = \frac{A}{r} \exp[-i(\omega t \pm \vec{k} \cdot \vec{r})] \quad (12)$$

Fáze je konstantní pro $r = konst$, vlnoplochy jsou tedy kulové plochy. Amplituda vlny klesá s první mocninou vzdálenosti, intenzita s druhou.

Zdroj divergentní vlny je v místě $r=0$, a vektor \vec{k} není konstantní.

11.4 Dipólové záření

Nejjednodušší elektrický dipól je dvojice kladného a záporného náboje se stejnou velikostí. Vzdálenost mezi náboji považujeme za nekonečně malou.

Elektrostatický potenciál dipólu v místě \vec{r} je:

$$\Phi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{p} \cdot \hat{r}}{r^2} \quad (13)$$

kde \vec{p} je dipólový moment, \hat{r} je jednotkový vektor ve směru \vec{r} , ϵ_0 je permitivita.

Jeho elektrické pole je

$$\vec{E} = -\nabla\Phi = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{3(\vec{p} \cdot \hat{r})\hat{r} - \vec{p}}{r^3} \right) - \frac{1}{3\epsilon_0} \vec{p} \delta^3(r) \quad (14)$$

Harmonicky se oscilující dipól s momentem

$$\vec{p} = \vec{p}'(\vec{r}) e^{-i\omega t} \quad (15)$$

generuje elektrické a magnetické pole

$$\vec{E} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{\omega^2}{c^2 r} (\hat{r} \times \vec{p}) \times \hat{r} + \left(\frac{1}{r^3} - \frac{i\omega}{c r^2} [3\hat{r}(\hat{r} \cdot \vec{p}) - \vec{p}] \right) \right) e^{\frac{i\omega r}{c}} \quad (16)$$

$$\vec{B} = \frac{\omega^2}{4\pi\epsilon_0 c^3} \hat{r} \times \vec{p} \left(1 - \frac{c}{i\omega r}\right) \frac{e^{\frac{i\omega r}{c}}}{r} \quad (17)$$

Pro limitu velkých vzdáleností ($r\omega \gg c$) dipólové záření má tvar kulové vlny:

$$\vec{B} = \frac{\omega^2}{4\pi\epsilon_0 c^3} (\hat{r} \times \vec{p}) \frac{e^{\frac{i\omega r}{c}}}{r} \quad (18)$$

$$\vec{E} = c \vec{B} \times \hat{r} \quad (19)$$

Dielektrická hypotéza – neutrální dielektrikum se dá popsat jako soubor dipólů - > věci jako polarizace (\vec{P}), ...

Dipólová anténa – nevím jestli to chtějí, a když ano, co je důležité -

https://cs.wikipedia.org/wiki/Dip%C3%B3lov%C3%A1_ant%C3%A9na

https://en.wikipedia.org/wiki/Dipole_antenna

11.5 Elektromagnetické vlny v látkách, index lomu

pomůcka-

Elektrická polarizace – \vec{P} - reprezentovaná vázanými náboji

Elektrická indukce – \vec{D}

Elektrická intenzita - \vec{E}

Magnetizace – \vec{M} - reprezentovaná vázanými proudy

Magnetická indukce – \vec{B}

Intenzita magnetického pole – \vec{H}

$$\vec{D} := \epsilon \vec{E} + \vec{P} \quad (20)$$

$$\vec{H} := \frac{\vec{B}}{\mu} - \vec{M} \quad (21)$$

Pokud použijeme MR a dosadíme materiálové vztahy pro nemagnetické prostředí, dostaneme rovnici:

$$\Delta \vec{E} - \mu \epsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} - \mu \frac{\partial^2 \vec{P}}{\partial t^2} - \mu \sigma \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = 0 \quad (22)$$

Poslední dva členy nazýváme zdrojové. Předposlední člen je zodpovědný za disperzi, absorpci, dvojlom a polarizaci v dielektriku, poslední za vysokou absorpci a odrazivost kovů. Uvažujeme-li pouze první dva členy rovnice (homogenní neabsorbující prostředí), dostaneme vlnovou rovnici.

Různá prostředí můžeme charakterizovat materiálovými vztahy.

Nejjednodušším prostředím je izotropní bezztrátové dielektrikum, charakterizované permitivitou

$\epsilon = \epsilon_r \epsilon_0$ a permeabilitou $\mu = \mu_r \mu_0$. Takové prostředí charakterizujeme konstantním

indexem lomu :

$$n = \frac{c_{\text{vakuum}}}{c_{\text{prostředí}}} = \sqrt{\frac{\mu_r \epsilon_r}{\mu_0 \epsilon_0}} \quad (23)$$

Je-li prostředí nehomogenní, ale rozměry nehomogenit jsou velké ve srovnání s vlnovou délkou, lze

pro popis použít index lomu, ale je závislý na poloze. Pro elektrickou intenzitu můžeme použít vlnovou rovnici s konstantou c závislou na poloze.

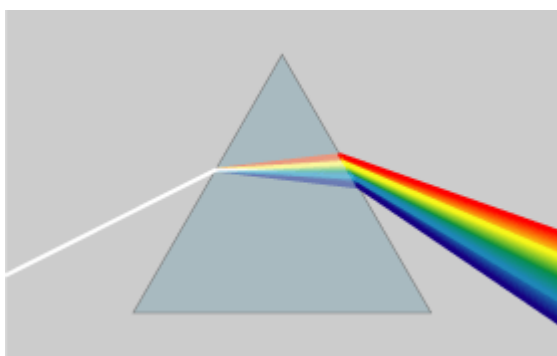
Dalším příkladem prostředí je ztrátové dielektrikum (počítáme vlnovou rovnici + ztrátový člen, ale prostředí je nevodivé). Takové prostředí lze dobře popsat komplexním vlnovým číslem $k = k_r + i\alpha$. Rovinná vlna v takovém prostředí směrem z je popsána

$$\vec{E} \sim e^{ikz} = e^{-\alpha z} e^{ik_r z} \quad (24)$$

Intenzita vlny exponenciálně klesá s **koeficientem absorpce** 2α . Pro některé látky může být záporný, ty potom vlnění při průchodu zesilují. Zavádí se i komplexní index lomu:

$$n_{\text{compl}} = \frac{c}{\omega} k = n + i\kappa \quad (25)$$

11.6 Disperze



Disperze je jev, kdy fázová rychlost světla (a tím i index lomu) je závislá na frekvenci. Nejjednodušší případ je prizma (materiálová disperze); závislost na frekvenci způsobuje, že v bílém světle různé vlnové délky (barvy na hranici prostředí lámou pod jiným úhlem, $\rightarrow \theta_i$ je funkce frekvence světla.

Disperze je odpovědná též za vznik duh a také za degradaci signálu v optických vláknech (vlnovodná disperze).

11.7 Rovinná vlna na rozhraní, Fresnelovy vzorce

Pokud rovinná vlna dopadne na rovinné rozhraní dvou prostředí o indexech lomu n_1 a n_2 , dělí se na vlnu odraženou (r) a prošlou (t). Z podmínky na rovnost fází na rozhraní (zvolme xz za rovinu dopadu)

$$\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r} = \omega_r t - \vec{k}_r \cdot \vec{r} = \omega_t - \vec{k}_t \cdot \vec{r} \quad (26)$$

zjistíme, že frekvence odražené a lomené vlny se nemění (rovnice platí pro $\vec{r}=0$), a že odražená i lomená vlna zůstávají v rovině dopadu (rovnice platí pro $t=0$).

Pro odraženou vlnu platí

$$k_x = k \sin \theta = \frac{\omega}{c_0} n_1 \sin \theta = k_{rx} = \frac{\omega}{c_0} n_1 \sin \theta_r \Rightarrow \theta = \theta_r \quad (27)$$

Obdobně pro lomenou vlnu (tzv. Snellův zákon lomu)

$$k_x = \frac{\omega}{c_0} n_1 \sin \theta = k_{tx} = \frac{\omega}{c_0} n_2 \sin \theta \Rightarrow n_1 \sin \theta = n_2 \sin \theta_t \quad (28)$$

Napišeme-li rovnice pro spojitost tečných složek pro amplitudy (argumenty exponenciál jsou stejné) pro případ transverzálně elektrické vlny (elektrické vektory kolmé k rovině dopadu) a transverzálně magnetické vlny (elektrické vektory v rovině dopadu) v takové soustavě souřadné, ve které mají při $\theta \rightarrow 0$ vektory \vec{E} stejný směr, a použijeme-li zákon odrazu a lomu, dostaneme poměry amplitud dopadající a odražené resp. prošlé vlny pro kolmou a rovnoběžnou polarizaci (**Fresnelovy vzorce**):

$$r_{kolmy} = \frac{E_r^{kolmy}}{E^{kolmy}} = \frac{n_2 \cos \theta - n_1 \cos \theta_t}{n_1 \cos \theta + n_2 \cos \theta_t}$$

$$r_{paral} = \frac{E_r^{paral}}{E^{paral}} = \frac{n_1 \cos \theta - n_2 \cos \theta_t}{n_1 \cos \theta + n_2 \cos \theta_t} \quad (29)$$

$$t_{kolmy} = \frac{E_t^{kolmy}}{E^{kolmy}} = \frac{2 n_1 \cos \theta}{n_1 \cos \theta_t + n_2 \cos \theta}$$

$$t_{paral} = \frac{E_t^{paral}}{E^{paral}} = \frac{2 n_1 \cos \theta}{n_1 \cos \theta + n_2 \cos \theta_t}$$

Protože měříme výkony, zavádí se veličiny **odrazivost** a **propustnost** jako

$$R = r^2 \quad \text{resp} \quad T = t^2 \quad .$$

Můžeme se přesvědčit, že platí zákon zachování energie $R + T = 1$.

Při kolmém dopadu se Fresnelovy vzorce zjednoduší (nerozlišujeme kolmá a rovnoběžná elektrická pole):

$$r = \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2}$$

$$t = \frac{2 n_1}{n_1 + n_2} \quad (30)$$

U koeficientů r_{paral} se může čitatel rovnat nule. Pokud vlna dopadá pod Brewsterovým úhlem, při odrazu rovnoběžná polarizace vymizí :

$$\theta_B = \arctan \frac{n_2}{n_1} \quad .$$

Při odrazu od opticky hustšího prostředí se fáze vlny polarizované kolmo na rovinu dopadu mění o π .

Při dopadu světla na opticky řidší prostředí existuje mezní úhel θ_m , při němž paprsek probíhá rovnoběžně s rozhraním. Pro větší úhly se světlo s plnou intenzitou odráží do původního prostředí ($R_{kolmy} = R_{paral} = 1$). I když do druhého prostředí neproudí žádná energie, je v blízkosti rozhraní zjištělné světlo i v druhém prostředí. Pokud si sinu a kosinu úhlů pro prošlou vlnu formálně napíšeme jako ryze komplexní čísla, dostaneme exponenciálně tlumenou vlnu, šířící se podél

rozhraní. Energie se pak vrací do původního prostředí.

12. Optika

V této části optiky nepůjde o žádné složité odvozování věcí z Maxwellových rovnic, ale spíše o praktické pojetí optiky. Čerpal jsem sem tam z *wiki*, něco málo ze sešitů, ale převážně z *Malého*. Citace z něj jsem zde neuváděl, jelikož je zde jediná, která začíná na dalším řádku a končí asi o 14 stránek dál.¹

MALÝ, Petr. *Optika*.

Univerzita Karlova v Praze, Nakladatelství Karolinum, 2008.

ISBN 978-80-246-1342-0

by vovo

12.1 Interferenční a ohybové jevy

Světlo, jak známo, je elektromagnetická vlna, pro kterou platí *princip superpozice*, tedy jsou-li dvě světelná pole řešením daných rovnic, pak je řešením určitě i jejich součet. Platí něco na způsob

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_1(\mathbf{r}, t) + \mathbf{E}_2(\mathbf{r}, t). \quad (12.1)$$

Okem a detektory však nezaznamenáváme elektrickou intenzitu světla, ale intenzitu danou výrazem

$$I(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{S}(\mathbf{r}, t) \rangle = \frac{1}{Z} \langle \mathbf{E}^2(\mathbf{r}, t) \rangle, \quad (12.2)$$

kde \mathbf{S} je Poyntingův vektor, $Z = \sqrt{\mu_0/\varepsilon_0}$ je impedance vakua. Obecně však výsledná intenzita nemusí být rovna součtu výsledných intenzit od obou vln $I \neq I_1 + I_2$. Někde je ve výsledku intenzita vyšší než součet, jinde je nulová. Jevy, v nichž skládání dvou nebo více polí vede k prostorové modulaci intenzity výsledného pole, se nazývají *interferenčními jevy*. Z teoretického hlediska je interference pouze správné sčítání vektorů elektrické intenzity a pak výpočet intenzity světla.

V historii se interference považovala za přímý důkaz vlnové povahy světla. K historii se taky váže například slavný Youngův experiment (1802). Toho se dá ale třeba i dnes využít ke zjištění koherenčních vlastností světla (o tom ale až dál).

Nastiňme si alespoň částečně **interferenci dvou svazků**: Rovinnou monochromatickou vlnu popíšeme zhruba následovně

$$\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, t) = \tilde{\mathbf{E}}_{0j} e^{-i\omega t}, \quad (12.3)$$

kde $\tilde{\mathbf{E}}_{0j}$ je označení pro komplexní amplitudy ($j = 1, 2$)

$$\tilde{\mathbf{E}}_{01}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_{01} e^{i(-\phi_1 + \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r})} = \mathbf{E}_{01} e^{i\Phi_1(\mathbf{r})} \quad (12.4a)$$

$$\tilde{\mathbf{E}}_{02}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_{02} e^{i(-\phi_2 + \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r})} = \mathbf{E}_{02} e^{i\Phi_2(\mathbf{r})}. \quad (12.4b)$$

Pro jednoduchost budeme dále uvažovat vztah pro intenzitu v podobě (u interference nás zajímá především relativní velikost, než přesná)

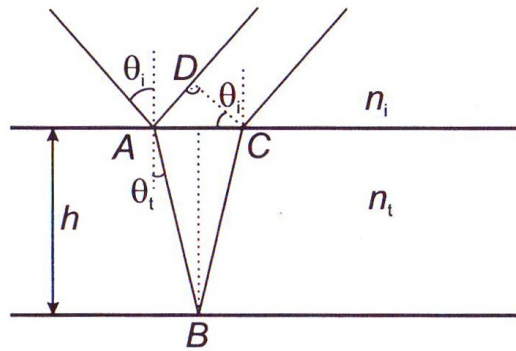
¹Snad nebudou problémy s copyrightem, až tato skripta půjdou v Karolinu do tisku.

$$I(\mathbf{r}) = \tilde{\mathbf{E}}_0(\mathbf{r}) \cdot \tilde{\mathbf{E}}_0^*(\mathbf{r}). \quad (12.5)$$

Dle vzorce (12.1) sečteme pole (12.4) a zjistíme intenzitu (12.5):

$$\begin{aligned} I(\mathbf{r}) &= I_1 + I_2 + 2\text{Re}(\tilde{\mathbf{E}}_{01}(\mathbf{r}) \cdot \tilde{\mathbf{E}}_{02}^*(\mathbf{r})) \\ &= I_1 + I_2 + 2\mathbf{E}_{01} \cdot \mathbf{E}_{02} \cos(\Phi_2 - \Phi_1). \end{aligned} \quad (12.6)$$

Poslední člen v této rovnici se nazývá *interferenční* a je zodpovědný za zmíněné zvláštní jevy (větší, či menší intenzita, než součet). Jak jde tedy vidět, vše závisí pouze na rozdílu fází $\Phi_2 - \Phi_1$. Tuto hodnotu určíme z geometrie obrázků (třeba Youngův pokus,...).



Obrázek 12.1: Výpočet fázového rozdílu dvou svazků interferujících při odrazu na planparalelní desce (film)

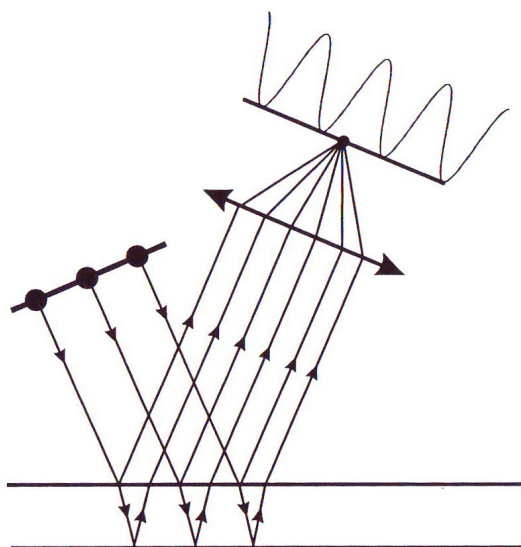
Celkem důležitá je také **Interference na dielektrických vrstvách** (například pro antireflexní vrstvy). Pro pozorování interference je nutné, aby vrstva byla tenká a její tloušťka příliš nepřesahovala vlnovou délku světla. Budeme-li chtít například zjistit reflexi od vrstvy (obrázek 12.1), je nutné zpočítat fázový rozdíl obou odražených svazků - to se provede pomocí optických drah (součin reálné, geometrické dráhy a indexu lomu). Změna fáze světla po uražení dráhy z v prostředí o indexu lomu n se změní fáze o

$$\delta = k_0 n z = k_0 z_{AB}, \quad (12.7)$$

kde k_0 je velikost vlnového vektoru ve vakuu, z_{AB} je optická dráha od A do B (obecně, rovnice se neváže k obrázku). Z geometrie dostaneme ve výsledku rozdíl optických drah závislý na $\cos \Theta_t$ a odtud pomocí (12.7) fázový posun (který bude mimo jiné záviset tedy na Θ_t - tedy pro různé úhly dopadu dostaneme různou odraženou intenzitu světla). Je zde taky nutné dbát na možnost fázového posunu při změně fáze na opticky hustším rozhraní. Podmínka pro maximum, resp. minimum, je $\delta = \delta_1 + \delta_2 = 2n\pi$, resp. $(2n + 1)\pi$.

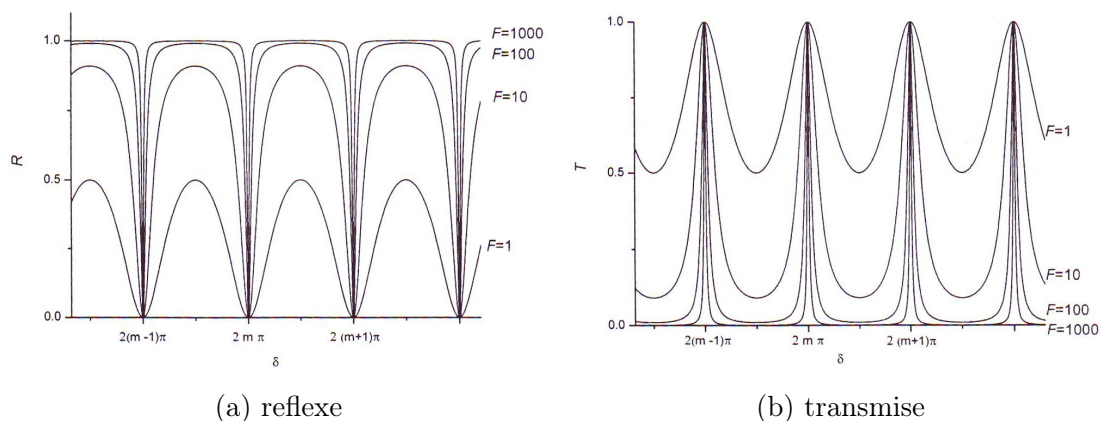
Proužky stejného sklonu, nebo též *Haidingerovy kroužky*, (dle geometrie uspořádání) vzniknou na stínítku při uspořádání jak je na obrázku 12.2. Jedná se o to, že ačkoli interference závisí na úhlu dopadu, pak, uvažujeme-li plošný zdroj světla, vybereme čočkou pouze ty paprsky, které dopadly pod stejným úhlem světla a každé dva mají stejný fázový rozdíl. Výsledkem je vysoce kontrastní interferenční obrazec.

Proužky stejné tloušťky pozorujeme například na olejových skrvnách. Vznik je například na klínovém filmu, pomocí nich se dá také určovat dokonalost čoček.



Obrázek 12.2: Interference světla na planparalelním filmu - plošný zdroj světla

Zmiňme ještě **mnohosvazkovou interferenci**, kterou je nutno použít například při výpočtu transmise u planparalelní desky. Případ je stejný, jako na obrázku 12.1, tentokrát však uvažujeme, že při odrazu v bodu B část světla projde na druhou stranu, z bodu C se část světla zase odrazí zpět do vrstvy, ... Nejedná se o nic složitějšího, pouze musíme sečíst nekonečnou řadu Fresnelových vzorců. Dostaneme tzv. *Airyho funkci* (obr. 12.3) - užití při Fabry-Perotově interferometru (kapitola 12.3).



Obrázek 12.3: Airyho funkce pro reflexi a transmissi. F roste s rostoucím indexem lomu vrstvy, δ je fázový rozdíl mezi paprsky.

Ohyb, nebo-li **difrakce** světla zabývá se ohybem a zahýbáním světla za překážkami. Co k tomu říct? Snad je *Huygens*, více v kapitole 12.4.

12.2 Koherence světla

Obecně lze říci, že světlo je koherentní, pokud dobře interferuje. Představme si například sinusovou vlnu, při které vždy po nějakém čase (průměrně po koherenční

době τ_0) dojde k náhodně velkému skoku ve fázi. Jednotlivé části sinusovky budou mít zhruba délku:

$$l_c = c\tau_0 \approx \frac{c}{\Delta\nu}, \quad (12.8)$$

kde $\Delta\nu$ je spektrální šířka.

Tato délka je důležitá například v holografii - chceme-li vytvořit hologram předmětu velikého 1cm, pak potřebujeme světlo s koherenční délkou alespoň 1cm, spíš větší. Proto se k hologramům často používají lasery, které mají dobré koherenční vlastnosti a koherenční délku třeba až stovky metrů.

Předpokládejme dva svazky vycházející z jednoho bodu letící po různých drahách do druhého bodu, kde interferují. Výsledná intenzita je tam

$$E(t) = E_1(t - \tau_1) + E_2(t - \tau_2) \rightarrow E_1(t) + E_2(t + \tau). \quad (12.9)$$

kde $\tau_{1,2}$ jsou časová zpoždění, která vzniknou při průletu drahami ($E_1(t)$ je pole v počátečním bodě, $E_1(t - \tau_1)$ je v koncovém). Nás bude zajímat ale jen rozdíl, tedy τ . Analogicky jako v předchozí kapitole (rovnice (12.6)) dostaneme intenzitu

$$I = I_1 + I_2 + 2\text{Re} \langle E_1(t)E_2^*(t + \tau) \rangle. \quad (12.10)$$

Špičatá závorka značí středování přes čas. Pomocí posledního členu se definuje *časová korelační funkce* Γ .

$$\Gamma_{12}(\tau) = \langle E_1(t)E_2^*(t + \tau) \rangle. \quad (12.11)$$

Dále se definuje také *komplexní stupeň koherence*

$$\gamma_{12}(\tau) = \frac{\Gamma_{12}(\tau)}{\sqrt{I_1 I_2}}, \quad (12.12)$$

který je díky podělení intenzit normovaný do intervalu $\langle 0, 1 \rangle$, přičemž $\gamma_{12} = 0$ značí nekoherentní světlo, $\gamma_{12} = 1$ značí naprosto koherentní světlo. Stupeň koherence je důležitou vlastností laserů a dalších světelných zdrojů. Dá se měřit například pomocí Michelsonova interferometru, nebo i Youngovým pokusem. Viditelnost interferenčních proužků je přitom přímo rovna $|\gamma_{12}|$. Pro nekoherentní světlo tedy neuvídíme žádné interferenční proužky.²

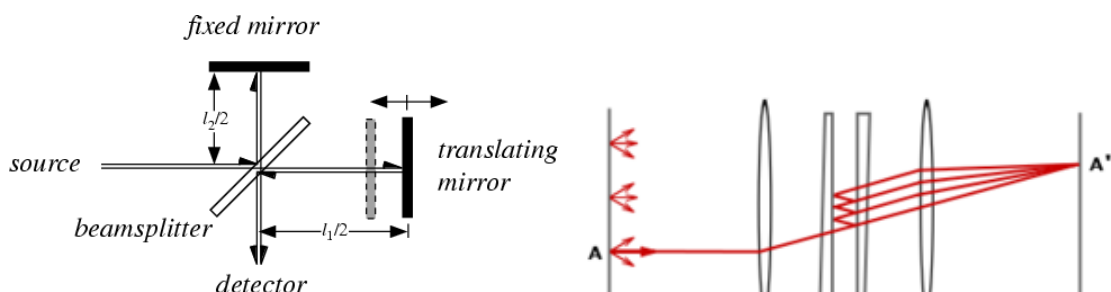
Špatně koherentním zdrojem je například žárovka s wolframovým vláknem. Dejme tomu, že se v čase nula nabudí jeden atom a vyšle tlumený kosinový puls trvající dobu τ_i , někdy během toho, nebo i poté, jiný nabuzený atom vyzáří další takový puls. Střední doba mezi těmito pulsy je zmiňované τ_0 - v tomto případě pekelně malé.

Je dobré si uvědomit, že nelze mluvit o tom, zda-li světlo je, nebo není koherentní. Musíme vždy uvést ve vztahu k jakému přístroji. Sluneční světlo má například koherenční délku cca 800nm a pro Michelsonův interferometr (kap. 12.3), ve kterém bude rozdíl dráhy paprsků menší než koherenční délka, bude světlo koherentní - bude interferovat. Pokud bude délka větší, pak se nám budou

²Což není špatné při klasickém osvětlení - při zapnutí druhé žárovky bychom někde dostali maximum a jinde minimum, což by některé studenty v lavicích jistě nepotěšilo.

skládat dvě náhodná světla a žádné interferenční proužky nevidíme.

12.3 Optické interferometry



(a) Schéma Michelsonova interferometru (b) Schéma Fabry-Perotova interferometru

Interferometr je zařízení, které studuje vlastnosti světla na základě jeho interference.

Snad nejznámější je **Michelsonův interferometr** zkonstruovaný roku 1881. Pomocí něj byla také dokázána stejná rychlost světla nezávisle na směru šíření zdroje. Příkladem obrázek s jeho uspořádáním (obr. 12.4a). Světlo ze zdroje se dělí na dva svazky, ty jdou každý k jinému zrcadlu, pak opět zpět a na stínítku interferují. Jedno zrcadlo je posuvné, čímž je možné měnit optickou dráhu jednoho z paprsků a tím fázové zpoždění.

Fabry-Perotův interferometr je tvořen dvojicí planparalelních zrcadel. Jednoduché uspořádání je na obrázku 12.4b. Světlo dopadá mezi dvě zrcadla, vzniká mnohosvazková interference, na stínítku dostaneme interferenční kruhy odpovídající Airyho funkci (obr. 12.3). Pro světlo obsahující dvě vlnové délky dostáváme dvě soustavy interferenčních kruhů, které se při přibližování vlnových délek slijí dohromady. Rozlišení je dáno tím, pro jak blízké vlnové délky je ještě možné rozlišit dvě soustavy interferenčních kruhů.

12.4 Fresnelův a Fraunhoferův ohyb

Difrakci lze považovat za důkaz vlnové podstaty světla (*Huygensův princip*), způsobuje například rozbíhavost laserových svazků, ovlivňuje kvalitu obrazu v optických přístrojích.

Huygens (17. stol.) říká, že každý bod vlnoplochy je zdrojem sekundární kulové vlny, vlnoplocha je dána obálkou sekundárních vlnek.

Fresnel (19. stol.) dodává, že sekundární vlnky interferují a skládají se tedy s příslušným fázovým rozdílem.

Fresnelova a *Fraunhoferova* difrakce jsou pouze dvě aproximace *Kirchhoff-Fresnelova integrálu* (naprosto zbytečné psát). Jde o to, že u difrakce se řeší Maxwellovy rovnice s okrajovými a počátečními podmínkami, což se provede za různých přiblížení. Je zde jeden obvyklý typ okrajové podmínky (*Kirchhoffova okrajová podmínka*), který vede právě na zmiňovaný integrál.

Fraunhoferova difrakce popisuje jev, když na aperturu dopadne rovinná vlna a my pak sledujeme difrakční obrazec v nekonečné vzdálenosti (lze přiblížit čočkou). Interferenční obrazec vůbec nepřipomíná tvar překážky.

Při vyšetřování difrakce na štěrbině je postup analogický, jak v kapitole 12.1, ale na stínítku musíme počítat příspěvky nikoli od dvou paprsků, ale od všech, které ze štěrbin vychází. Suma tedy přejde v integrál. Musíme taky uvážit rozdílný pokles amplitudy od různých zdrojů. Pro názornost, dostaneme něco na způsob

$$E_P = \int_{-a/2}^{a/2} \frac{E_0}{r_0 + \Delta(s)} e^{-i(\omega t - k(r_0 + \Delta(s)))} ds, \quad (12.13)$$

kde E_0 je amplituda, r_0 vzdálenost k danému bodu na stínítku, $\Delta(s)$ vzdálenost pro různé zdroje.

Analogicky difrakce na obdélníkovém, kruhovém otvoru, na řadě štěrbin. Pro difrakci na řadě štěrbin dostaneme

$$a \sin \Theta = \lambda m, \quad (12.14)$$

kde Θ je uhel mezi kolmicí na stínítko a úsečkou spojující střed apertury s daným bodem na stínítku, a je perioda štěrbin. Rovnice tedy určuje směry, ve kterých dostáváme m -té maximum (nulté triviálně pro $\Theta = 0$). Rovnice (12.14) je známá pod jménem *mřížková rovnice*.

Fresnelova difrakce je odlišná v tom, že interferenční obrazec pozorujeme v malé vzdálenosti za překážkou a navíc uvažujeme dopad kulové vlnoplochy, namísto rovinné vlny (tímto se výpočet značně ztíží). Rozložení světla tedy připomíná tvar překážky, má však dodatečné proužky a modulované rozložení intenzity. Opět pro názornost

$$E_P = \int_{\text{apertura}} \frac{1}{\mathbf{r}\mathbf{r}'} e^{ik(\mathbf{r}+\mathbf{r}')} dS, \quad (12.15)$$

kde \mathbf{r} je vektor jdoucí z nějakého bodu (plošky) apertury do koncového bodu na stínítku a \mathbf{r}' je vektor jdoucí ze zdroje do bodu v apertuře.

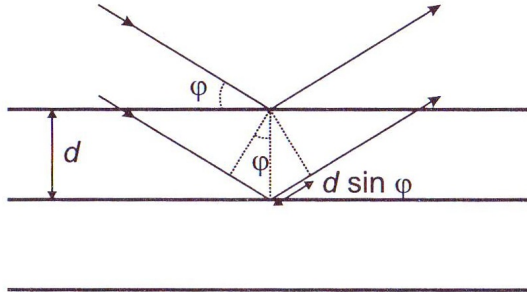
12.5 Braggova rovnice

Prostorová perioda krystalů je řádově 10^{-10}m , k difrakci nelze tedy použít viditelné světlo, ale rentgenové záření. Rentgenová difrakce se používá ke studiu struktury kondenzovaných látek. Při kolmém dopadu na mřížku nastávají maxima pod úhly, které jsou dány rovnicí (12.14). Budeme-li uvažovat mřížku s periodami a_1 , a_2 a a_3 (tedy obecnou obdélníkovou) dostaneme v analogii s (12.14) *Laueho rovnice*:

$$a_1(\cos \alpha_0 - \cos \alpha) = m_1 \lambda \quad (12.16a)$$

$$a_1(\cos \beta_0 - \cos \beta) = m_2 \lambda \quad (12.16b)$$

$$a_1(\cos \gamma_0 - \cos \gamma) = m_3 \lambda, \quad (12.16c)$$



Obrázek 12.4: Braggova difrakční podmínka (12.17)

kde směr difrakčních maxim je dán jednotkovým vektorem $(\cos \alpha, \cos \beta, \cos \gamma)$ pro obecný směr dopadu $(\cos \alpha_0, \cos \beta_0, \cos \gamma_0)$. Čísla m_1, m_2 a m_3 jsou řády maxim pro různé směry. Oproti rovnici (12.14) je v (12.16) kosinus pouze díky jiné definici úhlu. Lze ukázat, že tyto podmínky odpovídají představě, že maxima difrakce vznikají ve směrech daných zrcadlovým odrazem dopadajícího vlnění od krystalických rovin. Tato podmínka se nazývá *Braggova podmínka* (obr. 12.4):

$$2d_{hkl} \sin \varphi = m\lambda, \quad (12.17)$$

kde je vše v obrázku 12.4 a h, k, l je označení krystalické roviny, m je řád maxima.

12.6 Základy holografie

Při zaznamenání scény na film se ztrácí vnímání hloubky a perspektivy - dostáváme pouze 2D obrázek. Při pozorování hologramu je však původní vlna rekonstruována a pozorovatel při pohledu na hologram vidí totéž, co by viděl, kdyby pozoroval scénu oknem hologramu. Nakláněním hlavy můžeme například nahlédnout na roh předmětu.

V holografii se využívá interference koherentního světla. Světelná vlna nesoucí informaci o scéně se nechá interferovat s koherentní referenční vlnou a interferenční obrazec nese informaci o relativní fázi zaznamenávané vlny vůči vlně referenční. Zkrátka nosná vlna je modulována vlnou signální.

To, jaké světlo potřebujeme k rekonstrukci hologramu závisí na typu jeho výroby. K rekonstrukci *reflexního hologramu*, který vznikne tak, že reflexní a signální vlna jdou z různých stran hologramu (zjednodušené), lze použít i obyčejné bílé světlo (například kreditky).

12.7 Šíření světla v anizotropním prostředí, dvojlom

Vlastnosti neizotropních materiálů závisí na směru šíření světla i na jeho polarizaci. Takovou vlastností může být třeba různý index lomu - látka pak vykazuje

dvojlom (vápenec). Příímka, která odpovídá směru šíření světla, v němž nezávisí index lomu na polarizaci se nazývá *optická osa*. Látky mohou být např. *opticky jednoosé* (jedna optická osa), *dvouosé* (dvě optické osy) a *izotropní* (index lomu nezávisí na polarizaci v libovolném směru).

Tenzor permitivity (3x3) je symetrický, dá se znázornit jako elipsoid, ve vhodné bázi se diagonalizuje a k popisu pak stačí pouze 3 složky ε_x , ε_y a ε_z . Pro izotropní látky platí $\varepsilon_x = \varepsilon_y = \varepsilon_z$ (tedy stejné vlastnosti pro všechny směry).

Řešení Maxwellových rovnic s různou permitivitou vede k *Fresnelově rovnici*³, která spojuje index lomu n s nímž se šíří rovinná vlna, jejíž vlnový vektor má směr \mathbf{s} . Řešení této rovnice vede k zavedení *ordinárního* (*řádného*) (řídí se Snellovým zákonem) a *extraordinárního* (*mimořádného*) indexu lomu. Ordinární index lomu je nezávislý na směru šíření, extraordinární ano. Vlna se tedy rozdělí na řádnou a mimořádnou (které mají navzájem kolmé směry lineární polarizace). K určení indexů lomu a polarizačních směrů je užitečné si zavést *optickou indikatrix*. Je to elipsoid (rotační pro jednoosý krystal, kde $\varepsilon_x = \varepsilon_y \neq \varepsilon_z$, koule pro izotropní materiál) daný rovnicí

$$\frac{X^2}{\varepsilon_1} + \frac{Y^2}{\varepsilon_2} + \frac{Z^2}{\varepsilon_3} = 1. \quad (12.18)$$

Nakresleme si elipsoid a směr šíření vlny \mathbf{s} . Dále sestrojme rovinu kolmou ke směru \mathbf{s} (procházející počátkem, středem elipsoidu). To bude obecně elipsa (pro izotropní materiál vždy kružnice). Velikosti jejích poloos jsou indexy lomu pro daný směr šíření (v izotropním materiálu pro všechny směry stejné).

Tedy, v anizotropní látce se světlo šíří tak, že v každém směru mohou postupovat dvě vlny s různými fázovými rychlostmi (různé indexy lomu), které jsou lineárně polarizované v navzájem kolmých rovinách.

Dvojlom nastává, dopadá-li vlna na povrch anizotropního materiálu a dále se šíří jako řádná a mimořádná. Platí samozřejmě zákon lomu

$$n_i \sin \Theta_i = n_t \sin \Theta_t. \quad (12.19)$$

Příčemž index lomu anizotropního materiálu n_t je pro řádnou vlnu nezávislý na směru šíření, pro mimořádnou závislý. Budeme-li si tedy prohlížet obrázek pod krystalem, uvidíme jej dvakrát. Při správném otáčení krystalu bude jeden z obrazů stále na místě (odpovídající šíření řádné vlny), druhý se bude pohybovat.

Anizotropní látky mají hodně velké využití - například v řadě optických elementů (polarizátory, půlvlnné a čtvrtvlnné destičky, rotátory, kompenzátory).⁴

³Devět závorek v podobě součtu čtyř členů obsahující rozdíly permitivity a indexu lomu.

⁴Slovo *čtvrtvlnný* v sobě obsahuje devět souhlásek jdoucích po sobě. Znáte nějaké lepší?

12.8 Laser

Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation

Základem je určitě pochopení *spontánní* a *stimulované* emise a charakteru vyzářeného světla. Při spontánní emisi je foton vyzářen do libovolného směru s náhodnou fází. Při stimulované emisi má emitovaná vlna stejný směr i stejnou fází, jako vlna dopadající a generované světlo je tudíž koherentní se světlem, které stimulovanou emisi vyvolává. Co stojí za to zmínit, je intenzita závislá na šíření v látce

$$I(z) = I(0)e^{B_{21}(N_2 - N_1)\frac{h\nu}{c\Delta\nu}z}, \quad (12.20)$$

kde z je délka, kterou světlo urazilo v látce, ν je frekvence, $\Delta\nu$ je frekvenční šířka pulsu, B_{21} *Einsteinův koeficient stimulované emise*, $N_{1,2}$ počet atomů v základním a excitovaném stavu. Klasicky je $N_2 < N_1$ a světlo je tedy v látce zeslabováno. Pokud však materiál (aktivní prostředí) dostatečně excitujeme (dodáváme mu energii, látku *čerpáme*) a tedy pro $N_2 > N_1$ bude intenzita světla exponenciálně růst. Látku lze čerpat opticky (jiný laser, výbojka), elektricky, chemicky. Aby světlo mohlo dostatečně zesílit, používá se k tomu *optický rezonátor* tvořený dvojicí planoparalelních zrcadel mezi kterými je aktivní prostředí. Jedno ze zrcadel bývá polopropustné a část světla tudíž z rezonátoru odchází. Aby laser generoval světlo, musí zesílení světla za jeden oběh převýšit ztráty. Pokud jsou ztráty přesně vyrovnány, mluvíme zde o *prahové podmínce laseru*.

Lasery se dělí podle typu aktivního prostředí na plynové, kapalinové, pevnolátkové. Nejznámější je helium-neonový laser. V něm dochází k stimulované emisi mezi atomárními hladinami Ne. Čerpání je zajištěno elektrickým výbojem v plynové směsi. Tento laser má koherenční délku 300m a $\Delta\nu_c = 10^6\text{Hz}$ při $\lambda = 633\text{nm}$. Díky mnohonásobným odrazům světla v rezonátoru je světlo dobře fokusováno a například na Měsíci je možné udělat stopu o průměru $\approx 10\text{m}$. Díky stavbě rezonátoru může laser generovat jen světlo vyhovující okrajovým podmínkám. Pro ten nejjednodušší s planoparalelními zrcadly (Fabry-Perot \rightarrow Airyho funkce (obr. 12.3)) musí být splněna rezonanční podmínka pro vlnovou délku světla

$$n\frac{\lambda_n}{2} = L, \quad (12.21)$$

kde $n \in \mathbb{N}$, L je délka rezonátoru. Číslo n čísluje přípustné stavy světla, stojatých vln, které se nazývají podélné módy rezonátoru. V laserech, ve kterých osciluje pouze jeden mód se dosahuje vysoké koherence. Pokud je módů hodně, světlo je neuspořádané. Je však možné zajistit, aby byly amplitudy jednotlivých módů v čase konstantní a byly konstantní i mezimódové fázové rozdíly. Pak je výstup z laseru opět uspořádaný a dochází ke generaci ultrakrátkých optických pulzů.

12.9 Základy vláknové a nelineární optiky

O lineární optice můžeme mluvit do té doby, dokud považujeme veličiny charakterizující látku jako nezávislé na intenzitě světla. Lineární odezva látek je však pouze aproximací, která platí pro malé světelné intenzity. Pro silná světelná pole

je susceptibilita (tj. i permitivita) závislá na velikosti elektrické intenzity světla. V tomto případě už neplatí princip superpozice - křížující světelné paprsky se mohou navzájem ovlivňovat.

Polarizace látky nechť tedy závisí na intenzitě elektrického pole $\mathbf{P} = \mathbf{P}(\mathbf{E})$. Rozdělme polarizaci na lineární a nelineární část

$$P(E) = P_L + P_{NL}, \quad (12.22)$$

přičemž pro lineární platí klasicky $P_L = \varepsilon_0 \xi E$. Pro případ, kdy frekvence světla není v rezonanci s energiemi přechodů v látce a kdy tedy nedochází k reálným excitacím do vyšších energetických stavů lze nelineární část polarizace rozvinout do řady

$$P_{NL} = \varepsilon_0 \xi^{(2)} E^2 + \varepsilon_0 \xi^{(3)} E^3 + \dots \quad (12.23)$$

Dle toho, jaký člen ještě uvážíme, budeme se zabývat nelineárními optickými jevy n -tého řádu.

Nelineární optické jevy druhého řádu například nemohou nastat v látkách se středem symetrie (vhodný krystal). Příkladem je zde například *zdvojení frekvence světla*. Dopadá-li na vhodnou látku světelná vlna frekvence ν , vzniká světlo o frekvenci 2ν . Intenzita tohoto světla je přímo úměrná intenzitě dopadající vlny, proto se tento jev projevuje v intenzivních laserových svazcích. Dále je také možná *generace součtové a rozdílové frekvence* a to smíšením dvou vln o různých frekvencích.

Nelineární optické jevy třetího řádu se vyskytují ve všech látkách. Tato nelinearita vede například k závislosti indexu lomu a absorpčního koeficientu na intenzitě světla. Tato závislost je přibližně lineární a index lomu může, se zvyšující se intenzitou, růst i klesat. Tato skutečnost vede k řadě zajímavých jevů. Například laserový paprsek má zpravidla gaussovské rozložení intenzity světla ve směru kolmém na směr šíření. Jistá látka tak může působit jako spojná čočka (*autofokusace*). Pokud je laserový svazek modulován v čase, pak náběh a konec vlny cítí v nelineárním prostředí jiný index lomu, než střed svazku. Fáze vlny se pak mění v čase (*automodulace fáze*).

Vláknová optika. Optická vlákna slouží k vedení světelných signálů, přičemž vedení ve vláknech je zajištěno totálním odrazem na rozhraní vlákna a okolí. Vlákna mohou mít skokovou, či spojitou změnu indexu lomu, mohou být jednomodová i mnohomodová. V optickém vlákně se mohou šířit bez velkých ztrát pouze určité světelné vlny, nazývané módy. Důležitou vlastností u optických vláken je jejich útlum (vznikající geometrickými poruchami vlákna, rozptylem - nejčastěji Rayleigh, absorpcí světla v materiálu) vyjadřující se v decibelech

$$\text{útlum} = 10 \log_{10} \left(\frac{P_1}{P_2} \right), \quad (12.24)$$

kde $P_{1,2}$ je světelný výkon na vstupu a výstupu vlákna. Řádově po sta kilometrech

jsou vláknové trasy vybaveny zesilovači.

Další důležitý parametr je *disperze*. Informace ve vláknech je realizována pomocí optických pulsů, které se však během šíření rozšiřují. Důvodem disperze je například materiálová disperze, závislost grupové rychlosti na vlnové délce, šíření více módů naráz (jiná optická dráha pro každý mód - různé módy se šíří různou rychlostí). Poslední jev samozřejmě nenastává v jednomodových vláknech, což je příčinou jejich používání. Šíří-li se pulz beze změny svého tvaru, hovoříme o *solitonu* - tyto podmínky však v reálných aplikacích nejsou splněny, neboť solitonový způsob šíření vyžaduje velikou intenzitu světla, která však při vedení vláknem hodně klesá.

12.10 Geometrická optika

Předpokladem geometrické optiky je nevodivé izotropní prostředí bez proudů a bez nábojů. Budeme-li dále předpokládat rovinnou vlnu ve tvaru

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, \mathbf{t}) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r})e^{-i(\omega t - k_0 S(\mathbf{r}))}, \quad (12.25)$$

kde $\mathbf{E}_0(\mathbf{r})$ je amplituda pole a $S(\mathbf{r})$ je reálná skalární funkce polohy zvaná *eikonál*. Dosazením do Maxwellových rovnic dostaneme v přiblížení $\lambda \rightarrow 0$ eikonálovou rovnici (Bruns, 1895)

$$(\nabla S(\mathbf{r}))^2 = n^2(\mathbf{r}), \quad (12.26)$$

kde $n^2(\mathbf{r})$ je index lomu závislý na poloze. Tato rovnice je základem geometrické optiky, jelikož pouze z rozložení indexu lomu v prostoru jsme schopni zjistit kompletní průběh elektrické intenzity a tedy i intenzity světla. Geometrická oblast, kde je hodnota eikonálu konstantní určuje *vlnoplochu*. Chceme-li však počítat dráhu šíření paprsku, je lepší použít paprskovou rovnici, ke které se dostaneme po pár úpravách z (12.26)

$$\frac{d}{ds} \left(n \frac{d\mathbf{r}(s)}{ds} \right) = \nabla n \quad (12.27)$$

Z rozložení indexu lomu tedy přímo získáme dráhu paprsku $\mathbf{r} = \mathbf{r}(s)$. Kupříkladu pro šíření v prostředí, kde $n = \text{konst}$ dostaneme rovnici přímky.

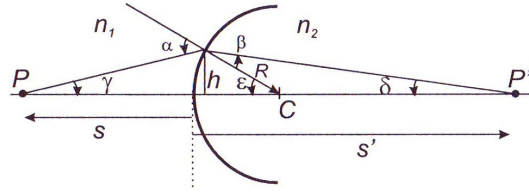
V geometrické optice se také často využívá **Fermatova principu**. Pierre de Fermat (1662) nám říká, že optická dráha, kterou se šíří paprsek mezi dvěma body, je nekratší možná. Aneb, v souladu s předchozím výkladem

$$\int_{\text{libovolná křivka}} n dl \geq \int_{\text{paprsek}} n dl. \quad (12.28)$$

Princip se vztahuje na křivky v blízkém okolí, nejedná se o globální extrém.

12.11 Zrcadla, čočky, zobrazovací rovnice

Obrázek 12.5: K odvození Abbeovy rovnice pro lom paprsků na kulovém optickém rozhraní (12.29).



Často se mluví o *paraxiální aproximaci*, ve které bereme v úvahu pouze paprsky, které nejsou příliš vzdálené od optické osy přístrojů.

V paraxiální aproximaci lze odvodit *Abbeův invariant*, který spojuje vzdálenost s se vzdáleností s' (obr. 12.5)

$$n_1 \left(\frac{1}{s} - \frac{1}{R} \right) = n_2 \left(\frac{1}{s'} - \frac{1}{R} \right). \quad (12.29)$$

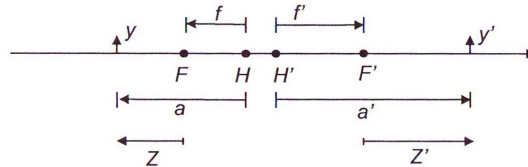
Z Abbeova invariantu lze dostat *Gaussův tvar zobrazovací rovnice*

$$\frac{f}{a} + \frac{f'}{a'} = 1, \quad (12.30)$$

kde f , f' jsou předmětová a ohnisková vzdálenost, a a a' jsou pouze přepisy s a s' . Příčné zvětšení pak lze definovat

$$\beta_0 = \frac{y}{y'} = \frac{n_1 a'}{n_2 a}. \quad (12.31)$$

Obrázek 12.6: Vztahy mezi vzdálenostmi měřenými v soustavách spojených s hlavními a ohniskovými body.



Tyto rovnice můžeme přepsat pomocí vzdáleností měřených od ohniskových bodů jak je na obrázku 12.6. Jelikož platí

$$a = f + Z \quad (12.32a)$$

$$a' = f' + Z' \quad (12.32b)$$

dostaneme rovnice

$$ZZ' = ff' \quad (12.33a)$$

$$\beta_0 = \frac{Y'}{Y} = -\frac{Z'}{f'} = -\frac{f}{Z}, \quad (12.33b)$$

což jsou *Newtonovy zobrazovací rovnice*.

Definujme ještě úhlové zvětšení

$$\gamma_0 = \frac{\tan \alpha'}{\tan \alpha} = \frac{a}{a'}. \quad (12.34)$$

Pokud budeme uvažovat místo nějakých prostředích s indexy lomu $n_{1,2}$ zrcadla, položíme $n_1 = -n_2$. Zrcadla dělíme na vypuklá ($R > 0$) a dutá ($R < 0$).

Pro tenkou optickou čočku ve vzduchu dostaneme výraz pro obrazovou ohniskovou vzdálenost

$$\frac{1}{f'} = (n_2 - 1) \left(\frac{1}{R_1} - \frac{1}{R_2} \right). \quad (12.35)$$

V praxi se síla čočky definuje pomocí optické mohutnosti

$$P = \frac{n_1}{f'}, \quad (12.36)$$

která má jednotku *dioptrie*.

Aby se při složitějších soustavách nemusela počítat hromada zobrazovacích rovnic, zavádí se **maticový formalismus**. V tomto případě popisujeme paprsek dvousložkovým vektorem - první složka udává vzdálenost paprsku od optické osy y a druhá složka úhel odklonu od optické osy ϑ . Spojky, rozptylky, zrcadla a další prvky pak charakterizujeme rozličnými maticemi 2×2 . Chceme-li pak zjistit, jaký paprsek nám vyjde z optické soustavy, roznásobíme matice a dostaneme výsledný vektor. Tohoto formalismu se užívá například u laserů - pro stabilitu rezonátorů.

12.12 Optické zobrazovací přístroje

Nejjednodušším optickým přístrojem je **lupa**. Pro lupu je nejdůležitější vlastností její zvětšení Γ , které je zde definováno jako podíl úhlu α' , pod nímž vidí pozorovatel obraz předmětu vytvořený přístrojem, k úhlu α , pod nímž vidí pozorovatel předmět v *konvenční zrakové vzdálenosti* 25cm před okem.

$$\Gamma = \frac{\alpha'}{\alpha}. \quad (12.37)$$

Toto zvětšení je mírou velikosti obrazu předmětu, který vznikne na sítnici oka pozorovatele. Definujme pro lupu ještě zvětšení, kdy do oka vstupují rovnoběžné paprsky, virtuální předmět je tedy v nekonečnu, oko není akomodováno

$$\Gamma_\infty = \frac{25\text{cm}}{f'}. \quad (12.38)$$

Toto zvětšení je běžně udáváno na lupách (obvykle $2 \times$ až $10 \times$).

Vezměme si další přístroj jménem **mikroskop**. Ten vznikne, když k lupě přidáme ještě jednu čočku (okulár). Opět u něj definujeme zvětšení, popřípadě i rozlišení. Pro zvětšení optických zobrazovacích mikroskopů je základní omezení takové, že nelze rozlišit předměty menší, než vlnová délka použitého světla.

Dále pohledme na **teleskop** (dalekohled). U něj definujeme zvětšení jako podíl úhlu α' , pod nímž pozorovatel vidí předmět v dalekohledu, k úhlu α , pod kterým vidí předmět bez dalekohledu. Podle typu okuláru rozlišujeme *Keplerův*

a *Galileův teleskop*. Při daném zvětšení je Keplerův teleskop vždy delší než Galileův.

Poslední optický přístroj necht' je **přístroj fotografický**. Nejjednodušším uspořádáním fotoaparátu je *camera obscura*, což je krabice ve které je jediný otvor - kruhová clona. Paprsky prochází clonou a dopadají na film na zadní stěně krabice. Tento přístroj je dokonalý v tom, že má světelnost objektivu rovnu jedné a nemusí ostřit. Clona však musí být malá, aby byl obraz ostrý a proto je nutný delší expoziční čas. Proto má běžný fotoaparát objektiv tvořený spojnou soustavou.

12.13 Optická spektroskopie, mřížka

Spektroskopie znamená studium optických přechodů v látkách. Závislost intenzity světla na vlnové délce se měří **spektrometry**. Spektrometr je přístroj, do něhož dopadá světlo vstupní štěrbinou a který má na výstupu obraz vstupní štěrbinu, jehož poloha je závislá na vlnové délce světla. Ve spektrometru musí být nějaký disperzní prvek, což může být například optický hranol, v současné době ale snad už jen mřížka. Rozložené spektrum světla je detekováno CCD detektory. Mezi důležité vlastnosti spektrometrů patří *světelnost*, *spektrální propustnost*, *spektrální rozlišení*. Spektrální rozlišení je opět definováno tím, jak blízké spektrální čáry lze ještě rozlišit. Přesných definic je několik a různě se od sebe liší.

Nejjednodušším disperzním prvkem je zpravidla ze skla nebo taveného křemene vyrobený disperzní hranol. Vzhledem k tomu, že index lomu závisí na vlnové délce světla, pak správné uspořádání hranolu rozkládá dopadající světlo na jednotlivé složky. Důležitým parametrem je u něj celková odchylka paprsku (deviace) při průchodu.

Dalším, lepším, disperzním prvkem je *optická ohybová mřížka*. Může se jednat o mřížku reflexní (detekujeme odražené světlo) či transmisní (ta byla jako první vyrobena z natažených lidských vlasů). U moderních mřížek bývají až tisíce vrypů na milimetr (čím více vrypů, tím větší disperze → lepší rozlišení). Mřížky je možné vyrábět ať už rytím diamantovým perem do podložky (metoda je náchylná na dodržení přesné geometrie mřížky - musí se zamezit veškerým otřesům), nebo holograficky (chemické leptání a napařování materiálu). U mřížek je také možné dosáhnout toho, abychom dostali největší intenzitu světla pro různá difrakční maxima. Toho se dosáhne pomocí *blejzované mřížky*, která má pilovitý profil.

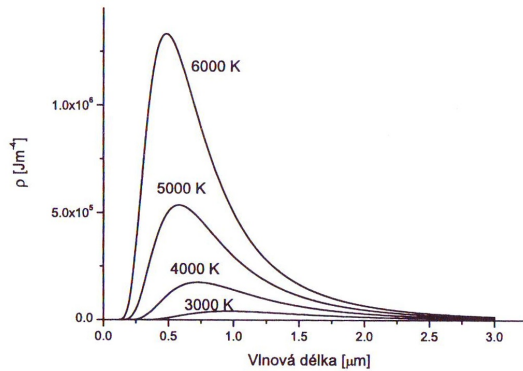
12.14 Spektrum záření černého tělesa

Ze základních termodynamických (TD) zákonů vyplývá, že v každé části prostoru, která je v TD rovnováze s okolím, musí existovat EM pole, které se nazývá tepelné záření (záření černého tělesa). Výzkum tepelného záření ke konci 19. století vyústil k formulaci základů kvantové fyziky (M. Planck, 1900) a základům kvantového popisu interakce světla s látkou. Schopnost tělesa absorbovat světlo je možné kvantifikovat koeficientem pohltivosti α

$$\alpha = \frac{w_{abs}}{w_{dop}}, \quad (12.39)$$

tedy poměr absorbované a dopadající energie na těleso. Platí $0 \leq \alpha \leq 1$. Absolutně černé těleso je takové, pro které platí $\alpha = 1$. Pro spektrální hustotu energie záření absolutně černého tělesa platí Planckův zákon

$$\rho(\nu, T)d\nu = \frac{8\pi\nu^2 d\nu}{c_0^3} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} h\nu, \quad (12.40)$$



Obrázek 12.7: Spektrální hustota energie záření černého tělesa jako funkce vlnové délky (rovnice (12.40)).

kde ν je frekvence, T teplota,... Průběh této (mírně přeepsané) funkce je pro několik teplot na obrázku 12.7. Dostaneme se k němu asi nejlépe postupem známým z TD. Analýzou vztahu (12.40) lze dospět ke vztahu

$$\lambda_{max} = \frac{C_W}{T}, \quad (12.41)$$

což je *Wienův posunovací zákon*, který nám umožňuje určovat teplotu těles, jejichž záření detekujeme. Chceme-li získat celkovou hustotu energie tepelného záření U pro všechny vlnové délky, resp. frekvence, stačí nám integrovat vztah (12.40)

$$U = \int_0^{\infty} \rho(\nu, T)d\nu = \sigma_{SB}T^4, \quad (12.42)$$

což je *Stefan-Boltzmannův zákon* a σ_{SB} je Stefan-Boltzmannova konstanta.

13. Variační formulace fyzikálních zákonů

13.1 Matematický úvod a základní motivace

Předmětem variačního počtu je hledání největších a nejmenších hodnot funkcionálů – tedy zobrazení, jejichž nezávislými proměnnými jsou funkce definované na nějaké množině. Typickým příkladem je hledání extrému funkcionálu ϕ

$$\phi(y) := \int_a^b F(x, y(x), y'(x)) dx,$$

kde $F \in C^1([a, b] \times \mathbb{R}^2)$ a funkce $y \in C^1([a, b])$ mají pevné hodnoty v krajních bodech intervalu $[a, b]$. Dá se ukázat, že aby funkce y představovala extrémálu funkcionálu ϕ (tedy aby variace $\delta\phi$ byla pro příslušnou funkci nulová), musí být řešením obyčejné diferenciální rovnice zvané *Eulerova-Lagrangeova rovnice*:

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial y'} \right) - \frac{\partial F}{\partial y} = 0.$$

Úloha o brachistochroně

Na konci 17. století Johann Bernoulli zformuloval úlohu, která se stala základem variačního počtu a posléze i Hamiltonova formalismu. Dva body A a B , které se nacházejí v různých polohách v gravitačním poli, ovšem ne na stejné svislé přímce, se mají spojit takovou křivkou, aby pohyb hmotného bodu z bodu A do B trval minimální čas. Sám Bernoulli zkoušel body spojit úsečkou, částí kružnice a dalšími křivkami, ovšem jako správné řešení se nakonec ukázala křivka, která se nazývá *brachistochrona* a která (jak vyplývá z nalezeného řešení) je cykloidou.

13.2 Hamiltonův variační princip

Hamiltonovská formulace mechaniky představuje alternativní popis mechaniky, který je ovšem ekvivalentní Newtonovým pohybovým rovnicím, popř. Lagrangeově formalismu. Z matematického hlediska se jedná o nejvyspělejší způsob popisu mechanického pohybu, který je v mnoha případech výhodnější než například tradiční Newtonovy rovnice.

Zavedme funkcionál akce S popisující pohyb soustavy v časovém intervalu $[t_1, t_2]$ vztahem

$$S := \int_{t_1}^{t_2} L(q^j(t), \dot{q}^j(t), t) dt$$

pro $j = 1, 2, \dots, n$ (kde n je počet stupňů volnosti soustavy). L je přitom Lagrangeova funkce popisující danou soustavu¹. Hamiltonův variační princip (někdy také princip nejmenší akce) potom říká, že se realizuje taková trajektorie $q(t)$, že variace jí příslušející akce je nulová:

$$\delta S = 0. \tag{13.1}$$

¹Proměnná $\dot{q}^j(t)$ představuje časovou derivaci j -té zobecněné souřadnice, tj. $\dot{q}^j(t) = \frac{dq^j(t)}{dt}$.

Skutečná trajektorie, po níž se soustava pohybuje a jejíž tvar hledáme, je tedy taková, že akce S pro tuto trajektorii nabývá stacionární hodnotu – variace S je nulová. Této hodnotě pak odpovídá buď extrém (lokální minimum nebo lokální maximum), anebo inflexní bod. Princip platí pro systémy mající potenciál (ten může záviset na poloze, rychlosti i čase) a které jsou podrobeny holonomním vazbám (lze zahrnout i některé neholonomní vazby, ale pro zjednodušení je neuvažujeme).

Jak víme, nutnou podmínkou stability funkcionálu akce ($\delta S = 0$) je splnění Eulerových-Lagrangeových rovnic, tedy v našem případě:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^j} \right) - \frac{\partial L}{\partial q^j} = 0,$$

což jsou ale Lagrangeovy rovnice druhého druhu.

Právě popsany princip lze zobecnit i na nekonečný počet stupňů volnosti (tj. na spojitě kontinuum), na děje v elektromagnetickém poli a do dalších oborů fyziky - velké uplatnění mají v teorii relativity a v teoriích pole.

13.3 Vztah mezi mechanikou a geometrickou optikou

Pohybové rovnice v klasické mechanice lze napsat ve tvaru podmínky pro extrémální hodnotu akčního funkcionálu S . Analogicky můžeme geometrickou optiku založit na *Fermatově principu*, jehož původní formulace by zněla následovně: *Světlo se v prostoru šíří z jednoho bodu do druhého po takové dráze, aby doba potřebná k proběhnutí této dráhy byla minimální.* Správněji bychom ovšem tento princip formulovali tak, že optická dráha mezi dvěma body, kterými prochází světelný paprsek, je extrémální (tj. musí být minimální, maximální – např. gravitační čočky – nebo musí odpovídat inflexnímu bodu). Přitom tento extrém nemusí být globální – zkoumáme pouze křivky v blízkém okolí.

Optickou dráhu l mezi body A a B definujeme vztahem²

$$l = \int_A^B n(\mathbf{r}) ds,$$

kde n je index lomu, což je skalární pole proměnné $\mathbf{r} = (x, y, z)$.

Podle Fermatova principu se paprsek pohybuje tak, že jeho optická dráha je extrémální. Pro skutečné šíření světla tedy platí

$$\delta l = 0.$$

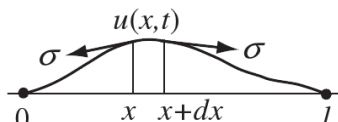
²Nechť paprsek dospěje z bodu A do bodu B za čas T . Potom máme

$$l = cT = c \int_A^B dt = \int_A^B \frac{c ds}{v} dt = \int_A^B n ds.$$

13.4 Hamiltonův princip pro soustavy s nekonečně mnoha stupni volnosti

Struna

Uvažujme strunu, jejíž konce jsou upevněny v bodech 0 a l na ose x . Předpokládejme, že struna je napjatá napětím σ a její hmotnost je v rovnovážné poloze rozložena s konstantní hustotou ρ .



Nechť struna koná pouze příčné kmity a její výchylku označme $u = u(x, t)$. Souřadnice x představuje vlastně spojitý index, který označuje jednotlivé body struny. Předpokládejme dále, že výchylky jsou malé ve smyslu, který vyplyne z přiblížení, jež v dalším použijeme. Při kmitech se sice mění délka struny a podle Hookova zákona i napětí v ní, budeme však předpokládat, že tato změna napětí je zanedbatelná.

Pohybovou rovnici nyní odvodíme z Hamiltonova principu pro soustavu hmotných bodů, který vhodně zobecníme na spojitě rozloženou hmotnost.

Pro kinetickou energii struny platí

$$T = \frac{1}{2}mv^2 = \int_0^l \frac{1}{2}\rho u_t^2(x, t) dx.$$

K nalezení potenciální energie musíme uvážit síly pnutí, které působí na jednotlivé úseky struny. Práce vynaložená na jejich překonání při vychylování struny z rovnovážné polohy $u = 0$ do okamžité výchylky $u = u(x, t)$ v daném čase t je hledaná potenciální energie. Uvažme tedy obecnou výchylku struny popsanou funkcí $y(x)$. To je rovinná křivka $x = x$, $y = y(x)$ s jednotkovým tečným vektorem $\mathbf{t}(x) = k(1, y_x)$, kde $k = 1/(1 + y_x^2)$ je normalizační faktor. Předpokládáme však, že úhly, které struna svírá s osou x , jsou malé, takže $k \approx 1$ (po nalezení řešení výsledné rovnice musíme samozřejmě ověřit, že vyhovuje předpokladům). Na úsek struny mezi body x a $x+dx$ působí tedy výsledná síla $\sigma \mathbf{t}(x+dx) - \sigma \mathbf{t}(x)$, neboť směry napětí σ působící na obou koncích jsou dány příslušnými tečnými vektory. Pro složku síly do příčného směru y můžeme tedy s užitím Taylorova rozvoje psát

$$F_y = \sigma [y_x(x+dx) - y_x(x)] \approx \sigma y_{xx}(x)dx.$$

Potenciální energie uvažovaného úseku při výchylce $u = u(x, t)$ bude tedy

$$dV = \int_0^u F_y dy = \sigma dx \int_0^u y_{xx} dy.$$

Označíme-li nyní $z = y_x$, pak $y_{xx} = z_x = z_y y_x = z z_y$, takže potenciální energie dV je

$$dV = \sigma dx \int_0^u z z_y dy = \sigma dx \int_0^{z(u)} z dz = \sigma dx \frac{1}{2} z^2(u) = \frac{1}{2} \sigma u_x^2 dx.$$

Celkovou potenciální energii dostaneme integrací přes celou délku struny, takže

$$L = T - V = \int_0^l \left(\frac{1}{2} \rho u_t^2(x, t) - \frac{1}{2} \sigma u_x^2(x, t) \right) dx.$$

Je přirozené zavést funkci $\mathcal{L}(x, t)$ nazývanou *hustota Lagrangeovy funkce* vztahem

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \rho u_t^2 - \frac{1}{2} \sigma u_x^2.$$

Hamiltonův princip nám dává

$$0 = \delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} L dt = \delta \int_{t_1}^{t_2} \int_0^l \mathcal{L} dx dt.$$

Z teorie variačního počtu dostaneme, že funkce u extremalizující tento funkcionál dvou proměnných vyhovuje rovnici

$$u_{xx} - \frac{1}{c^2} u_{tt} = 0,$$

kde $c = \sqrt{\sigma/\rho}$. Jedná se samozřejmě o rovnici struny, neboli jednorozměrnou vlnovou rovnici.

STR a elektromagnetické pole

Nejprve by bylo vhodné připomenout, v čem se liší formalismus speciální teorie relativity od klasické mechaniky

- Lagrangián musí být invariantem Lorentzovy transformace, jinak by hledané Eulerovy-Lagrangeovy rovnice měly různý tvar v různých inerciálních soustavách. Už z toho plyne, že nemůže být roven „ $T - V$ “, neboť kinetická energie je vůči různým soustavám různá. Pro nalezení relativistického lagrangiánu není k dispozici žádný univerzální postup. Většinou je však možný tvar lagrangiánu velmi omezen již tím, že musí být lorentzovsky invariantní, výběrem proměnných, které jsou pro daný problém relevantní, a také na základě tvaru Eulerových-Lagrangeových rovnic.
- Geometrickým významem variační úlohy, je výběr skutečné světočáry z „vřetena“ virtuálních světočar. V klasické mechanice jsou všechny světočáry parametrizovány stejným časem t (protože je absolutní), zatímco v relativitě běží podél každé světočáry jiný, pro ni specifický vlastní čas, takže při variaci, tj. přechodu mezi sousedními světočarami, bychom měli variovat i vlastní čas τ . Z důvodu invariance akce se navíc relativistický lagrangián musí integrovat přes vlastní čas.

Funkcionál akce S tedy ve speciální teorii relativity zavádíme vztahem

$$S := \int_{\tau_1}^{\tau_2} \mathcal{L}(x^\mu, u^\mu) d\tau,$$

kde \mathcal{L} je relativistický lagrangián, x^μ jsou časoprostorové souřadnice (obsahují tedy již i čas) a u^μ je čtyř-rychlost.

Přistupme nyní k variačnímu odvození první série Maxwellových rovnic. Úloha opět není diskrétní jako u mechanického problému částice, ale spojitá (konfiguraci pole budeme hledat v celé nějaké prostoročasové oblasti), takže místo lagrangiánu přejdeme k jeho (vlastní) hustotě. Taková veličina má rozměr hustoty energie a

má-li být invariantní, pak z výrazů sestavených ze základních elektromagnetických veličin (J^μ , A_μ , $F_{\mu\nu}$) připadají v úvahu $F^{\alpha\beta}F_{\alpha\beta}$ a $J^\alpha A_\alpha$. Správnou volbou je skutečně

$$\mathcal{L} = \int_{V_0} \left(-\frac{1}{4\mu} F^{\alpha\beta} F_{\alpha\beta} + J^\alpha A_\alpha \right) dV_0.$$

Variační úloha je formulována tak, že hledáme polní konfiguraci v nějaké pevně zvolené prostoročasové oblasti Ω , přičemž na její hranici $\partial\Omega$ je pole pevně zadáno (je tam $\delta A_\alpha = 0$) a pevně dané jsou (všude) také zdroje J^μ (jejich uspořádání se *nehledá*). V takovém případě se hustota lagrangiánu variuje jen vzhledem k potenciálu A_α a jeho derivacím. Postup je díky tomu docela jednoduchý:

$$\begin{aligned} \delta S &= \delta \int_{\tau_1}^{\tau_2} \mathcal{L} d\tau = \delta \int_{\tau_1}^{\tau_2} \int_{V_0} \left(-\frac{1}{4\mu} F^{\alpha\beta} F_{\alpha\beta} + J^\alpha A_\alpha \right) dV_0 d\tau \\ &= \int_{\Omega} \delta \left(-\frac{1}{4\mu} F^{\alpha\beta} F_{\alpha\beta} + J^\alpha A_\alpha \right) d\Omega = \int_{\Omega} \left(-\frac{1}{2\mu} F^{\alpha\beta} \delta F_{\alpha\beta} + J^\alpha \delta A_\alpha \right) d\Omega \\ &= \int_{\Omega} \left[-\frac{1}{2\mu} F^{\alpha\beta} (\delta A_{\beta,\alpha} - \delta A_{\alpha,\beta}) + J^\alpha \delta A_\alpha \right] d\Omega \\ &= \int_{\Omega} \left(\frac{1}{\mu} F^{\alpha\beta} \delta A_{\alpha,\beta} + J^\alpha \delta A_\alpha \right) d\Omega = \int_{\Omega} \left(-\frac{1}{\mu} F^{\alpha\beta}_{,\beta} \delta A_\alpha + J^\alpha \delta A_\alpha \right) d\Omega \\ &= \int_{\Omega} \left(-\frac{1}{\mu} F^{\alpha\beta}_{,\beta} + J^\alpha \right) \delta A_\alpha d\Omega \end{aligned}$$

V druhém řádku jsme využili toho, že

$$\delta(F^{\alpha\beta} F_{\alpha\beta}) = \delta F^{\alpha\beta} F_{\alpha\beta} + F^{\alpha\beta} \delta F_{\alpha\beta} = \delta F_{\alpha\beta} F^{\alpha\beta} + F^{\alpha\beta} \delta F_{\alpha\beta} = 2F^{\alpha\beta} \delta F_{\alpha\beta},$$

ve čtvrtém řádku pak nejdříve to, že

$$\begin{aligned} F^{\alpha\beta} (\delta A_{\beta,\alpha} - \delta A_{\alpha,\beta}) &= F^{\alpha\beta} \delta A_{\beta,\alpha} - F^{\alpha\beta} \delta A_{\alpha,\beta} = F^{\beta\alpha} \delta A_{\alpha,\beta} - F^{\alpha\beta} \delta A_{\alpha,\beta} \\ &= -F^{\alpha\beta} \delta A_{\alpha,\beta} - F^{\alpha\beta} \delta A_{\alpha,\beta} = -2F^{\alpha\beta} \delta A_{\alpha,\beta} \end{aligned}$$

(podstatná je antisymetrie $F^{\alpha\beta}$), a posléze se první člen integrálu upravil per partes

$$\int_{\Omega} F^{\alpha\beta} \delta A_{\alpha,\beta} d\Omega = \int_{\Omega} (F^{\alpha\beta} \delta A_\alpha)_{,\beta} d\Omega - \int_{\Omega} F^{\alpha\beta}_{,\beta} \delta A_\alpha d\Omega = - \int_{\Omega} F^{\alpha\beta}_{,\beta} \delta A_\alpha d\Omega,$$

kde se integrál s divergencí převedl pomocí Gaussovy věty na povrch oblasti a využilo se tamější nulovosti δA_α ,

$$\int_{\Omega} (F^{\alpha\beta} \delta A_\alpha)_{,\beta} d\Omega = \int_{\partial\Omega} (F^{\alpha\beta} \delta A_\alpha) dS_\beta = 0.$$

Požadavek stacionarity akce $\delta S = 0$ tak při obecnosti δA_α implikuje první sadu Maxwellových rovnic

$$F^{\alpha\beta}_{,\beta} = \mu J^\alpha.$$

Připomeňme ještě, že druhou sadu ($F_{[\mu\nu,\rho]\text{cykl}} = 0$) není třeba hledat – platí automaticky díky definici $F_{\mu\nu} = A_{\nu,\mu} - A_{\mu,\nu}$ (tedy díky zvolenému vyjádření polí pomocí potenciálů).

14. Stavba atomů, molekul a kondenzovaných látek

14.1 Stacionární stavy atomů a molekul

14.1.1 Atomy

V průběhu let se pohled na to jak atom vypadal měnil. Název atom vznikl v antickém Řecku. Prvním moderním modelem byl Thomsonův (pudingový) model, který předpokládal že atomy jsou složeny z kladně nabitého "puding" ve kterém jsou rozmístěny elektrony. Tento model byl vyvrácen v roce 1909 experimentem na zlaté folii. To vedlo k vytvoření Rutherfordova modelu ve kterém je celý pozitivní náboj uprostřed atomu a elektrony obíhají kolem jádra. Velikost kladného náboje je úměrná atomovému hmotnostnímu číslu a většina hmotnosti je v centru atomu. Problém byl že by elektrony rychle vyžářili energii a spadli by do jádra. Problém se snažil vyřešit Bohr s tím že zavedl vlastní model. Elektrony obíhají jen po určitých orbitách na kterých elektrony nevyzařují. Tzto stacionární stavy vybíral kvantováním momentu hybnosti $L = n\hbar$ Elektrony získávají energii jen přeskokováním mezi orbitami. Současný model je Schrodingerův model, který využívá kvantové mechaniky. Zmíním Hartree-Fockovy rovnice, které se používají pro řešení více elektronového atomu. Používá se 1-elektronového aproximace.

14.1.2 Molekuly

Molekuly se skládají z atomů které jsou na sebe vázány různými vazbami: kovalentní, iontová, kovová, vodíková a van der Waalsova. Při kovalentní vazbě sdílí elektron atomy, při iontové jeden atom předává druhému elektron, kovová vazba existuje díky vodivostním elektronům a překrývajícím se orbitalům, vodíková vazba vzniká mezi odhaleným vodíkem (atom na který je vázán "stáhne" jeho elektron) a elektronovými páry, van der Waalsova síla vyniká díky indukovaným dipólovým momentům a jejich elektrostatické interakci. Pro molekuly je důležitá izomerie, kdy sloučeniny mají stejný sumární vzorec ale liší se v strukturálním vzorci, což ovlivňuje fyzikální a chemické vlastnosti. Izomery dělíme na konstituční a konfigurační (stereoizomery). Konstituční izomery mají stejný sumární vzorec, ale jiné vnitřní uspořádání. Konfigurační mají stejný sumární i strukturální vzorec ale liší se uspořádáním v prostoru (např. pootočené). Další vlastnost je chiralita molekul. Chirální molekuly nelze ztotožnit plně se svým obrazem, zatímco chirální lze. Chirální molekuly nemají střed symetrie ani roviny zrcadlení ale mohou mít rotační osy symetrie. Chirální molekuly jsou opticky aktivní. Chiralita molekul může způsobovat různé fyzikální a chemické vlastnosti. Molekuly charakterizujeme dle jejich symetrie. Každá molekula může mít tyto prvky symetrie identita E , inverze i , n -četná osa C_n , rovina zrcadlení σ a inverzní osu. Různé kombinace prvků symetrie tvoří grupu, která je charakteristická pro danou molekulu. Toto celé lze najít i v prezentacích od Javorského i s pár obrázky (prezentace 1.1).

Molekuly se dají také popsat kvantově i když tento popis je těžší pro více mole-

kul. Hamiltonián si rozepíšeme pro všechny elektrony a jádra. Zde uvedu pouze zjednodušenou část, celý hamiltonián je v prezentacích od Javorského (prezentace 4.3)

$$H = J_\alpha + J_e + U_{\alpha e} + U_{\alpha\alpha} + U_{ee} \quad (14.1)$$

kde J_α je kinetická energie jader, J_e je kinetické energie elektronů, $U_{\alpha e}$ je potenciální energie jader působících na na elektrony, $U_{\alpha\alpha}$ je potenciální energie mezi jádry a U_e je potenciální energie mezi elektrony. K zjednodušení použijeme adiabatickou aproximaci. Ta spočívá v tom že atomy konají pomalé pohyby kolem svých rovnovážných poloh(aspoň vůči elektronům) a elektrony je adiabaticky sledují. Vlnova rovnice se rozdělí na dvě části $\Psi(r_i, R_\alpha) = \Phi(R_\alpha) \psi(r_i | R_\alpha)$ kde $\Phi(R_\alpha)$ je část pro jádra a $\psi(r_i | R_\alpha)$ je část pro elektrony R_α zde funguje jako parametr. Hamiltonián můžeme rozdělit na část pro jádra a pro elektrony. Hamiltonián pro elektrony:

$$(J_e + U_{\alpha e}(r_i | R) + U_{ee}(r) + U_{\alpha\alpha}(R)) \psi_n(r_i | R) = E_n(R) \psi_n(r_i | R) \quad (14.2)$$

kde E_n je energie n-tého elektronu v dané konfiguraci jader. z předchozích výsledků a protože předpokládáme že se daný atom nachází v minimu své energie stavu tak potenciál rozvedeme do Taylorova polynomu. Z toho dostaneme:

$$(J_\alpha + E_n(R_\alpha)) \Phi(R_\alpha) = W \Phi(R_\alpha) \quad (14.3)$$

Z toho se dá už dostat kmity a rotace molekuly.

Nejjednodušší případem je molekula H_2^+ . Ta se dá řešit exaktně pomocí substitucí $\xi = (r_A + r_B)/R_{AB}$ a $\eta = (r_A - r_B)/R_{AB}$. Pro složitější případ existuje metoda LCAO(linear combination of atomic orbitals). Tato metoda není kvantitativně přesná, ale zato má dobrý kvalitativní popis. Výslednou funkci dostaneme jako kombinaci všech vlnových funkcí pro každý elektron s každým jádrem. Pro molekulu H_2 dostáváme 2 stavy, jeden vazebný a druhý ne. Zde záleží na tvaru vlnových funkcí spinů. Pokud je součin obou vlnových funkcí symetrický pak dochází k vazebnému stavu.

Vše y téhle části je obsaženo v Javorského prezentacích a odtamtud jsem hlavně čerpal.

14.2 Elektrické a magnetické momenty atomů a molekul

Atomy a molekuly tvoří mají vlastní elektrické a magnetické momenty. Pro zopakování:

$$p = \int_V r' \rho(r') dV' \quad (14.4)$$

$$\mu = \frac{1}{2} \int_V r' \times \rho(r') dV' \quad (14.5)$$

Díky tomu že se atomy skládají z pozitivně nabitého jádra a elektronů, můžeme brát atom v dostatečně velké vzdálenosti jako dipól. Pokud budeme postupovat dle kvantové mechaniky tak nakonec po vystředování dostaneme, že elektrický dipólový moment je nulový pro volný atom v nulovém vnějším elektrickém poli. U molekul se situace zhoršuje neboť ztrácíme středovou symetrii. Molekuly které

mají nulový dipólový moment se nazývají nepolární a s nenulový polární. Elektrický dipólový moment pro jednoduché molekuly je řádově $\approx 10^{-30} \text{C} \cdot \text{m}$. Magnetický moment u atomů a molekul pochází od elektronů a to od momentu hybnosti a spinu. Magnetický moment od orbitálního momentu L a jeho z-tové složky L_z je:

$$\mu_L = -\frac{e\hbar}{2m_e} \sqrt{l(l+1)} = \mu_B \sqrt{l(l+1)} \quad (14.6)$$

$$\mu_{L_z} = -\frac{e\hbar}{2m_e} m_l = -\mu_B m_l \quad (14.7)$$

kde $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$ je Bohrov magneton rovný $9,274 \text{ Am}^2$. Pro magnetický moment spinu a jeho z-tové složky dostáváme:

$$\mu_S = -2\mu_B \sqrt{s(s+1)} \quad (14.8)$$

$$\mu_{S_z} = -2\mu_B m_s = \pm\mu_B \quad (14.9)$$

Pro atom s plně zaplněnými orbitály má nulový celkový magnetický moment. Dále může docházet k sčítání momentů a následné degeneraci a to díky interakci mezi elektrony a spin-orbitální interakci. K zjištění stavu atomu se používají Hundova pravidla. 1. Hundovo pravidlo je, že celkový spinový moment $S = \sum_i s_i$ je maximální. 2. Hundovo pravidlo říká, že celkový moment hybnosti $L = \sum_i l_i$ je maximální při daném S . 3. Hundovo pravidlo nám říká, že jeli slupka zaplněna méně než z poloviny pak $J = L + S$, pokud je více než z poloviny pak $J = L - S$ (pro J platí obecně vztah $J = |L - S|, \dots, L + S$)

14.3 Elektronové stavy v kondenzovaných látkách

14.3.1 Model volných elektronů

Jeho první část vznikla s Drudeho modelu který bral elektrony jako plyn (elektronový plyn je podobný ideálnímu plynu). Předpokládal že se elektrony mezi srážkami pohybují volně bez jakékoliv interakce, dále že se rychlosti mění při srážkách. Změna rychlosti při srážce závisí na teplotě v daném místě. Distribuce elektronových rychlostí se řídí Maxwell-Boltzmanovým rozdělením $f(E) = \text{konst} \cdot e^{-E/k_B T}$. Tento model vysvětlil elektrickou vodivost, Ohmův zákon, Hallův jev a stav mezi elektrickou a tepelnou vodivostí (Wiedermann-Franz) $\frac{\kappa}{\sigma} \approx C_V m v^2$. Jediné co nevysvětlil byl elektronový příspěvek k měrnému teplu, který byl větší než naměřený. Toto vysvětlil Sommerfeldův model. Tento model využívá toho elektrony jsou fermiony a tedy může být pouze 2 v jednom energetickém stavu (2 díky spinu nahoru a dolů). Zaměnil tedy Maxwell-Boltzmanovo rozdělení za Fermi-Diracovo rozdělení $f(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1}$. V tomto rozdělení přispívá jen několik excitovaných elektronů z okolí Fermiho energie k tepelné kapacitě a dalším vlastnostem. Pro volný elektron tedy máme rovnici ve tvaru

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (14.10)$$

Okrajové podmínky volíme periodicky, nazývají se Born-Karmanovy podmínky (volí se většinou na základě rozměru mřížky). Řešením jsou vlnové funkce pro

volnou částici normované na objem. Tedy máme $\psi(x+L, y, z) = \psi(x, y, z)$ a stejně pro y a z . Pro vlnový vektor pak platí $k_{x,y,z} = \frac{2\pi}{L}n_{x,y,z}$. Na jedno \vec{k} pak připadá objem $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$ v reciprokém prostoru. Počet stavů v kouli o poloměru k_F (velikost vlnového vektoru pro elektrony s nejvyšší energií při $T = 0$ K, tedy s Fermiho energií E_F) je:

$$N = \frac{4}{3}\pi k_F^3 \frac{V}{(2\pi)^3} \underbrace{2}_{spin} = \frac{V}{3\pi^2} k_F^3 \quad (14.11)$$

Dostáváme tedy vyjádření k_F z kterého můžeme dopočítat Fermiho energii:

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \quad (14.12)$$

kde n je počet částic na jednotku objemu. Dále dostáváme vyjádření pro $v_F = \frac{\hbar}{m}k_F$ a Fermiho teplotu $T_F = \frac{E_F}{k_B}$ (Fermiho teplota se pohybuje v řádech 10 000

K a více). Pro hustotu stavu platí $g(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} E^{1/2}$. Tedy pro Fermiho energii platí

$$g(E_F) = \frac{3n}{2E_F} \quad (14.13)$$

Pro vnitřní energii elektronů máme že $U \approx N \frac{T}{T_F}$ a z toho odvodíme elektronovou část z tepelné kapacity.

$$C_{el} = \frac{1}{3}\pi^2 g(E_F) k_B^2 T \quad (14.14)$$

pro $T \ll \Theta_D$ (Θ_D je Debyovateplota) máme

$$C_{el} = \gamma T + \beta T_3 \quad (14.15)$$

experimentální hodnoty pro γ se liší od teoretických díky tomu že v kovech máme efektivní hmotnost místo hmotnosti pro volný elektron.

14.4 Pásová struktura a elektrická vodivost pevných látek

K vysvětlení rozdílu mezi izolátory, vodiči a polovodiči se používá model téměř volných elektronů, kdy se zavede periodický potenciál podobný krystalické mřížce. Řešením Schrodingerovy rovnice s periodickým:

$$\psi_{n,k}(\vec{r}) = u_{nk}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (14.16)$$

kde $u_{nk}(\vec{r})$ je Blochova funkce pro kterou platí $u_{nk}(\vec{r}) = u_{nk}(\vec{r} + \vec{R})$ kde $\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ je vektor krystalické mřížky. Pro vlnovou funkci pote platí

$$\psi_{n,k}(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \psi_{n,k}(\vec{r}) = u_{nk}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \quad (14.17)$$

Otázka je kde se vzali indexy n a k . Vychází to z důkazu Blochova teorému, který lze najít například v Ashcroftovi. Koeficient k dostáváme díky tomu že si rozložíme potenciál U do Fourierovy řady. Koeficient n máme protože pro dané

k máme více řešení Schrodingerovy rovnice. Všechny vektory k můžeme brát z první Brillouinovy zóny neboť platí $\psi_{k+B}(\vec{r}) = e^{i\vec{R}\cdot\vec{B}}\psi_k(\vec{r})$ kde $e^{i\vec{R}\cdot\vec{B}} = 1$ protože vektor \vec{B} je vektor reciproké mřížky a \vec{R} je vektor krystalické mřížky. Tedy řešením Schrodingerovy rovnice jsou $\psi_{n,k}(\vec{r})$ a $E_n(\vec{k})$, což dává pásovou strukturu. To ještě není ten obrázek s těmi zaplněnými "obdelníky" a mezerami mezi nimi. K tomu je potřeba započítat jak to vypadá na hranici Brillouinovy zóny. Na hranici se nám střetávají dvě postupné vlny e^{kx} a e^{-kx} , které může vytvořit dvě stojaté vlny $\psi^\pm = \text{konst.} (e^{kx} \pm e^{-kx}) = \text{konst.} (e^{\pi x/a} \pm e^{-\pi x/a})$. Dostáváme 2 hustoty stavů pro které platí

$$\rho^+ = |\psi^+|^2 \approx \cos(\pi x/a) \quad (14.18)$$

$$\rho^- = |\psi^-|^2 \approx \sin(\pi x/a) \quad (14.19)$$

kladná část sníží potenciální energii a druhá jí zvýší. Dojde tedy k rozdělení a k vzniku zakázaného pásu (zajímavé vysvětlení je na anglické wiki, já čerpal z Javorského). Energetické pásy se mohou překrývat. Jak tedy budou vypadat pásy pro jednotlivé druhy vodičů? Záleží na poloze Fermiho energie vůči pásům. U vodičů nacházíme Fermiho energii v některém pásu, elektrony tedy nepotřebují mnoho energie aby byli excitováni do vodivostního pásu. U izolátorů je energie potřebná k excitaci do vodivostního stavu vysoká díky tomu že se Fermiho energie nachází mezi pásy a jejich vzdálenost je dostatečně velká. V polovodičích je vzdálenost mezi valenčním pásem a vodivostním pásem mnohem menší než mezi u izolátoru. Energie potřebná k excitaci je větší než u vodičů ale menší než izolátorů. U polovodičů můžeme pozorovat tzv. děrovou vodivost. Můžeme to brát tak že dochází k pohybu elektronů které po sobě nechávají kladnou "díru" kterou zaplní jiný elektron, ale tento elektron vytvořil také díru atd. Díry se pohybují ve valenčním pásu. Vodivost polovodičů se dá také ovlivnit dopováním, tedy přidáním cizího prvku. Ty se dělí na elektronové akceptory nebo donory. Polovodiče s dopovanými akceptory jsou typu P a polovodiče dopované donory jsou typu N. N a P značení nám říká, který s atomů přispívá nejvíce elektrony. Akceptory mají většinou o jeden valenční elektron méně, zatímco donory o jeden elektron více. Z pohledu pásové struktury vytváří dopanty v pásové mezeře nové stavy. Donor vytváří stavy blízko vodivostního pásu, zatímco akceptory vytváří stavy blízko valenčního pásu. Vzdálenost mezi těmito novými stavy a nejbližším pásem je obvykle velmi malá (desetiny eV). Charakteristický vývoj pro odpory v závislosti na teplotě se liší pro izolátory, vodiče a polovodiče. Izolátory mají konstantní odpor v závislosti na teplotě až při vysokých napětích odpor klesne (díky velké energetické vzdálenosti mezi valenčním a vodivostním pásem). Pro vodiče odpor s klesající teplotou klesá, to je díky zmenšujícím se kmitům mříže. U polovodičů odpor s klesající teplotou odpor roste a to díky tomu že je méně excitovaných elektronů v vodivostním pásu.

Pokud působíme vnějším polem na elektrony v krystalu pozorujeme že jejich hmotnost se liší od známé hmotnosti elektronu. Hmotnost kterou pozorujeme záleží také na směru ve kterém působíme vnějším polem. Hmotnost elektronu se liší díky vlivu atomů v krystalu na elektron. Pro efektivní hmotnost elektronu máme

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \quad (14.20)$$

Fermiho plocha je plocha v reciprokém prostoru s podmínkou že elektrony s příslušným k mají Fermiho energii E_F . Z tvaru Fermiho plochy se dají předpovědět

určité vlastnosti materiálu. Její tvar závisí na periodicitě a symetrii mřížky a na obsazenosti elektrických stavů. Existence Fermiho plochy vychází z Pauliho principu tedy, že nemůžou být dva elektrony ve stejném stavu.

Vodiče se obecně dají charakterizovat vztahem

$$\rho(T) = \rho_0 (1 + \alpha T + \beta T^2) \quad (14.21)$$

Průchod elektrického proudu kovem či polovodičem je doprovázen obecným jevem spočívajícím ve vzniku příčné intenzity elektrického pole, je-li vzorek vložen do příčného pole magnetického. Tento jev, nazývaný Halloovým jevem, má rovněž značnou důležitost pro objasnění mechanismu elektrické vodivosti daného vodiče. Vnější elektrické pole E_x orientované ve směru osy x budí ve vzorku elektrický proud o hustotě j_x . Přiložíme-li magnetické pole B_z ve směru osy z , objeví se ve vzorku příčné elektrické pole $E_{H,y}$ ve směru osy y , které na vzorku vytvoří měřitelné příčné napětí $U_H = E_{H,y}d$. Intenzita $E_{H,y}$, respektive napětí U_H se nazývá Halloovou intenzitou, respektive Halloovým napětím. Experiment ukazuje, že Hallova intenzita je úměrná proudové hustotě j_x a magnetické indukci B_z

$$E_{H,y} = R_H j_x B_z \quad (14.22)$$

Konstanta R_H , která nezávisí na rozměrech vzorku, se nazývá Halloovou konstantou, a představuje důležitou charakteristiku daného vodiče. Zajímavé je, že Hallovo napětí, a tedy i Hallova konstanta R_H , může mít pro různé materiály nejen různé hodnoty, ale i různá znaménko. Pokud je Hallova konstanta R_H kladná jedná se o děrovou vodivost (např. zinek). Pokud je Hallova konstanta R_H záporná jedná se o klasickou elektronovou vodivost. Hallova jevu se využívá k měření magnetického pole.

14.5 Vodivost kapalin a plynu

14.5.1 Vodivost kapalin

Je známa skutečnost, že většina skutečně čistých rozpouštědel (voda, alkohol, benzen a další) jsou velmi špatnými vodiči. V některých případech však stačí rozpustit nepatrné množství vhodné látky, aby vodivost vzrostla o několik řádů. Látky, jejichž roztoky vedou elektrický proud, se nazývají elektrolyty. Zkušenost ukázala, že některé látky zvyšují vodivost značně, zatímco jiné velmi málo. Látky prvního typu se nazývají silné elektrolyty, látky druhého typu slabé elektrolyty. Mezi silné elektrolyty se řadí především soli anorganických i organických kyselin, a dále většina anorganických kyselin a zásad (HCl , H_2SO_4 , HNO_3 , KOH , NaOH a jiné). Reprezentanty slabých elektrolytů jsou některé organické kyseliny (kyselina octová, kyselina mravenčí a další) a některé anorganické kyseliny a zásady (kyselina boritá, amoniak apod.). Zařazení dané látky do určité skupiny elektrolytů není ovšem absolutní; má smysl pouze ve vztahu k určitému rozpouštědлу. Experimenty ukazují, že rozhodujícím kritériem schopnosti rozpouštědla vytvářet vodivé roztoky je jeho permitivita. Schopnost vytvářet vodivé roztoky roste s rostoucí permitivitou. Nositelé proudu v roztocích jsou ionty elektrolytu. Je proto nutné předpokládat, že alespoň některé molekuly elektrolytu se v roztoku mohou rozštěpit na kladné ionty (kationty) a na záporné ionty (anionty). Toto štěpení molekul se nazývá elektrolytickou disociací. Jevy ke kterým dochází při vodivosti

iontového charakteru se nazývají elektrolyza. Elektrolyza může mít různé konkrétní formy závislé na materiálu elektrod a na typu elektrolytu. Měrná vodivost roztoků silně závisí na koncentraci. V oboru malých koncentrací vodivost s jejím zvyšováním vzrůstá, po dosažení určitého maxima pak dále klesá. Kromě měrné vodivosti se pro posuzování vlastností roztoků užívá tzv. molární vodivost, která číselně vyjadřuje měrnou vodivost roztoku, v němž na jednotkový objem připadá jeden mol částic realizujících vodivost. Označíme-li η molární koncentraci roztoku, tj. počet molů částic realizujících vodivost připadajících na 1 m^3 roztoku, bude mezi měrnou vodivostí γ a molární vodivostí Λ platit vztah

$$\Lambda = \frac{\gamma}{\eta} \quad (14.23)$$

Z definice molární vodivosti vyplývá, že by neměla být závislá na koncentraci roztoku, kdyby podíl všech molekul elektrolytu na vodivosti roztoku byl na koncentraci nezávislý. Experimentálně zjištěné koncentrační závislosti ? pro některé látky, molární vodivost s rostoucí koncentrací roztoku ve skutečnosti vždy klesá. Tato skutečnost může být v principu vysvětlena dvěma příčinami. Jednak se může se změnou koncentrace měnit stupeň disociace elektrolytu, jednak může na koncentraci záviset schopnost pohybu nositelů proudu. Ve skutečnosti se uplatňují oba mechanismy. První z nich nabývá převahy u slabých elektrolytů (zejména v oboru nízkých koncentrací), druhý se naopak uplatňuje především u elektrolytů silných.

Kvantitativní vztahy pro elektrolyzu se nazývají Faradayovy zákony. První Faradayův zákon říká, že v případě, kdy se na uvažované elektrodě vylučuje pouze jediný druh látky, je její množství M úměrné prošlému náboji Q

$$M = A_F Q \quad (14.24)$$

Konstanta úměrnosti A_F , charakteristická pro danou látku, se nazývá jejím elektrochemickým ekvivalentem. Druhý Faradayův zákon vyjadřuje souvislost mezi množstvími různých látek vyloučených stejným nábojem Q . Jestliže dvěma roztoky různých elektrolytů projde též elektrický náboj Q , bude poměr množství látek M_A , M_B , vyloučených na příslušných elektrodách, roven poměru jejich chemických ekvivalentů G_A , G_B . Tedy

$$\frac{M_A}{M_B} = \frac{G_A}{G_B} \quad (14.25)$$

Ze předešlého vztahu vyplývá, že k vyloučení jednoho molu chemických ekvivalentů libovolné látky je zapotřebí vždy stejný náboj F , který se nazývá Faradayovým nábojem, (někdy též, Faradayovou konstantou). Jeho hodnotu, která má bezprostřední vztah k hodnotě Avogadrově konstanty (viz. čl. 7.6.6), je třeba určit měřením. Dnes užívanou hodnotou je $F = 96485,3415\text{ C} \cdot \text{mol}^{-1}$. Náboj v roztocích je přenášen jak anionty tak kationty.

14.5.2 Vodivost plynů

Vedení proudu v plynech, které se také často nazývá elektrickým výbojem, může mít velmi rozmanité vlastnosti závislé nejen na teplotě, tlaku, na druhu plynu, na velikosti přiloženého napětí, ale také na vlastnostech elektrod toto napětí provádějících. Při průchodu proudu dostatečné hustoty může dojít téměř k úplné ionizaci molekul plynu, čímž vzniká prostředí zcela nových vlastností nazývané

plazma, které se někdy považuje za čtvrté skupenství látek. Při malých napětích nastává v plynu tzv. nesamostatný výboj, který je charakterizován velmi nízkou hustotou proudu a při zvyšování napětí přechází v některou formu tzv. samostatného výboje. Tomuto typu výboje odpovídají podstatně vyšší proudové hustoty a je zpravidla doprovázen (světelným) zářením plynu. Může mít velmi rozmanitý charakter v závislosti na konkrétních podmínkách.

Nesamostatnou vodivost plynu je možné studovat v jednoduchém uspořádání sestávajícím z dvojice elektrod umístěných ve vzájemné vzdálenosti d v prostoru vyplněném vyšetřovaným plynem. Přivedeme-li na elektrody napětí U z vnějšího zdroje a měříme-li proud I procházející obvodem v závislosti na napětí, můžeme změřit voltampérovou charakteristiku. Známe-li geometrii elektrod, můžeme určit i napěťovou závislost proudové hustoty j v daném místě. Při velmi malých napětích by proud lineárně vzrůstal se vzrůstajícím napětím, takže by byl splněn Ohmův zákon. Při dalším vzrůstu napětí by se však postupně projevovaly odchylky od Ohmova zákona, až nakonec by proud na napětí vůbec nezávisel. Teprve při dalším zvyšování napětí by se objevil nový vzrůst proudu. Další charakteristickou vlastností nesamostatného výboje je značná závislost proudové hustoty na různých vnějších vlivech. Například při ozáření plynu ultrafialovým, rentgenovým či radioaktivním zářením bychom pro danou hodnotu napětí naměřili výrazný vzrůst proudu. Kdybychom za působení konstantního záření měřili znovu závislost proudové hustoty na napětí U , naměřili bychom křivku stejného charakteru. Jak bylo již poznamenáno, je pro nesamostatný výboj charakteristická velmi nízká proudová hustota. Hustota nasyceného proudu se obvykle pohybuje v mezích $10^{-3} - 10^{-2} A \cdot m^{-2}$

Doutnavý a obloukový výboj jsou dvě nejběžnější formy stacionárního samostatného výboje. Doutnavý výboj nastává za sníženého tlaku $1 - 10^{-3} Pa$ za předpokladu, že napětí mezi elektrodami dosáhne určité kritické hodnoty U_z , nazývané zápalné napětí. Je charakterizován stacionární proudovou hustotou hodnot $10^{-1} - 10 A \cdot m^{-2}$ a je doprovázen světelným zářením plynu ve značné části výbojové dráhy, jehož spektrální složení je charakteristické pro daný plyn. Rozložení potenciálu podél výbojové dráhy je vždy nerovnoměrné. Jeho největší spád, činící téměř celou hodnotu přiloženého napětí, je zpravidla soustředěn do bezprostřední blízkosti záporné elektrody (katodový spád). Pozoruhodné je také, že rozložení potenciálu závisí nejen na druhu plynu, ale také na materiálu záporné elektrody. Podmínky pro zapálení doutnavého výboje jsou - obecně řečeno - určeny mnoha faktory. Můžeme soudit, že zápalné napětí U_z je určeno jen vlastnostmi a tlakem daného plynu a dále geometrií elektrod. Experiment ukázal, že zápalné napětí U_z je pro daný plyn za dané teploty funkcí součinu tlaku plynu p a vzdálenosti elektrod d . Tento poznatek se z historických důvodů nazývá Paschenův zákon.

Obloukový výboj je jiný typ samostatného výboje, který může vzniknout ve velmi širokém oboru tlaků. Nejznámější je jeho realizace v obloukových lampách, kde tento výboj vzniká ve vzduchu za atmosférického tlaku mezi dvojicí uhlíkových elektrod. K jeho vzniku je zapotřebí, aby se elektrody nejdříve dotkly a zahřály se jouleovým teplem na dostatečně vysokou teplotu. Po jejich oddálení pak již výboj trvale "hoří" při relativně nízkém napětí na elektrodách (20-50 V). Je charakterizován stacionární proudovou hustotou, která může dosahovat značných hodnot ($10^{-5} A \cdot m^{-2}$ a více). Jeho další charakteristikou je, že se vzrůstající proudové

vou hustotou klesá napětí na elektrodách. (Pro udržení konstantního proudu je tedy nutné, aby byl v obvodu zařazen vhodný odpor.) Obě uhlíkové elektrody se při hoření obloukového výboje silně zahřívají. Větší teplotu má elektroda kladná (3000-4000 C) a při hoření výboje se v ní vytvoří prohlubeň (kráter). Experimenty však ukazují, že pro udržení trvalého výboje není teplota této elektrody podstatná. Naopak, výboj nemůže trvale hořet, nemá-li záporná elektroda dostatečně vysokou teplotu. Další forma obloukového výboje vzniká za nižšího než atmosférického tlaku, jestliže proudová hustota překročí určitou hodnotu. Tento výboj je opět charakterizován značnou proudovou hustotou při relativně nízkém napětí na elektrodách a přechod od doutnavého k obloukovému výboji má nespojitý charakter. Ukazuje se, že za vhodných podmínek může určitá forma obloukového výboje existovat i za relativně nízké teploty obou elektrod. Volba materiálu záporné elektrody je však pro vznik těchto podmínek vždy podstatná. Uvedené experimentální poznatky ukazují, že v plynu existuje vždy určitá koncentrace nabitých částic (ionizovaných molekul nebo elektronů), které se po přiložení vnějšího elektrického pole mohou stát nositeli proudu. Tyto částice zřejmě realizují nesamostatnou vodivost (nesamostatný výboj). Dále je vidět, že při zvýšení teploty nebo za přítomnosti určitého záření se tato koncentrace nabitých částic zvyšuje. Pro udržení samostatného výboje není však vznik nositelů proudu účinkem těchto vnějších vlivů zřejmě podstatný. Je nutné předpokládat, že při samostatném výboji vznikají ve výbojové dráze mechanismy schopné produkovat značné množství nosičů proudu. Ze závislosti parametrů výboje na materiálu záporné elektrody je dále vidět, že na této elektrodě probíhají děje, které jsou pro vznik nosičů proudu podstatné. Podrobnější studium této otázky ukázalo, že jde o uvolňování elektronů z materiálu elektrody. Parametry určité konkrétní formy samostatného výboje jsou vždy těmito elektrony do značné míry ovlivněny. Další faktor, který má pro vznik a udržení samostatného výboje v plynu zásadní význam, je existence tzv. nepružných srážek, při nichž atom (či molekula) může pohltit určité množství energie a může být i ionizován. Přímý experimentální důkaz existence nepružných srážek a možnost ionizace molekul při těchto srážkách byl podán experimenty J. Francka a G. Hertze. Uvedené experimenty prokázaly přímo i existenci stacionárních stavů atomů s diskrétními hodnotami energie a významně tak přispěly k formulaci výchozích postulátů kvantové mechaniky.

14.6 Dielektrické a magnetické vlastnosti látek

Vliv elektrického a magnetického pole na látky je popsán vektory elektrické polarizace $P_e(\vec{r})$ a magnetické polarizace $P_m(\vec{r})$ (respektive magnetizace $M(\vec{r})$)

14.6.1 Dielektrika

Dielektrika jsou charakterizována velkou hodnotou relativní permitivity ϵ_r . Pro pochopení mechanismů polarizace látek má velký význam studium teplotní závislosti permitivity. V případě lineárních dielektrik lze tuto závislost obvykle dobře vyjádřit vztahem

$$\epsilon_r = \epsilon_{r,n} + \frac{C}{T} \quad (14.26)$$

ve kterém T je absolutní teplota a $\varepsilon_{r,n}$, C teplotně nezávislé konstanty. Permittivita tedy jeví přímkovou závislost ve tvaru $1/T$. Jednotlivé členy na pravé straně rovnice zřejmě souvisí s různými mechanismy polarizace. Látky s nízkou celkovou hodnotou permitivity vykazují rovněž malou závislost na teplotě. Krystaly s jinou než kubickou symetrií mohou být dielektricky anizotropní. Elektrická susceptibilita (respektive permitivita) je symetrický tenzor druhého řádu. Pro úplný popis chování takových látek v elektrickém poli je zapotřebí obecně udat tři hlavní hodnoty tenzoru permitivity; v případě struktur s osovou symetrií jsou dvě hlavní hodnoty stejné, takže se počet potřebných údajů redukuje na dva. Pro popis časově proměnného elektrického pole v lineárním dielektriku je však třeba zkoumat i vlastnosti dielektrika v závislosti na rychlosti časových změn pole. Malou co do počtu, ale důležitou skupinu dielektrik tvoří tzv. feroelektrické látky. Pro ně je charakteristický anomální vztah mezi vektorem polarizace a intenzitou pole. Feroelektrické chování se vyskytuje pouze v určitém teplotním oboru, který je pro danou látku charakteristický, teplota T_C omezující uvedený obor se nazývá feroelektrickou Curieovou teplotou. Charakteristická závislost vektoru polarizace na intenzitě pole je pro feroelektrické látky dána tzv. feroelektrickou hysterezní smyčkou. Průběh elektrické polarizace feroelektrik při cyklickém polarizování je podobný chování feromagnetik. Feroelektrický stav je charakterizován tím, že jednotlivé elementární buňky krystalu mají nenulový elektrický dipólový moment. V nulovém nebo malém elektrickém poli jsou tyto dipólové momenty orientovány v určitých, krystalograficky význačných směrech. Celý objem krystalu se rozpadá na určitý počet oblastí, které se nazývají feroelektrické domény, z nichž každá je charakterizovaná určitou orientací výsledného dipólového momentu. Výsledný elektrický moment vzorku je pak dán vektorovým součtem momentů jednotlivých domén. Vnější elektrické pole relativně malých hodnot může značně ovlivnit rozdělení domén a vyvolat tak značně velkou výslednou polarizaci. Nad feroelektrickou Curieovou teplotou přechází feroelektrická látka do tzv. paraelektrického stavu, který je charakterizován silným poklesem permitivity při zvyšování teploty. Chování permitivity v paraelektrickém stavu je zpravidla možné velmi dobře popsat vztahem

$$\varepsilon = \frac{\xi}{T - \Theta} \quad (14.27)$$

v němž ξ je tzv. feroelektrická Curieova konstanta charakteristická pro daný materiál a Θ parametr blízký Curieově teplotě T_C . Kromě feroelektrik existuje ještě jiný typ látek, které mohou mít trvalý elektrický moment. Látky tohoto druhu se nazývají elektrety. Jsou obvykle tvořeny směsí organických pryskyřic, popř. vosků, s dalšími organickými nebo anorganickými dielektriky. "Trvalý" elektrický moment lze například získat při tuhnutí této směsi v silném elektrickém poli, neboť vlastní elektrické momenty některých molekul (popřípadě makroskopických částic) zůstanou po zatuhnutí orientovány ve směru pole. Takto získaný nerovnovážený stav pak může být v látce zachován po velmi dlouhou dobu. Každý feroelektrický krystal vykazuje rovněž tzv. piezoelektrický jev spočívající v tom, že elastickou deformací se mění elektrická polarizace krystalu. Feroelektrické krystaly vykazují i tzv. elektrostriktici, což je jev inverzní k jevu piezoelektrickému: při změně elektrického pole, které má za následek změnu elektrické polarizace, dochází ke vzniku elektrostriktční deformace. Piezoelektrické chování však mohou jevit i krystaly, které nejsou feroelektrické. Klasickým představitelem takových

látek je krystalický křemen. Fenomenologicky lze tento jev popsat lineárním vztahem mezi deformující silou a vzniklou elektrickou polarizací. Příslušná konstanta úměrnosti se nazývá piezoelektrickou konstantou. Dielektrické vlastnosti látek lze vyložit na základě popisu mechanismů umožňujících vznik elektrických momentů atomů, molekul či elementárních buněk krystalů působením vnějšího elektrického pole, popř. jiných sil. Tyto procesy se popisují veličinou nazývanou polarizovatelnost a mohou mít různou fyzikální povahu. Existující tři základní typy takových mechanismů: elektronová polarizovatelnost, iontová polarizovatelnost a orientační dipolární polarizovatelnost. Elektronová polarizovatelnost zahrnuje deformaci elektronového obalu atomu v elektrickém pol. iontovou polarizovatelností se rozumí vzájemné posunutí jednotlivých iontů například v molekule, čímž rovněž vzniká změna jejího dipólového momentu. Oba uvedené mechanismy nastávají ve všech typech látek, tedy i v látkách nepolárních. Konečně orientační polarizovatelností rozumíme změnu prostorové orientace vlastních momentů (například polárních molekul) účinkem vnějšího pole. Přesto, že makroskopické projevy feromagnetik jsou do značné míry podobné chování feromagnetik, je fyzikální podstata obou jevů zásadně odlišná, neboť vlastní elektrické momenty nemohou (na rozdíl od momentů magnetických) vznikat na atomové úrovni !!!

14.6.2 Magnetické vlastnosti látek

Pro diamagnetika i paramagnetika jsou charakteristické lineární materiálové vztahy, přičemž diamagnetika se vyznačují zápornou magnetickou susceptibilitou χ_m (a tedy relativní permeabilitou $\mu_r < 1$), zatímco paramagnetika mají kladnou magnetickou susceptibilitu (a relativní permeabilitu $\mu_r > 1$). Hodnoty relativní permeability obou typů látek se přitom jen málo liší od jedné. Susceptibilita diamagnetik je velmi málo závislá na teplotě, podobně susceptibilita některých paramagnetických kovů. Naproti tomu jiné kovy (například Pd, Pt aj.) a též téměř všechna nekovová paramagnetika jeví výraznou teplotní závislost susceptibility. Pro nekovová paramagnetika máme

$$\xi_m = \frac{C}{T} \quad (14.28)$$

Diamagnetismus je obecný jev, jehož podstata spočívá ve změnách elektronových stavů vyvolaných vnějším magnetickým polem, které mohou být intuitivně chápány jako důsledek zákona elektromagnetické indukce, podle něhož změny vnějšího magnetického pole indukují v látce proudy vytvářející vlastní magnetické pole působící proti těmto změnám. Při vložení do vnějšího magnetického pole tedy v celém objemu látky vznikají dodatečné magnetické momenty, které se snaží vnější magnetické pole kompenzovat. Vzhledem k tomu, že jev elektromagnetické indukce platí zcela obecně, je i diamagnetický jev obecnou vlastností všech látek. V některých případech však může být překryt projevy vlastních magnetických momentů některých elektronů, které jsou zdrojem paramagnetismu. Diamagnetické látky jsou zpravidla nejméně magneticky aktivní.

Paramagnetické vlastnosti jsou na rozdíl od diamagnetismu dány nevykompenzovanými magnetickými momenty některých elektronů v atomu. Paramagnetické chování tedy jeví látky obsahující atomy či molekuly s částečně zaplněnými elektronovými podslupkami. Problém paramagnetismu elektronového plynu vyřešil W. Pauli, který vzal v úvahu vlastnosti Fermiho-Diracova rozdělení. nější magne-

tické pole sice energeticky zvýhodňuje určitou (paralelní) orientaci magnetických momentů elektronů, většina elektronů však nemůže tuto výhodnější orientaci zaujmout, neboť pro energie podstatně nižší, než je Fermiho energie, jsou již všechny tyto stavy obsazeny. Na vnější magnetická pole mohou reagovat jen elektrony, jejichž energie je blízká Fermiho energii, přičemž je zřejmé, že se vzrůstající teplotou počet takových elektronů vzrůstá. Potom pro odhad paramagnetické susceptibility elektronového plynu dostaneme teplotně nezávislý výraz

$$\chi_{m,p} = \mu_0 \frac{n_0 m^2}{k_B T_F} \quad (14.29)$$

kteřá se nazývá Pauliho paramagnetickou susceptibilitou elektronového plynu. Na základě právě vyložených skutečností je možné podat hrubý a do značné míry zjednodušený obraz o magnetických vlastnostech kovů, který však správně vystihuje jejich fyzikální podstatu. Výsledná magnetická susceptibilita je dána součtem příspěvků jednotlivých typů elektronů. U všech kovů se vyskytuje paramagnetismus vodivostních elektronů daný vztahem (7.16) a diamagnetismus lokalizovaných elektronů vnitřních zaplněných slupek.

Existuje několik struktur magnetického uspořádání. Nejznámější jsou feromagnetická struktura kdy jsou magnetické momenty uspořádané paralelně a antiferomagnetické uspořádání kdy jsou magneticky orientovány opačně. Magnetické uspořádání existuje vždy při teplotách nižších, než je jistá kritická teplota. V případě feromagnetik mluvíme o Curieově teplotě T_C , v případě ferimagnetik a antiferomagnetik o teplotě Néelově T_N . Nad Curieovou, popř. Néelovou, teplotou jsou tyto látky paramagnetické a jejich magnetická susceptibilita s rostoucí teplotou klesá. S výjimkou bezprostředního okolí a pod kritickou teplotou často splňují tzv. Curieův-Weissův zákon

$$\chi = \frac{C}{T - \Theta} \quad (14.30)$$

Θ má rozměr teploty a neliší se od teplot přechodů. Spontánní magnetizace M_s je základní parametr feromagnetika, který popisuje stav jeho magnetického uspořádání.

15. Experimentální základy kvantové hypotézy

15.1 Historický úvod

Na konci 19. století se řada fyziků domnívala, že pomocí tehdy známých zákonů lze objasnit všechny fyzikální děje. Popis se dělil na dvě skupiny. Na jedné straně pomocí rovnic klasické mechaniky byl popisován pohyb částic. Na druhé straně se fyzikální děje popisovaly pomocí vln, např. v mechanice kontinua, teorii kmitů strun nebo teorii elektromagnetických vln (Maxwellovy rovnice 1861).

Dnes považujeme za charakteristický rys mikrosvěta diskrétnost veličin - kvantování. První významnou záhadou byla **čárová (diskrétní) spektra** atomů a molekul (Balmerova série atomu vodíku byla objevena již v roce 1885), která poukazuje na diskrétnost energie. Postupně se začaly objevovat další jevy, které se nedaly popsat klasickou mechanikou. Tzv. "krize klasické mechaniky" se začala projevovat začátkem 20. století, kdy se vědci snažili objasnit **spektrum absolutně černého tělesa**. V tomto případě klasická mechanika zcela selhávala, a proto došel Max Planck v roce 1900 k závěru, že pozorovatelné spektrum lze objasnit pouze za předpokladu, že absolutně černé těleso a elektromagnetické záření, s nímž je v rovnováze, si vyměňují energii v jakýchsi dávkách či kvantech

$$E = h\nu = \hbar\omega. \quad (15.1)$$

Tato kvanta se nazývají **fotony**. V roce 1905 byl Albertem Einsteinem objeven **fotoefekt**, při kterém se předává energie fotonu elektronu v pevné látce. Později byl zaveden vztah i pro hybnost fotonu

$$p = \hbar k, \quad (15.2)$$

kde k je vlnový vektor. ($k = 2\pi/\lambda$, $c = \lambda\nu$, $\omega = 2\pi\nu$). Einstein se také věnoval problematice měrných tepel. Předpokládal, že kmity krystalů jsou násobky $\hbar\omega$.

Na přelomu 19. a 20. století se začalo uvažovat o vnitřní struktuře atomu. J.J. Thomsonův **puďingový model atomu** vyvrátil v roce 1911 Ernest Rutherford zkoumáním rozptylu α částic na atomech. Rutherfordovy objevy vedly k **planetárnímu modelu atomu**, který však nedokázal objasnit stabilitu atomů. Podle klasické mechaniky by měl obíhající elektron vyzařovat svou energii a časem zkolabovat do jádra. Podle Bohrovy teorie existují stabilní stavy, ve kterých nedochází ke kolapsu. V těchto stavech je pohyb elektronu dán **Wilson-Sommerfeldovou kvantovací podmínkou** (1915)

$$\oint p dq = nh, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (15.3)$$

Pro atom vodíku odvodil Bohr energii mezi stavy

$$E_n = -\frac{1}{n^2} Ry, \quad (15.4)$$

kde Ry je jeden Rydberg. Bohrova teorie bohužel selhala u složitějších systémů, než je vodíku podobný atom, s více než jedním elektronem.

Comptonův jev (1922), při kterém je zkoumán rozptyl Roentgenova záření na elektronech, byl důkazem existence kvant elektromagnetické energie. V roce 1924 Luis de Broglie přišel s myšlenkou, že **korpuskulárně-vlnové vlastnosti** a vztahy 15.1,15.2 dosud používané pro elektromagnetické záření lze přenést i na volný elektron. Tato myšlenka byla potvrzena v roce 1926 studiem rozptylu elektronů na krystalech. skala

15.2 Planckova kvantová hypotéza

Absolutně černé těleso je ideální těleso, jeho název je odvozen z jeho vlastnosti, že dokonale pohlcuje veškeré záření. Zároveň je to také ideální zářič, který vyzařuje více energie, než jakékoliv těleso. Absolutně černé těleso lze modelovat dutým tělesem s černými stěnami, ve kterém je malý otvor. Po zahřátí stěn v uzavřené dutině, po určitém čase nastane rovnováha mezi vyzařováním a pohlcováním záření. Nahlížíme-li do dutiny malým otvorem, pozorujeme spektrum elektromagnetického záření. V 19. století bylo zjištěno, že spektrum závisí na teplotě. Rayleigh s Jeansem se snažili nalézt závislost spektrální hustoty intenzity vyzařování na vlnové délce. Jejich vztah spektrální hustoty intenzity vyzařování je úměrný $1/\lambda^4$ a pro malé vlnové délky roste do nekonečna. Toto bylo v rozporu s experimentálním zjištěním, že při menších vlnových délkách, než je vlnová délka maximální intenzity, těleso téměř nevyzařuje. Tento rozpor se označuje jako "ultrafialová katastrofa" a až na začátku 20. století se M. Planckovi povedlo vysvětlit záření absolutně černého tělesa. Podle teorie, kterou vyslovil v roce 1900, černé těleso nevyzařuje energii spojitě, ale po určitých kvantech (Nobelovu cenu získal v roce 1918 "in recognition of the services he rendered to the advancement of Physics by his discovery of energy quanta"). Energie kvanta energie je úměrná frekvenci $E = hf = h\nu$. Později bylo pro kvantum energie záření zavedeno označení foton. Kvantová hypotéza tedy říká, že energie elektromagnetického záření nemůže být libovolně malá, neboť je kvantovaná a její kvantum závisí na frekvenci záření. Planck tuto hypotézu považoval za matematický požadavek při odvození vzorce pro černé těleso. Velkého významu kvantová hypotéza začala nabývat, když se ukázalo, že pomocí ní lze vysvětlit fotoelektrický jev.

15.3 Fotoelektrický jev, foton

Fotoelektrický jev je jev, při kterém jsou uvolňovány (emitovány) elektrony z látky v důsledku absorpce elektromagnetického záření. Z hlediska způsobu vzniku elektronů vlivem dopadajícího elektromagnetického záření se rozlišuje

1. vnější fotoefekt - elektrony jsou uvolňovány z povrchu materiálu
2. vnitřní fotoefekt - elektrony jsou uvolňovány uvnitř materiálu (polovodiče)

Vnější fotoefekt lze zkoumat např. pomocí fotonky. Záření dopadá okénkem na fotokatodu a uvolňuje z ní fotoelektrony, které putují k anodě a v obvodu vzniká proud. Podle klasické fyziky by s rostoucí intenzitou dopadajícího záření se měly elektrony uvolňovat snadněji a měly by mít vyšší energii. Experimenty, ale prokázaly, že na intenzitě záření závisí pouze množství uvolněných elektronů

a nikoliv energie, která je určena pouze frekvencí (vlnovou délkou) použitého záření. Také bylo zjištěno, že existuje nějaká mezní vlnová délka, nad kterou už se elektrony neuvolňují. Tato mezní vlnová délka ovšem závisí na ozařované látce.

Fotoefekt se podařil vysvětlit v roce 1905 Albertu Einsteinovi a v roce 1921 mu byla udělena Nobelova cena "for his services to Theoretical Physics, and especially for his discovery of the law of the photoelectric effect". Einstein vyšel z Planckovy kvantové hypotézy a představy, že elektromagnetická vlna o frekvenci f se chová jako soubor částic (světelných kvant), z nichž má každá svou energii a hybnost. Tyto částice se pohybují stále rychlostí světla. Podle teorie relativity mají nulovou klidovou hmotnost a jejich relativistická hmotnost je dána výrazem

$$m = \frac{E}{c^2}. \quad (15.5)$$

Jejich hybnost

$$p = \frac{E}{c} = mc. \quad (15.6)$$

Tyto částice byly G.N. Lewisem v roce 1926 nazvány fotony.

Při fotoefektu každé kvantum záření předá energii vždy jen jednomu elektronu. Ta se spotřebuje na uvolnění elektronu z materiálu a zbytek je předán elektronu ve formě kinetické energie. Tento "zákon zachování energie" se nazývá Einsteinovou rovnicí

$$hf = \text{dodaná vazebná energie} + \text{kinetická energie dodaná elektronu} \quad (15.7)$$

Z rovnice 15.7 lze pak experimentálně určit Planckovu konstantu měřením závislosti kinetické energie na frekvenci dopadajícího záření.

15.4 Částicové vlastnosti světla a vlnové vlastnosti částic

Einstein jako první začal považovat kvanta elektromagnetického záření za skutečné částice. První přímý a převládající důkaz této částicové povahy fotonů podal v roce 1922 Arthur Compton (Nobelova cena 1927 "for his discovery of the effect named after him"), který experimentoval s rentgenovým zářením. Rovnoběžný svazek záření nechal dopadat na uhlíkovou destičku a měřil frekvenci záření rozptýleného pod různými úhly. Kvanta záření se přitom chovala jako malé kuličky, které se srážely s kuličkami (elektrony) v destičce. Vzhledem k vysoké energii fotonů, mnohem převyšující vazbovou energii, lze elektrony považovat za volné částice. Rozptyl fotonů na elektronech se nazývá Comptonův jev.

Už Newton začal uvažovat o částicové povaze světla, ale nakonec v 19. století byla všeobecně přijata teorie vlnová, protože se tehdy hodně experimentovalo s difrakcí (interferencí), která nemůže být vysvětlena korpuskulární (částicovou) teorií. Ale později přišel Planck s Einsteinem a Comptonem...

Proto bylo nutné připustit, že foton se chová jako částice a vlna zároveň (korpuskulárně vlnový dualismus). Se zkracováním vlnové délky se více projevuje částicový charakter.

15.5 De Broglieova hypotéza

V roce 1924 přišel Louis de Broglie s velmi odvážným nápadem (který se neopíral o žádné experimenty), když se kvantum elektromagnetického záření může chovat jako částice, proč by se nám známé částice (elektrony, neutrony, protony, atomy,...) nemohly chovat jako vlny. Přičemž energii a hybnost zavedl analogicky jako pro fotony 15.1,15.2. K potvrzení bylo třeba ověřit vlnové vlastnosti jako je difrakce a interference. Experimenty prováděli nezávisle C.J. Davisson, G.P. Thomson (oba Nobelova cena 1937 "for their experimental discovery of the diffraction of electrons by crystals") a L.H. Germer (spolupracoval s Davissonem). V Davissonově - Germerově experimentu, byl použit krystal se srovnatelnou mřížkovou konstantou jako je vlnová délka elektronu (Vlnová délka elektronu se při napětích v řádech desítek voltů pohybuje v řádu 10^{-10} m). Experimenty dopadly pozitivně, tedy byly pozorovány interferenční maxima a tím byl vlnově korpuskulární dualismus prokázán i pro částice.

Literatura

- [1] Lubomír Skála, *Úvod do kvantové mechaniky.*, 2011.
- [2] <http://fyzika.jreichl.com/>
- [3] en.wikipedia.org

16. Formalismus kvantové teorie

Zadání:

Postuláty kvantové mechaniky. Vlnová funkce. Lineární a hermitovské operátory. Reprezentace měřitelných veličin. Kvantování fyzikálních veličin. Časová a nečasová Schrödingerova rovnice. Relace neurčitosti. Integrály pohybu.

16.1 Postuláty kvantové mechaniky

Základní předpoklady QM lze shrnout do několika postulátů.

16.1.1 Postulát o vlnové funkci

Veškeré informace o stavu kvantově-mechanického systému (částice) jsou popsány vlnovou funkcí $\psi(\mathbf{r}, t)$, což je komplexní funkce reálných proměnných. Vlnová funkce musí být:

- jednoznačná
- konečná
- spojitá
- kvadraticky integrabilní¹
- při konečných změnách potenciálu musí mít spojitě parciální derivace podle prostorových proměnných²

Vlnová funkce uvedená ve znění postulátu se týká pouze jedné částice bez vnitřních stupňů volnosti (např. spin). Zobecnění na celý systém částic se provede tak, že vlnová funkce bude záviset na souřadnicích všech částic a na čase, popřípadě na dalších vnitřních stupních volnosti (např. se přidá z -ová komponenta spinu).

Fyzikální interpretace vlnové funkce spočívá v tom, že kvadrát její absolutní hodnoty udává *hustotu pravděpodobnosti* výskytu částice v místě \mathbf{r} a čase t

$$\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \psi^* \psi$$

Pravděpodobnost nalézení částice v objemovém elementu $dV = dx dy dz$ v bodě \mathbf{r} a čase t je tudíž rovna

$$d\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV$$

A jelikož pravděpodobnost výskytu částice v libovolném místě prostoru je rovna jedné, plyne odtud normovací podmínka na vlnovou funkci

$$\int |\psi|^2 dV = 1$$

¹až na určité výjimky, např. volná částice

²souvisí s požadavkem spojitosti hustoty toku pravděpodobnosti v rovnici kontinuity

kde integrace probíhá přes celý prostor. Pokud vlnová funkce tuto podmínku nesplňuje, je třeba ji vynásobit vhodnou multiplikatívní normovací konstantou. Z této podmínky plyne požadavek na kvadratickou integrabilitu vlnové funkce. Ne vždy však vlnovou funkci normujeme na jedničku. Například v případě volné částice můžeme normovat na Diracovu δ -funkci, popř. na konečný objem³.

Vlnovou funkci mohou tedy chápat jako *amplitudu hustoty pravděpodobnosti* (výskytu částice). Tato pravděpodobnostní interpretace, která je součástí tzv. Kodaňské interpretace QM, si žádá zavedení obdoby statistického souboru, tedy *kvantového souboru*. Tím rozumíme soubor o nekonečném (velmi velkém) počtu jednotlivých částic, které jsou navzájem totožné, popsány stejnou vlnovou funkcí a na kterých provádíme měření. Veličina dp potom udává relativní počet případů, kdy při měření polohy částice nalezneme některou z nich v objemu dV . Měření na kvantovém souboru si můžeme představit také jako opakované měření na jediném systému (částici), který po každém měření převedeme do stavu odpovídajícímu uvažované vlnové funkci, tj. do stavu stejného jako před měřením.

Z matematického hlediska lze vlnovou funkci považovat za vektor v Hilbertově prostoru⁴ kvadraticky integrabilních funkcí se skalárním součinem definovaným vztahem

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \int \psi^*(\mathbf{r}, t) \varphi(\mathbf{r}, t) dV$$

kde ψ a φ jsou vlnové funkce.

Kvantová mechanika je, na rozdíl od klasické mechaniky, teorií *nelokální*. K popsání stavu částic je třeba znát vlnovou funkci v celém prostoru a lze očekávat, že se změní, pokud dojde ke změně v uspořádání experimentu (např. uzavření jedné štěrbin v dvojštěrbinovém experimentu).

16.1.2 Postulát o operátorech

Každé fyzikální veličině A , kterou můžeme pro danou částici naměřit, je přiřazen lineární⁵ hermitovský⁶ operátor \hat{A} , který působí na vlnovou funkci a jehož vlastní funkce tvoří úplný systém.

³např. Skála, str. 38

⁴Komplexní lineární vektorový prostor, který je separabilní, úplný a v němž je definován skalární součin.

⁵Operátor \hat{A} je lineární, splňuje-li podmínku

$$\hat{A}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\hat{A}\psi_1 + c_2\hat{A}\psi_2$$

kde c_1, c_2 jsou libovolné komplexní konstanty a ψ_1, ψ_2 libovolné funkce z prostoru, v němž operátor \hat{A} působí.

⁶Operátor \hat{A} nazveme hermitovským, platí-li

$$\langle \psi | \hat{A} \varphi \rangle = \langle \hat{A} \psi | \varphi \rangle$$

pro všechny funkce ψ a φ z jeho definičního oboru.

Linearitu operátorů požadujeme kvůli principu superpozice vlnových funkcí⁷, který je v souladu s linearitou Schrödingerovy rovnice. Hermitovské operátory jsou z fyzikálního hlediska zajímavé tím, že mají reálná vlastní čísla, což je významné z hlediska měření fyzikálních veličin. V QM se zavádí i nehermitovské operátory (např. kreační a anihilační), které však nerepresentují měřitelné veličiny.

- operátor kartézských souřadnic:

$$\hat{\mathbf{r}}|\psi\rangle = \mathbf{r}|\psi\rangle$$

$$\text{kde } \mathbf{r} = (x, y, z)$$

- operátor hybnosti:

$$\hat{\mathbf{p}}|\psi\rangle = -i\hbar\nabla|\psi\rangle$$

$$\text{kde } \mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$$

Operátory jiných měřitelných veličin, které mají klasickou analogii (např. moment hybnosti $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$), se zpravidla získají tak, že do klasického vzorce dosadíme operátory hybnosti a polohy a výraz prostě spočítáme. Tento postup ale někdy selhává. To v takovém případě, je-li klasická veličina A dána součinem dvou veličin B a C , jejichž operátory nekomutují, tj. $[B, C] = BC - CB \neq 0$. Typickým příkladem je operátor kartézských souřadnic a impulzu, protože platí

$$[x, p_x] = i\hbar$$

V takovém případě prvně vztah udávající klasickou veličinu symetrizujeme, a pak až do něj dosadíme operátory. Tedy když nevíme, zda použít AB nebo BA , použijeme zlatou střední cestu: $\frac{1}{2}(AB + BA)$.

Existují ale i veličiny, které nemají klasickou analogii (např. spin). Takovéto operátory se zavádí samostatně, nezávisle na klasické fyzice.

16.1.3 Postulát o kvantování

Jediné hodnoty, které může měřitelná fyzikální veličina A při jednotlivých měřeních nabývat, jsou vlastní čísla A_n odpovídajícího operátoru \hat{A}

$$\hat{A}\psi_n = A_n\psi_n \quad (16.1)$$

Je-li navíc systém popsán v okamžiku měření normovanou vlnovou funkcí ψ , pak výsledkem měření na odpovídajícím kvantověmechanickém souboru je střední hodnota veličiny A daná vztahem:

$$\bar{A} = \langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \int \psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{A} \psi(\mathbf{r}, t) dV$$

Souvislost výsledků jednotlivých měření A_n veličiny A s její střední hodnotou \bar{A} je dána vztahem

$$\bar{A} = \sum_n p_n A_n \quad (16.2)$$

⁷Jsou-li ψ_1, ψ_2 vlnové funkce daného fyzikálního systému, pak i funkce $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$, kde c_1 a c_2 jsou libovolná komplexní čísla, je vlnovou funkcí tohoto systému.

kde p_n značí pravděpodobnost naměření hodnoty A_n .

Předpokládejme, že vlastní funkce ψ_n operátoru \hat{A} tvoří bázi příslušného Hilbertova prostoru a ta je navíc ortonormální, tj. $\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{mn}$. Pak lze libovolnou funkci ψ z tohoto prostoru vyjádřit rozvojem $\psi = \sum_n c_n \psi_n$, kde $c_n = \langle \psi_n | \psi \rangle$ je koeficient rozvoje vektoru ψ do báze vektorů ψ_n . Dosadíme-li toto vyjádření do definice střední hodnoty, uvážíme vztah (16.1) a relace ortonormality, dostaneme

$$\bar{A} = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_m c_m^* \langle \psi_m | \hat{A} \sum_n c_n | \psi_n \rangle = \sum_{m,n} c_m^* c_n A_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle = \sum_n |c_n|^2 A_n$$

Porovnáním se vztahem (16.2) vidíme, že pravděpodobnost naměření hodnoty A_n je při známé normované vlnové funkci ψ dána výrazem $p_n = |c_n|^2$ kde c_n je koeficient rozvoje ψ do ψ_n .

Všimněme si, že z veličin dostupných při měření, tj. A_n a p_n nelze v obecném případě zpětně určit fáze koeficientů c_n , tj. ani vlnovou funkci ψ .

16.1.4 Postulát o redukci vlnové funkce

Měření fyzikální veličiny A s výsledkem měření A_n , kde A_n je vlastní číslo odpovídající operátoru \hat{A} , převádí měřený systém do stavu s vlnovou funkcí ψ_n , která je vlastní funkcí operátoru \hat{A} s vlastním číslem A_n .

Jinak řečeno, ať byla před měřením vlnová funkce systému jakákoli, bezprostředně po měření veličiny A je systém v novém stavu popsaném vlnovou funkcí ψ_n , pro niž platí

$$\hat{A}\psi_n = A_n\psi_n$$

Při měření tedy nedochází ke změně vlnové funkce pouze tehdy, je-li systém v okamžiku měření již v některém z vlastních stavů operátoru \hat{A} .

Pokud chci změřit současně několik veličin, musí být vlnová funkce ψ_n vlastní funkcí všech operátorů reprezentujících měřené veličiny. Tyto operátory tedy musí komutovat, protože pouze komutující operátory mají společný systém vlastních funkcí.

Může se stát, že vlastní číslo A_n příslušející vlastní funkci ψ_n , která popisuje stav bezprostředně po měření veličiny A je degenerované (tedy jednomu vlastnímu číslu n přísluší několik, třeba k , vlastních funkcí). Potom vlastní funkce ψ_n není jednoznačně určena a my o ní můžeme říct jenom to, že náleží do lineárního podprostoru o dimenzi k , jehož báze vektory jsou funkce ψ_i , kde $i = 1, 2, \dots, k$. Abychom určili vlastní funkci ψ_n , přidáváme měření další veličiny, B , které provádíme současně s prvním (A). Vlnová funkce tak bude vlastní funkcí operátorů \hat{A} i \hat{B} , které tedy ovšem musí komutovat. Tímto způsobem přidáváme další měření dalších veličin, jejichž operátory komutují se všemi ostatními, až dosáhneme jednoznačného určení vlnové funkce ψ_n , tedy společnému systému vlastních funkcí všech operátorů. Takovýto soubor všech kompatibilních operátorů nazveme *úplným systémem*.

Narozdíl od klasické mechaniky nelze z vlastní funkce po měření určit, v jakém stavu se částice nacházela před měřením. Redukce vlnové funkce je totiž nekausální jev, čistě pravděpodobnostní. Naopak kausálním jevem je vývoj vlnové funkce v čase, což popisuje evoluční pohybová rovnice, tzv. časová Schrödingerova rovnice.

16.1.5 Postulát o časové Schrödingerově rovnici

Je-li v $t = t_0$ systém ve stavu popsaném vlnovou funkcí $\psi(\mathbf{r}, t = t_0)$, pak je jeho následný časový vývoj dán časovou Schrödingerovou rovnicí

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(\mathbf{r}, t)$$

kde \hat{H} je hamiltonián (evoluční operátor). Jedná se o parciální diferenciální rovnici prvního řádu v čase, k jejímu řešení tedy potřebujeme znát (jednu) počáteční podmínku, $\psi(\mathbf{r}, t = t_0)$, a to v celém prostoru. SR nám pak umožňuje určit vlnovou funkci pro $t > t_0$.

Pro konzervativní systémy s potenciální energií $V(\mathbf{r})$ lze časovou SR získat formálně tak, že v klasickém výrazu pro celkovou energii $E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V$ provedeme záměnu $E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ a $\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar \nabla$. Výsledná operátorová rovnost musí platit ve smyslu působení operátorů na vlnovou funkci, tj. musí platit SR.

Vzhledem k tomu, že hamiltonián \hat{H} i operátor $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ jsou lineární, je lineárním i operátor Schrödingerovy rovnice $(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H})$, z čehož vyplývá princip superpozice.

16.1.6 Nečasová Schrödingerova rovnice

Předpokládáme-li, že vývoj systému v čase je dán časovou SR, kde \hat{H} je *časově nezávislý hamiltonián* odpovídající pohybu částice v časově nezávislých vnějších polích, můžeme provést separaci proměnných a uvažovat tak řešení dané rovnice ve tvaru

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})\varphi(t)$$

Dosadíme-li tuto vlnovou funkci do časové SR, dostaneme

$$i\hbar \frac{\frac{\partial \varphi(t)}{\partial t}}{\varphi(t)} = \frac{\hat{H}\psi(\mathbf{r})}{\psi(\mathbf{r})} = E$$

Odtud získáme dvě rovnice

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (16.3)$$

$$i\hbar \frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} = E\varphi(t) \quad (16.4)$$

z nichž první je tzv. **nečasová Schrödingerova rovnice**. Po určení vlastních energií E_n a vlastních funkcí ψ_n z rovnice (16.3) pro $n = 1, 2, \dots$ můžeme integrovat druhou rovnici (16.4) s výsledkem $\varphi_n(t) = Ne^{E_n t / (i\hbar)}$, kde N je normovací konstanta. Obvykle se klade rovna jedné, což znamená, že za předpokladu plat-

nosti normování

$$\int |\psi_n(\mathbf{r})|^2 dV = 1 \quad (16.5)$$

nečasová část vlnové funkce $\psi_n(\mathbf{r})$ určuje časově nezávislou hustotu pravděpodobnosti

$$\rho_n(\mathbf{r}, t) = \rho_n(\mathbf{r}) = |\psi_n(\mathbf{r})|^2 \quad (16.6)$$

Stavy popsané vlnovými funkcemi

$$\psi_n(\mathbf{r}, t) = \psi_n(\mathbf{r})e^{E_n t/(i\hbar)}$$

se nazývají **stacionárními stavy**.

16.1.6.1 Vlastnosti stacionárních stavů

1. Hustota pravděpodobnosti (16.6) a norma vlnové funkce (16.5) nezávisí na čase.
2. Střední hodnota libovlnného časově nezávislého operátoru \hat{A} ve stacionárních stavech ψ_n na čase nezávisí

$$\langle \hat{A} \rangle_n = \int \psi_n^*(\mathbf{r}, t) \hat{A} \psi_n(\mathbf{r}, t) dV = \int \psi_n^*(\mathbf{r}) \hat{A} \psi_n(\mathbf{r}) dV$$

3. Pro stacionární stavy je časově nezávislá i hustota toku pravděpodobnosti \mathbf{j} .
4. Obecné nestacionární řešení časové SR s časově nezávislým hamiltoniánem lze vyjádřit pomocí rozvoje do ortonormálních stacionárních stavů

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n \psi_n(\mathbf{r}) e^{E_n t/(i\hbar)}$$

kde c_n jsou komplexní časově nezávislé koeficienty dané počáteční podmínkou $\psi(\mathbf{r}, t = t_0)$. Střední hodnota energie v takových stavech na čase nezávisí

$$\langle \hat{H} \rangle = \int \psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{H} \psi(\mathbf{r}, t) dV = \int \psi_n^*(\mathbf{r}) \hat{H} \psi_n(\mathbf{r}) dV$$

16.2 Relace neurčitosti

Uvažujme, že kvantový systém je v obecném stavu popsaném vlnovou funkcí $|\psi\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle$, která splňuje normovací podmínku $\langle \psi | \psi \rangle = 1$. Měříme veličinu A . Při naměření hodnoty a_n se stav redukuje na jeden z vlastních stavů ψ_n operátoru \hat{A} . Střední hodnota, kterou z měření na kvantovém souboru dostaneme, je tedy

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_n |c_n|^2 a_n$$

kde $|c_n|^2$ udává pravděpodobnost, že systém při měření najdeme ve stavu ψ_n . Střední kvadratická odchylka je pak rovna

$$\left\langle \left(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \right)^2 \right\rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 = \langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle = \sum_n |c_n|^2 (a_n - \langle \hat{A} \rangle)^2 \geq 0$$

V obecném případě je střední kvadratická odchylka různá od nuly. Říkáme, že veličina A nemá ve stavu ψ_n ostrou hodnotu. Rovnost v posledním výrazu nastane pouze tehdy, když je kvantový systém už před měřením ve vlastním stavu

ψ_m . Potom $|c_n|^2 = p_n = \delta_{mn}$ a střední hodnota $\langle \hat{A} \rangle$ se bude rovnat a_m .

Měříme-li dvě veličiny A a B , bude obecně platit nerovnost

$$\langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle \langle (\Delta \hat{B})^2 \rangle \geq 0$$

Jedná-li se o fyzikální veličiny reprezentované komutujícími operátory, mohou být principiálně současně změřeny. Takové veličiny nazýváme *současně měřitelnými*. Pokud operátory nekomutují, nemohou být příslušné veličiny změřeny současně. Měření jedné veličiny mění stav systému tak, že hodnota druhé veličiny se stává neurčitou.

Relace neurčitosti platí pro měření na kvantově-mechanickém souboru popsaném vlnovou funkcí ψ , na jednotlivá měření je nelze aplikovat. Vzhledem k pravděpodobnostnímu charakteru QM jsou střední kvadratické odchylky vystupující v RN obecně nenulové a díky komutačním relacím mezi odpovídajícími nekomutujícími operátory existuje spodní mez pro součin těchto odchylek. Pro komutující operátory je na pravé straně RN nula, v takovém případě se na střední kvadratické odchylky neklade žádné omezení.

16.2.1 Odvození

Uvažujme hermitovské operátory \hat{A} , \hat{B} a \hat{C} , pro něž platí komutační relace

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$$

tedy nekomutují, např. $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$. Navíc platí, že

$$[\Delta \hat{A}, \Delta \hat{B}] = i\hat{C}$$

neboť posunutí počátku odečítání hodnot veličin A a B nemění hodnotu komutátoru. ($\Delta \hat{X}$ značí odchylku od střední hodnoty $\Delta \hat{X} = \hat{X} - \langle \hat{X} \rangle$.)

Použijeme-li Schwarzovu nerovnost

$$\langle u|u \rangle \langle v|v \rangle \geq |\langle u|v \rangle|^2$$

pro případ, že $u = \Delta \hat{A}\psi$ a $v = \Delta \hat{B}\psi$, dostaneme

$$\langle \Delta \hat{A}\psi | \Delta \hat{A}\psi \rangle \langle \Delta \hat{B}\psi | \Delta \hat{B}\psi \rangle \geq \left| \langle \Delta \hat{A}\psi | \Delta \hat{B}\psi \rangle \right|^2$$

Protože operátory \hat{A} a \hat{B} jsou hermitovské, operátory $\Delta \hat{A}$, $\Delta \hat{B}$ jsou také hermitovské a skalární součin na pravé straně nerovnosti lze napsat ve tvaru

$$\langle \Delta \hat{A}\psi | \Delta \hat{B}\psi \rangle = \langle \psi | \Delta \hat{A} \Delta \hat{B} \psi \rangle$$

Operátor $\Delta \hat{A} \Delta \hat{B}$ lze rozepsat na hermitovskou a antihermitovskou složku:

$$\Delta \hat{A} \Delta \hat{B} = \frac{1}{2}(\Delta \hat{A} \Delta \hat{B} + \Delta \hat{B} \Delta \hat{A}) + \frac{1}{2}(\Delta \hat{A} \Delta \hat{B} - \Delta \hat{B} \Delta \hat{A}) = \frac{1}{2}(\hat{D} + i\hat{C})$$

Dosadíme-li tento výsledek do pravé strany Schwartzovy nerovnosti a uvědomíme-li si, že střední hodnoty hermitovských operátorů jsou reálné, dostaneme nerovnost ve tvaru

$$\langle \psi | (\Delta \hat{A}\psi)^2 \rangle \langle \psi | (\Delta \hat{B}\psi)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \left(\langle \psi | \hat{C}\psi \rangle^2 + \langle \psi | \hat{D}\psi \rangle^2 \right)$$

Zatímco střední hodnota operátoru \hat{C} závisí na střední hodnotě komutátoru $[\hat{A}, \hat{B}]$, střední hodnota operátoru \hat{D} závisí na tvaru vlnové funkce a obvykle se musí počítat pro každý případ zvlášť, proto se obvykle vynechává. Dostáváme tak *relace neurčitosti* ve tvaru

$$\langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle \langle (\Delta \hat{B})^2 \rangle \geq \frac{\langle \hat{C} \rangle^2}{4}$$

16.2.2 Heisenbergovy relace neurčitosti

Heisenberg odvodil relace neurčitosti pro operátory kartézských souřadnic $\hat{x} = x$ a impulsu $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, přičemž $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$. Relace tedy nabývají tvaru

$$\langle (\Delta \hat{x})^2 \rangle \langle (\Delta \hat{p}_x)^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

Prakticky to znamená, že nemůžeme zároveň naměřit ostrou hodnotu souřadnice a ostrou hodnotu impulsu. Čím je jedna veličina přesnější, tím je druhá rozmazanější (limitní případy: lokalizovaná částice popsána δ -funkcí, delokalizovaná vlná částice popsána rovinnou vlnou). Dá se to také říci tak, že čím má částice menší prostor pro svoji existenci, tím má větší kinetickou energii. Porovnejme třeba nukleon v jádře a elektron v atomovém obalu. Nukleon se pohybuje v lineárním rozmezí zhruba 10^{-14} m a hrubý odhad jeho energie v základním stavu je 1 MeV. Elektron atomu vodíku v základním stavu se pohybuje v rozmezí asi 10^{-10} m a jeho energii odhadujeme na 10 eV. Oba tyto odhady odpovídají experimentům.

16.3 Integrály pohybu

Operátor časové derivace definujeme vztahem

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + i\hbar[\hat{A}, \hat{H}]$$

přičemž platí

$$\frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} = \left\langle \frac{d\hat{A}}{dt} \right\rangle \quad (16.7)$$

Fyzikální veličina A je *integrálem pohybu*, pokud se zachovává v čase, tj. pokud se střední hodnota časové derivace operátoru (16.7) rovná nule. Tato podmínka je splněna pro operátory veličin, které explicitně nezávisí na čase ($\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0$) a komutují s hamiltoniánem ($[\hat{A}, \hat{H}] = 0$).

Dále předpokládejme, že hamiltonián \hat{H} je rovněž nezávislý na čase. Pak můžeme místo časové SR řešit nečasovou SR ($\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$). Jelikož operátor \hat{A} komutuje s hamiltoniánem \hat{H} a oba explicitně nezávisí na čase, existuje společný systém jejich vlastních funkcí.

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi_n &= E_n\psi_n, \\ \hat{A}\psi_n &= a_n\psi_n. \end{aligned}$$

Obecné řešení časové SR lze psát ve tvaru

$$\psi(x, t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{E_n t / (\hbar)}$$

kde předpokládáme, že funkce $\psi_n(x)$ tvoří úplný ortonormální systém a funkce $\psi(x, t)$ je normovaná. Odtud vidíme, že pravděpodobnost, že se uvažovaný systém nachází ve stavu popsaném vlnovou funkcí $\psi_n(x)$, $p_n = |c_n|^2$ i kvantově-mechanické střední hodnoty $\langle \hat{A} \rangle = \sum_n p_n a_n$ a $\langle \hat{H} \rangle = \sum_n p_n E_n$ jsou časově nezávislé.

Fyzikální význam integrálů pohybu je kromě jiného dán také tím, že některé integrály pohybu (např. energie stacionárních stavů LHO $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$) závisí na *kvantových číslech*, která se v čase rovněž zachovávají a lze je tedy užít k označení odpovídajících stacionárních stavů.

Pro volnou částici jsou všechny tři složky impulzu, a tudíž i celková energie integrály pohybu. Při pohybu v centrálním poli jsou integrály pohybu všechny složky momentu hybnosti i jeho kvadrát.

Časová změna střední hodnoty energie je dána vztahem $\frac{d\langle \hat{H} \rangle}{dt} = \left\langle \frac{d\hat{H}}{dt} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \right\rangle$.

Pokud tedy hamiltonián \hat{H} nezávisí na čase, je energie $\langle \hat{H} \rangle$ integrálem pohybu. Jinými slovy, celková energie systému v poli sil nezávislých na čase je integrálem pohybu. Toto tvrzení představuje *zákon zachování energie v QM*.

16.4 Re prezentace měřitelných veličin

16.4.1 Teorie reprezentací

Tak jako v klasické fyzice, existuje spousta způsobů, jak volit bázi prostoru, v němž se pohybujeme. Měřitelné veličiny musí být na volbě této báze nezávislé. V kvantové mechanice to znamená to, že invariantní jsou

- vlastní čísla matic reprezentujících hermitovské operátory,
- střední hodnoty operátorů,
- výrazy typu skalárního součinu, které mají pravděpodobnostní interpretaci
- a komutační relace.

Bázi tedy volíme tak, aby se nám konkrétní problém (tzn. SR) řešil co nejlépe. Někdy se dokonce omejdeme úplně bez volby báze. Příkladem je řešení lineárního harmonického oscilátoru pomocí anihilačních a kreačních operátorů.

Přirozenou volbou báze v Hilbertově prostoru je úplný systém vlastních vektorů některého hermitovského operátoru. Necht' \hat{A} je takový operátor, který má pro jednoduchost zcela diskrétní spektrum $\hat{A} |a_n\rangle = a_n |a_n\rangle$, přičemž podmínka úplnosti má tvar $\sum_n |a_n\rangle \langle a_n| = \hat{1}$. Vyjádříme-li nyní všechny vektory a operátory vzhledem k této bázi, hovoříme o tzv. *A-representaci*. Každý ket-vektor $|t\rangle$ pak můžeme napsat pomocí podmínky úplnosti báze jako

$$|t\rangle = \hat{1} |t\rangle = \sum_n |a_n\rangle \langle a_n | t \rangle,$$

přičemž složky $t_n = \langle a_n | t \rangle$ jsou průměty $|t\rangle$ do směru $|a_n\rangle$. Uspořádáme-li t_n ve sloupcový vektor, hovoříme o vektoru $|t\rangle$ v A -reprezentaci.

Uvažujme nyní přechod od A -reprezentace k B -reprezentaci. Jelikož vlastní vektory $|a_n\rangle$ i $|b_n\rangle$ tvoří úplný ortonormální systém, je přechod zprostředkován unitární transformací $|b_n\rangle = \hat{U} |a_n\rangle = \sum_m U_{mn} |a_m\rangle$, kde $U_{mn} = \langle a_m | \hat{U} | a_n \rangle$ je unitární matice operátoru \hat{U} v A -reprezentaci. Přechod mezi vektory lze tedy psát pomocí tohoto operátoru jako

$$t_B = U^+ t_A \quad , \quad t_A = U t_B$$

a přechod mezi operátory jako

$$F_B = U^+ F_A U \quad , \quad F_A = U F_B U^+.$$

16.4.2 Souřadnicová reprezentace

Mezi nekonečným množstvím bází Hilbertova prostoru stavů zaujímá výjimečné postavení báze vlastních vektorů operátoru souřadnice \hat{x} , v které jsme dosud pracovali.

16.4.3 Impulzová reprezentace

Vydeme z vlastností Fourierovy transformace, která spojuje vlnovou funkci $\psi(x)$ a její Fourierův obraz $\varphi(p)$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(p) e^{-px/(i\hbar)} dp$$

a

$$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{px/(i\hbar)} dx$$

kde p označuje x -ovou složku impulsu. Dosazením posledního vztahu do předcházející rovnice dostaneme

$$\psi(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi(x') \int_{-\infty}^{\infty} e^{p(x'-x)/(i\hbar)} dp.$$

Odtud také plyne vyjádření Diracovy δ -funkce

$$\delta(x' - x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{p(x'-x)/(i\hbar)} dp$$

používané při normování vlnových funkcí volné částice ve tvaru rovinných vln. Tento vztah vyjadřuje úplnost báze rovinných vln.

Nyní najdeme vyjádření operátorů souřadnice \hat{x} a impulsu \hat{p} při působení na Fourierův obraz $\varphi(p)$.

$$\hat{p}\psi(x) = -i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(p) p e^{-px/(i\hbar)} dp.$$

Z tohoto výrazu je vidět, že v p -reprezentaci, tedy při působení na $\varphi(p)$, má operátor impulsu tvar

$$\hat{p} = p$$

Obdobně

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(p)(-i\hbar) \frac{d}{dp} e^{-px/(i\hbar)} dp.$$

Provedeme-li integraci per partes a předpokládáme-li, že vlnová funkce jde pro $p \rightarrow \pm\infty$ k nule, dostaneme

$$\hat{x}\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} i\hbar \frac{\partial\varphi(p)}{\partial p} e^{-px/(i\hbar)} dp.$$

Operátor souřadnic má tedy při působení na funkci $\varphi(p)$ tvar

$$\hat{x} = i\hbar \frac{d}{dp}.$$

Snadno lze ověřit, že výsledek komutátoru operátoru souřadnice a impulsu je stejný jako v souřadnicové reprezentaci.

16.4.4 Energetická reprezentace

Zde za operátor generující bázi volíme hamiltonián \hat{H} . Předpokládáme, že známe jeho ortonormální vlastní funkce ψ_n a vlastní energie E_n , $\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$.

Obecnou vlnovou funkci $\psi(x)$ v souřadnicové reprezentaci vyhovující nečasové SR rovineme do ortonormálních funkcí ψ_n a dosadíme do SR. Zleva vynásobíme funkcí ψ_m^* a zintegrujeme přes celý prostor. S ohledem na předpokládanou ortonormalitu funkcí ψ_m dostaneme maticový problém $\sum_n H_{mn}c_n = Ec_m$, kde H_{mn} je hamiltonián v tzv. *energetické reprezentaci*

$$H_{mn} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*(x) \hat{H} \psi_n(x) dx$$

a obecně nekonečný sloupcový vektor c_n představuje vlnovou funkci v této reprezentaci.

16.5 Zdroje

Skála L. - Úvod do kvantové mechaniky

http://wiki.matfyz.cz/index.php?title=16._Formalizmus_kvantové_teorie
a možná ještě něco

17. Aplikace kvantové mechaniky

17.1 Volná částice

Jeden z nejjednodušších možných problémů, které umíme v kvantové mechanice řešit. Jelikož se jedná o volný pohyb, nejsou na vlnovou funkci volné částice naloženy žádné okrajové podmínky, které způsobují kvantování, a můžeme tedy pozorovat, že energie ani impuls nebudou kvantovány.

Pro jednoduchost budeme řešit volnou částici v 1D. Začneme řešením nečasové Schrödingerovy rovnice

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) . \quad (17.1)$$

Jelikož jde o volnou částici nemá hamiltonián žádný člen odpovídající potenciální energii a tedy nečasové Schrödingerovy rovnice přejde na tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \Rightarrow \left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \right) \psi(x) = 0 . \quad (17.2)$$

Pro energii volné částice platí $E \geq 0$, proto můžeme označit

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2 , \quad (17.3)$$

kde $k \geq 0$ je reálné číslo (tzv. vlnový vektor). Jako řešení obyčejné diferenciální rovnice (17.2) zvolíme $f(x) = e^{\lambda x}$, které nám dá charakteristický polynom

$$\lambda^2 + k^2 = 0 \Rightarrow \lambda_{1,2} = \pm ik . \quad (17.4)$$

Výsledné dvě partikulární řešení rovnice (17.2) mají tvar

$$\psi(x) = e^{\pm ikx} . \quad (17.5)$$

Ze znalosti operátoru impulsu (hybnosti)

$$\hat{p}\psi(x) = -i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx} = \pm \hbar k \psi(x) \quad (17.6)$$

jsme schopni určit impuls částice p s vlnovou funkcí tvaru (17.5) jako

$$p = \pm \hbar k . \quad (17.7)$$

Vlnové funkce $\psi(x)$ tedy můžeme při použití vztahu (17.7) psát ve tvaru

$$\psi(x) = e^{\frac{-px}{\hbar}} . \quad (17.8)$$

Ze znalosti tvaru časově závislé části vlnové rovnice $\phi(t)$, která je výsledkem řešení nečasové Schrödingerovy rovnice

$$\phi(t) = e^{\frac{Et}{\hbar}} , \quad (17.9)$$

můžeme výslednou časově závislou vlnovou funkci volné částice zapsat ve tvaru rovinné vlny

$$\psi(x, t) = e^{\frac{(Et - px)}{i\hbar}} . \quad (17.10)$$

Celková energie částice je rovna její kinetické energii

$$E = \psi \hat{H} \psi = \psi \hat{T} \psi = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} . \quad (17.11)$$

Závěrem vlnová funkce (17.10) je vlastní funkcí hamiltoniánu \hat{H} s vlastní energií $E = \frac{p^2}{2m}$ a je současně vlastní funkcí operátoru impulzu \hat{p} s vlastní hodnotou $p = \pm \hbar k$. Hamiltonián a operátor impulzu spolu komutují, mají tedy společný systém vlastních funkcí z čehož vyplývá, že jednorozměrný pohyb volné částice lze popsat pomocí dvou kvantových čísel — kinetické energie $E = \frac{p^2}{2m}$ a impulzu p z intervalu $(-\infty, \infty)$.

Normování vlnové funkce volné částice je možné provést dvěma způsoby :

1. Zavedení umělého kvantování pomocí tzv. periodické hraniční podmínky

$$\psi(x) = \psi(x + L) , \quad (17.12)$$

kde ψ je vlnová funkce (17.8) a L je délka intervalu, se kterým se vlnová funkce periodicky opakuje. To vede ke kvantování impulzu

$$p_n = \frac{2\pi \hbar n}{L} . \quad (17.13)$$

Na základě periodicity můžeme zavést normování při integraci přes libovolný interval délky L , takže dostáváme vlnové funkce s kvantovanými impulzy

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\frac{-p_n x}{i\hbar}} . \quad (17.14)$$

Výpočty pak provádíme s těmito vlnovými funkcemi, přičemž na konci výpočtů pak stačí provést limitu $L \rightarrow \infty$, čímž L z konečných výsledků vymizí.

2. Normování na Diracovu δ -funkci, kdy využijeme vyjádření δ -funkce ve tvaru

$$\delta(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} dx . \quad (17.15)$$

Normujeme-li prostorovou část vlnové funkce (17.10) vztahem

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \hbar}} e^{\frac{-px}{i\hbar}} , \quad (17.16)$$

dostaneme skalární součin

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_p(x)^* \psi_{p'}(x) dx = \frac{1}{2\pi \hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{(p-p')x}{i\hbar}} dx = \delta(p - p') , \quad (17.17)$$

který odpovídá vztahu (17.15).

Obecné řešení časové Schrödingerovy rovnice pro trojrozměrný pohyb volné částice lze psát ve tvaru superpozice či lineární kombinace řešení (17.10)

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int c(\mathbf{p}) e^{\frac{E(\mathbf{p})t - \mathbf{p}\mathbf{r}}{i\hbar}} d^3\mathbf{p} , \quad (17.18)$$

kde integrace probíhá přes celý třírozměrný prostor impulzů $d^3\mathbf{p}$ a funkce $c(\mathbf{p})$ je Fourierovým obrazem funkce $\psi(\mathbf{r}, 0)$.

17.2 Částice v potenciálové jámě

Začneme příkladem nekonečně hluboké jednorozměrné potenciálové jámy. V intervalu $\langle 0, a \rangle$ je potenciální energie $V = 0$ a mimo tento interval je potenciální energie $V \rightarrow \infty$ a částice se zde nemůže vyskytovat, tedy $\psi(x) = 0$ mimo tento interval. Budeme tedy řešit Schrödingerovu rovnici

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \quad (17.19)$$

na intervalu $\langle 0, a \rangle$. Řešení bude stejné jako v případě s volnou částicí tedy obecné řešení na intervalu $\langle 0, a \rangle$ lze psát ve tvaru

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} , \quad (17.20)$$

kde A a B jsou libovolné komplexní konstanty.

Z požadavku na spojitost vlnové funkce získáme okrajové podmínky $\psi(0) = \psi(a) = 0$. První podmínka je splněna pokud $A = -B$, můžeme tedy brát $\psi(x) = N \sin(kx)$. Druhá podmínka $\sin(ka) = 0$ je splněna, pokud $ka = \pi n$, kde $n = 1, 2, 3, \dots$ je přirozené číslo, tzv. kvantové číslo. Vlnový vektor k i odpovídající energie jsou kvantovány (v důsledku okrajových podmínek)

$$k_n = \frac{\pi}{a}n, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (17.21)$$

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (17.22)$$

Vlnové funkce příslušející kvantovaným energiím mají tvar

$$\psi_n(x) = N \sin \frac{\pi xn}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \dots , \quad (17.23)$$

přičemž normovací konstantu N lze získat integrací přes uvažovaný interval jako

$$N = \sqrt{\frac{2}{a}} e^{i\alpha} , \quad (17.24)$$

kde α je libovolné reálné číslo, nebo-li vlnová funkce je určena až na fázový faktor $e^{i\alpha}$, který většinou volíme roven jedné.

Energie E_n mají následující vlastnosti

- Energie E_n jsou větší než nula. Stav s $E_n = 0$ není možný.
- Energetické spektrum E_n je diskrétní a nedegenerované.

- Energie E_n jsou úměrné n^2 , kdežto jejich rozdíly rostou lineárně s n . Podíl rozdílu a E_n je tedy úměrný $\frac{1}{n}$ a s rostoucím n se tedy blížíme ke klasickému případu, kdy energie nejsou kvantovány.

Vlnové funkce $\psi_n(x)$ mají následující vlastnosti

- Vlnové funkce $\psi_n(x)$ jsou ortonormální a tvoří bázi příslušného Hilbertova prostoru.
- Počet uzlů funkce $\psi_n(x)$ je $n - 1$
- Funkce $\psi_n(x)$ jsou sudé, resp. liché vzhledem ke středu intervalu, což lze vyjádřit pomocí parity $(-1)^{n-1}$.

Třírozměrnou nekonečně hlubokou potenciálovou jámu, kde a, b, c jsou rozměry jámy lze řešit separací proměnných

$$\psi(x, y, z) = \psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z) . \quad (17.25)$$

Celková energie je pak dána jako součet jednotlivých energií

$$E_{lmn} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{l^2}{a^2} + \frac{m^2}{b^2} + \frac{n^2}{c^2} \right) , \quad l, m, n = 1, 2, 3, \dots . \quad (17.26)$$

Energie základního stavu E_{111} je nedegenerovaná. Ostatním vyšším energiím odpovídá několik různých lineárně nezávislých funkcí, nebo-li jde o degenerované hladiny.

Po provedení separace dostaneme tři jednorozměrné Schrödingerovy rovnice. Při použití výsledků získaných pro jednorozměrný případ dostaneme vlnovou funkci ve tvaru

$$\psi_{lmn}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin \frac{\pi x l}{a} \sin \frac{\pi y m}{b} \sin \frac{\pi z n}{c} , \quad l, m, n = 1, 2, 3, \dots . \quad (17.27)$$

Druhý případ, kterým se budeme zabývat, je potenciálová jáma konečné hloubky v 1D. Předpokládáme, že v intervalu $\langle -\frac{a}{2}, \frac{a}{2} \rangle$ je potenciální energie $V = 0$ (tuto oblast označíme II) a mimo tuto oblast je $V = V_0$, kde $V_0 > 0$ (tyto oblasti označíme I a III). Budeme řešit nečasovou Schrödingerovu rovnici

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi(x) = E\psi(x) . \quad (17.28)$$

Na základě konečnosti hloubky a šířky uvažované jámy a konstantnosti potenciální energie pro $|x| > \frac{a}{2}$ má tato Schrödingerova rovnice jednak diskrétní energetické spektrum s konečným počtem nenulových hladin s energiemi $0 < E < V_0$, jednak spojité spektrum s energiemi $E \geq V_0$. Budeme hledat vlnové funkce, které jsou konečné, jednoznačné, spojité a mají spojité derivace.

V případě diskrétního spektra hledáme řešení, které jde k nule pro $x \rightarrow \pm\infty$ (kvadraticky integrovatelné). Při řešení využijeme symetrie potenciálu vzhledem ke středu potenciálové jámy. Hamiltonián komutuje s operátorem inverze \hat{I} (převádí souřadnici x na $-x$), a proto jsou vlastní funkce hamiltoniánu buď **sudé** nebo **liché**. Díky symetrii se budeme věnovat řešení Schrödingerovy rovnice pouze pro $x \geq 0$. Dostáváme tak dvě diferenciální rovnice

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2\right)\psi_{II} = 0, \quad \text{kde } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0 \quad \text{pro } 0 \leq x \leq \frac{a}{2} \quad (17.29)$$

a

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - \alpha^2\right)\psi_{III} = 0, \quad \text{kde } \alpha^2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad \text{pro } x > \frac{a}{2}, \quad (17.30)$$

vzhledem k tomu že $V_0 > E$, předpokládáme, že α je reálné kladné číslo.

Sudá řešení vezmeme ve tvaru

$$\psi_{II} = A \cos kx \quad \text{a} \quad \psi_{III} = B e^{-\alpha x}, \quad (17.31)$$

kde A a B jsou konstanty. Z požadavku spojitosti vlnové funkce a její derivace v bodě $x = \frac{a}{2}$ dostáváme dvě sešívací podmínky. Netriviální řešení této soustavy rovnic existuje pokud je determinant soustavy nulový, nebo-li

$$k \tan \frac{ka}{2} = \alpha = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k^2}. \quad (17.32)$$

Úpravou tohoto vztahu získáme výsledný vztah určující možné hodnoty vlnového vektoru $0 < k < \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}$, a tedy i energie $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ jenž má tvar

$$ka = (2n + 1)\pi - 2 \arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_0}}. \quad (17.33)$$

Geometrická interpretace : Při grafickém znázornění levé a pravé strany v jednom grafu nám jejich průsečík udává možné hodnoty k -vektoru. Vždy, i pro velmi úzkou a mělkou potenciálovou jámu existuje alespoň jeden sudý vázaný stav (základní stav). S rostoucími hodnotami a a V_0 se pak objevují další průsečíky a počet vázaných stavů v diskretním spektru energií roste.

Lichá řešení vezmeme ve tvaru

$$\psi_{II} = A \sin kx \quad \text{a} \quad \psi_{III} = B e^{-\alpha x}. \quad (17.34)$$

Analogicky pak získáme podobný vztah jako pro sudá řešení ve tvaru

$$ka = 2n\pi - 2 \arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_0}}, \quad (17.35)$$

přičemž tvar je stejný jako pro sudé stavy, avšak pravá strana je posunuta směrem nahoru o π .

V případě spojitého spektra pohybuje-li se částice s energií $E > V_0$ ve směru rostoucího x může buď oblastí jámy projít, nebo se vlivem působení jámy odrazit. K řešení použijeme posunu x -ové osy o V_0 nahoru ve směru osy y . Tím získáme mimo jámu potenciální energii nulovou (analogie s vlnou částicí) a v oblasti jámy $\langle -\frac{a}{2}, \frac{a}{2} \rangle$ máme $V(x) = -V_0$, kde $V_0 > 0$.

V oblasti I budeme předpokládat vlnovou funkci ve tvaru

$$\psi_I = A e^{ik_0 x} + B e^{-ik_0 x}, \quad \text{kde } k_0 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0. \quad (17.36)$$

Část s konstantou A odpovídá pohybu částice zleva směrem k jámě a část s konstantou B představuje částici odraženou zpět.

V oblasti II budeme předpokládat vlnovou funkci ve tvaru

$$\psi_{II} = \alpha e^{ikx} + \beta e^{-ikx}, \quad \text{kde } k = \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar} > 0. \quad (17.37)$$

V oblasti III bereme vlnovou funkci ve tvaru

$$\psi_{III} = C e^{ik_0 x}, \quad (17.38)$$

který odpovídá průchodu částice přes oblast jámy a k_0 je jako v oblasti I.

Koeficient průchodu (transmise) pak získáme jako

$$T = \left| \frac{C}{A} \right|^2 \quad (17.39)$$

a podobně i koeficient odrazu (reflexe)

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2. \quad (17.40)$$

Součet těchto koeficientů je roven jedné $R + T = 1$. Pro určení těchto koeficientů vyjádříme konstanty A a B jako funkce konstanty C a ty pak dosadíme do vztahů (17.39) a (17.40). K vyjádření závislosti využijeme sešívacích podmínek v obou napojovacích bodech (podrobněji viz str. 61 v [1]) a po dosažení získáme vztah pro koeficient průchodu

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k_0}{k} - \frac{k}{k_0} \right)^2 \sin^2 ka}. \quad (17.41)$$

Koeficient odrazu je $R = 1 - T$. Pro neexistující potenciálovou jámu $V_0 = 0$ je $k_0 = k$ a $T = 1$. Pro mělkou jámu se koeficient průchodu blíží jedné. Ve spojitěm spektru energií existují tzv. rezonanční energie, pro něž je koeficient průchodu roven jedné navzdory přítomnosti jámy, a to pokud $ka = n\pi$ ($\sin ka$ v rovnici (17.41) je roven 0), kde n je celé číslo. Pro rezonanční energie je šířka jámy celistvým násobkem poloviny de Broglieovy vlnové délky.

17.3 Tunelový jev

Jde o průchod částice potenciálovým valem. Uvažujeme pravoúhlý val o šířce a a výšce $V_0 > 0$, na nějž dopadá částice o energii $0 < E < V_0$. Částice dopadající na potenciálový val buď projde nebo se odrazí. Využijeme analogie se spojitěm spektrem konečně hluboké potenciálové jámy a zavedeme koeficienty průchodu a odrazu. Můžeme použít výsledků získaných u potenciálové jámy za předpokladu, že provedeme záměnu $V_0 \rightarrow -V_0$. Vlnový vektor k z rovnice (17.37) má pro potenciálový val tvar

$$k = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}, \quad (17.42)$$

kde $E < V_0$. Výsledky tedy dostaneme záměnou $k \rightarrow i\kappa$, kde vlnový vektor

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} > 0 \quad (17.43)$$

je reálný. Ze znalosti vztahu $\sin i\kappa a = i \sinh \kappa a$, dostaneme z rovnice (17.41) koeficient průchodu

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k_0}{\kappa} - \frac{\kappa}{k_0} \right)^2 \sinh^2 \kappa a}, \quad (17.44)$$

kde K_0 ze vztahu (17.36) odpovídá volnému pohybu částice. Koeficient odrazu získáme z $R = 1 - T$.

Pro libovolně široký a vysoký val je nenulová pravděpodobnost průchodu částice valem. S rostoucí šířkou a a s rostoucím rozdílem energií $V_0 - E$ však tato pravděpodobnost velmi rychle klesá.

17.4 Lineární harmonický oscilátor (LHO)

Je možné řešit v souřadnicové reprezentaci (viz. str. 74 v [1]), ale mnohem lepší je řešit pomocí kreačních a anihilačních operátorů (viz. str. 97 v [1]) tzv. Fockova reprezentace. Uvažujme nečasovou Schrödingerovu rovnici ve tvaru

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \psi(x) = E \psi(x) \quad (17.45)$$

a zavedeme tzv. anihilační operátor

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (\hat{p} - i\omega m \hat{x}) \quad (17.46)$$

a hermitovsky sdružený kreační operátor

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (\hat{p} + i\omega m \hat{x}), \quad (17.47)$$

kde $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ a $\hat{x} = x$. S využitím komutační relace $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ lze snadno ověřit, že platí

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2 = \hbar\omega \left(\hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} \right). \quad (17.48)$$

Operátory \hat{a} a \hat{a}^+ nejsou hermitovské, jsou však navzájem hermitovsky sdružené a platí $[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$. K nalezení vlastních energií hamiltoniánu \hat{H} z (17.48) stačí najít vlastní čísla operátoru počtu částic

$$\hat{N} = \hat{a}^+ \hat{a} \quad (17.49)$$

řešíme tedy problém

$$\hat{N} \psi_\lambda = \lambda \psi_\lambda, \quad (17.50)$$

kde λ jsou vlastní čísla a ψ_λ jsou příslušné vlastní stavy.

Předpokládáme normované vlastní vektory $\psi_\lambda | \psi_\lambda = 1$. Vynásobením rovnice (17.50) zleva ψ_λ dostaneme

$$\psi_\lambda \hat{a}^+ \hat{a} \psi_\lambda = \lambda \Rightarrow \hat{a} \psi_\lambda | \hat{a} \psi_\lambda = \lambda . \quad (17.51)$$

Skalární součin v poslední rovnici násobí dva stejné stavy, takže musí být reálný a větší nebo roven nule, tedy $\lambda \geq 0$, a z vlastností skalárního součinu vyplývá, že $\lambda = 0 \Leftrightarrow \hat{a} \psi_\lambda = 0$.

Vynásobením rovnice (17.50) anihilačním operátorem \hat{a} zleva a za použití komutační relace $[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$ dostaneme

$$(\hat{a}^+ \hat{a} + 1) \hat{a} \psi_\lambda = \lambda \hat{a} \psi_\lambda \Rightarrow \hat{a}^+ \hat{a} \hat{a} \psi_\lambda = (\lambda - 1) \hat{a} \psi_\lambda , \quad (17.52)$$

kde $\hat{a} \psi_\lambda$ označuje stav vzniklý aplikací operátoru \hat{a} na stav ψ_λ . Z poslední rovnice vyplývá, že stav $\hat{a} \psi_\lambda$ odpovídá vlastnímu číslu $\lambda - 1$, a proto se operátor \hat{a} nazývá anihilační. Vektor $\hat{a} \psi_\lambda$ není normovaný, po normování dostáváme tvar

$$\boxed{\psi_{\lambda-1} = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \hat{a} \psi_\lambda} . \quad (17.53)$$

Opakovanou aplikací anihilačního operátoru můžeme dostávat stavy se stále nižším kvantovým číslem λ , až do doby kdy se $\lambda = 0$ a posloupnost už dále nemůže pokračovat. Základním stavem lineárního harmonického oscilátoru je stav ψ_0 odpovídající $\lambda = 0$. Vlastní čísla operátoru \hat{N} jsou tedy rovna $\lambda = 0, 1, 2, \dots$. Vlastní energie hamiltoniánu (17.48) jsou pak dány vztahem

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad \text{kde } n = 0, 1, 2, \dots . \quad (17.54)$$

Stejný postup lze použít i s kreačním operátorem, kterým zleva vynásobíme rovnici (17.50), využijeme komutační relace a získáme

$$\hat{a}^+ \hat{a} \hat{a}^+ \psi_\lambda = (\lambda + 1) \hat{a}^+ \psi_\lambda , \quad (17.55)$$

tedy stav $\hat{a}^+ \psi_\lambda$ odpovídá vlastnímu číslu $\lambda + 1$, proto jde o kreační operátor. Normovaný stav má tvar

$$\boxed{\psi_{\lambda+1} = \frac{1}{\sqrt{\lambda+1}} \hat{a}^+ \psi_\lambda} . \quad (17.56)$$

Stavy lineárního harmonického oscilátoru s různými vlastními energiemi jsou ortogonální. Maticové elementy anihilačního a kreačního operátoru v bázi vlastních stavů ψ_n mají tvar

$$\psi_m \hat{a} \psi_n = \psi_m | \sqrt{n} \psi_{n-1} = \sqrt{n} \delta_{m,n-1} \quad (17.57)$$

a

$$\psi_m \hat{a}^+ \psi_n = \psi_m | \sqrt{n+1} \psi_{n+1} = \sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} . \quad (17.58)$$

Vlnovou funkci základního stavu LHO získáme ze vztahu $\hat{a} \psi_\lambda = 0$ zmíněném již výše, který má v souřadnicové reprezentaci tvar

$$\hat{a} \psi_0(\xi) = 0 , \quad (17.59)$$

kde anihilační operátor \hat{a} je dán vztahem (17.46) a ψ_0 je vlnová funkce základního stavu. Dostáváme

$$\hat{a}\psi_0(\xi) = -\frac{i}{\sqrt{2}} \left(\frac{d}{d\xi} + \xi \right) \psi_0(\xi) = 0, \quad \text{kde } \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x. \quad (17.60)$$

Rovnice výše má řešení

$$\psi_0(\xi) = N_0 e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \quad (17.61)$$

kde N_0 je normovací faktor. Normované funkce vyšších stavů lze získat vícenásobným použitím kreačního operátoru s $\lambda = n$ v souřadnicové reprezentaci. Lze ukázat, že takto získané vlnové funkce odpovídají Hermitovým polynomům.

17.5 Atom vodíku

Podle klasické fyziky by atom vodíku ani žádné jiné atomy neměly být stabilní. Elektron by měl vyzařovat a blížit se k jádru, ve velmi krátkém čase by mělo dojít ke kolapsu takového systému. Existenci stabilních stacionárních stavů objasnila teprve kvantová mechanika. Atom vodíku má hamiltonián ve tvaru

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}. \quad (17.62)$$

Předpokládáme tedy pohyb elektronu o náboji $-e$ a hmotnosti m_e v coulombovském poli nehybného jádra o náboji Ze (pro vodík $Z = 1$).

Coulombovský potenciál v hamiltoniánu výše jde k nule pro $r \rightarrow \infty$, takže stavy atomu vodíku s energií $E \geq 0$ jsou nekvantované stavy odpovídající spojitému energetickému spektru, kdežto stavy s energií $E < 0$ jsou vázanými stavy, pro které platí podmínka $\psi(r) \rightarrow 0$ pro $r \rightarrow \infty$ a které mohou být díky této podmínce kvantovány. Energetické spektrum vodíku pro $E < 0$ je diskrétní a je experimentálně pozorováno jako čárové spektrum.

Při řešení je výhodné použít sférických souřadnic r, θ, ϕ . Coulombovský potenciál závisí pouze na radiální souřadnici r , a jde proto o pohyb v centrálním poli. V tomto poli jsou kvadrát orbitálního momentu hybnosti a jeho z-ová komponenta integrály pohybu. Vázané stavy atomu vodíku lze klasifikovat pomocí kvantových čísel l a m charakterizujících tyto veličiny

$$\psi(r, \theta, \phi) = \psi_{nlm}(r, \theta, \phi), \quad (17.63)$$

kde n je třetí kvantové číslo odpovídající kvantování v radiálním směru a je dáno coulombovským potenciálem v rovnici (17.62). Coulombovský potenciál závisí pouze na souřadnici r , a proto energie vázaných stavů atomu vodíku nezávisí na kvantových číslech m a l , tedy $E = E_n$. V centrálním poli úhlová část pohybu nepřispívá ke kvantování energie.

Přepíšeme hamiltonián (17.62) do sférických souřadnic

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\Delta_{\theta, \phi}}{r^2} \right) \right] - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}, \quad (17.64)$$

kde operátor $\Delta_{\theta, \phi}$ je dán vztahem

$$\Delta_{\theta,\phi} = \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} . \quad (17.65)$$

Tento hamiltonián vytváří společně s operátory kvadrátu momentu hybnosti \hat{L}^2 a jeho z-ové komponenty \hat{L}_z systém tří navzájem komutujících operátorů a existuje tedy společný systém vlastních funkcí těchto operátorů. Jelikož \hat{L}^2 a \hat{L}_z nezávisí na r můžeme předpokládat vlnovou funkci ψ v separovaném stavu

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y_{lm}(\theta, \phi) , \quad (17.66)$$

kde $R(r)$ je prozatím neučená radiální část vlnové funkce a kulové funkce $Y_{lm}(\theta, \phi)$ jsou vlastní funkce operátorů \hat{L}^2 a \hat{L}_z . Dosazením takto separované vlnové funkce do hamiltoniánu (17.64) dostaneme po vykrácení Y_{lm} rovnici pro radiální část vlnové funkce $R(r)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} R = ER , \quad (17.67)$$

kde E je vlastní energie.

Pro zjednodušení použijeme několik substitucí a zavedeme vhodné bezrozměrné jednotky

$$R(r) = \frac{u(r)}{r}, \quad \rho = \frac{r}{a_B}, \quad \text{kde } a_B = 4\pi\epsilon_0 \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \quad \text{a} \quad \epsilon = \frac{E}{\text{Ry}}, \quad (17.68)$$

kde a_B je Bohrov poloměr a Ry je jeden Rydberg, který je roven

$$\text{Ry} = \frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} . \quad (17.69)$$

Bohrov poloměr je nejpravděpodobnější vzdálenost elektronu od jádra pro základní stav atomu vodíku a jeden Rydberg až na znaménko udává energii základního stavu atomu vodíku. Po zavedení těchto zjednodušení dostáváme Schrödingerovu rovnici (17.67) ve tvaru

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} + \left[\epsilon + \frac{2Z}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u = 0 . \quad (17.70)$$

Zdlouhavým a nechutně matematickým řešením (viz. str. 127 v [1]) získáme vztah pro kvantované hodnoty energie vázaných stacionárních stavů atomu vodíku vzhledem k hlavnímu kvantovému číslu n

$$E_n = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z^2 e^2}{2a_B} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots . \quad (17.71)$$

Energie těchto stavů jsou záporné, což je v souladu s tím, že k ionizaci atomu v takových stavech je nutné dodat energii. Možné hodnoty orbitálního kvantového čísla l jsou $l = 0, \dots, n-1$ a magnetické kvantové číslo m může nabývat hodnot $m = -l, \dots, l$.

Energie základního stavu E_1 není degenerovaná, všechny ostatní hladiny jsou degenerované, neboť jim přísluší několik různých stavů s různými hodnotami l a m . Degenerace hladiny E_n je rovna n^2 .

Normované radiální funkce lze zapsat ve tvaru

$$R_{nl}(\xi) = N_{nl} e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^l L_{n-l-1}^{2l+1}(\xi) , \quad (17.72)$$

kde N_{nl} je normovací koeficient a $L_k^s(\xi)$ jsou přidružené Laguerrovy polynomy. Celkové vlnové funkce vázaných stavů atomu vodíku mají tvar

$$\boxed{\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)} \quad (17.73)$$

a tvoří pro přípustné hodnoty n, l, m úplný ortonormální systém funkcí, do něhož lze rozvinout obecné řešení nečasové Schrödingerovy rovnice pro vázaný stav atomu vodíku.

Pravděpodobnost nalézt elektron v objemovém elementu $(r, r+dr)$, $(\theta, \theta+d\theta)$ a $(\phi, \phi+d\phi)$ je rovna

$$dp(r, \theta, \phi) = |\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)|^2 r^2 dr d\Omega , \quad (17.74)$$

kde $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$.

Při inverzi souřadnic $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ mají vlnové funkce ψ_{nlm} sudou či lichou paritu dle

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) \rightarrow (-1)^l \psi_{nlm}(r, \theta, \phi) . \quad (17.75)$$

Radiální hustota pravděpodobnosti $p_{nl}(r) = |R_{nl}|^2 r^2$ (vždy > 0) má pro základní stav $P_{10}(r)$ maximum v bodě $r = a_B$. Pro vyšší excitované stavy mají hustoty pravděpodobnosti na intervalu $r \in (0, \infty)$ celkem $n - l - 1$ nulových bodů. Mezi těmito body hustota pravděpodobnosti osciluje a s rostoucí vzdáleností se maxima rozšiřují. S rostoucí energií elektronu se jeho bod nejpravděpodobnějšího výskytu vzdaluje od jádra a pro velmi vysoká n je elektron tak daleko, že stačí dodat i malá energie k ionizaci atomu a k přechodu elektronu do spojitého spektra. Stacionární stavy atomu vodíku s kvantovým číslem $l = 0$ se nazývají s-stavy, dále pak p, d, f, g a h s rostoucím číslem l .

Experimentální ověření diskrétních hladin umožňují spektrometrická měření, neboť při přechodu elektronu mezi hladinami m a n je vyzářeno nebo pohlceno elektromagnetické záření o frekvenci $\nu = \frac{|E_m - E_n|}{h}$. Podle toho, která je konečná hladina n , dostáváme různé série čar: Lymanova série ($n = 1$), Balmerova série ($n = 2$), Ritzova-Paschenova série ($n = 3$) atd.

Pro energii $E \geq 0$ dostaneme spojitě energetické spektrum. Ke každé energii $E \geq 0$ přísluší dvě řešení — rozbíhající a sbíhající se vlna. Tato řešení nejsou kvadraticky integrabilní a lze je normovat na δ -funkci. I v tomto případě jsou kvadrát momentu hybnosti a jeho z-ová komponenta integrály pohybu.

18. Jaderné záření

18.1 Interakce jaderného záření s prostředím a metody jeho detekce

Protože jsme všichni museli absolvovat školení k praktikům 4, tak cokoliv si z toho pamatujete můžete zde použít :-)

Jaderné záření si představujeme jako tok částic (elementární částice, ionty, jádra prvků ..). Rozlišujeme 4 druhy základních interakcí s látkou:

- elektromagnetická - nabitě částice interagují s atomovými obaly z okolí;
- silná - srážky částic s jádry atomů prostředí;
- slabá - interakce s leptony (elektrony ale ne na základě elektrického náboje);
- gravitační - zanedbatelná.

Dále zavedeme některé pojmy často používané v jaderné a částicové fyzice.

Účinný průřez Značíme ho σ , jeho jednotkou jsou barny $1 \text{ b} = 10^{-28} \text{ m}^{-2}$ a jeho význam je pravděpodobnost interakce částic. Počet interakcí získáme jako

$$N = \sigma \cdot j \cdot N_{\text{target}} = N_{\text{beam}} \cdot \sigma \cdot t \cdot n_{\text{target}}, \quad (18.1)$$

kde j je tok částic, t je tloušťka terče, N jsou počty částic a n je hustota počtu částic. Může se nám hodit (např. Rutherfordův pokus) vyjádření účinného průřezu v závislosti na směru tzv. diferenciální účinný průřez $d\sigma/d\Omega$.

Pravděpodobnost přežití p Tou rozumíme jakou má částice šanci na projití dráhy t aniž by jakkoliv interagovala s okolím. Tuto pravděpodobnost vypočteme celkem snadno z (18.1), když si uvědomíme, že počet událostí vlastně znamená změnu počtu částic ve svazku

$$N_{\text{beam}}(t) = N_{\text{beam}}(0) \exp(-\sigma n_{\text{target}} t) \rightarrow p(t) = \frac{N_{\text{beam}}(t)}{N_{\text{beam}}(0)} = \exp(-\sigma n_{\text{target}} t). \quad (18.2)$$

Střední interakční délka Tu si zadefinujeme jako

$$\tau = \int_0^{\infty} t \cdot p(t) dt = \frac{1}{\sigma n_{\text{target}}}. \quad (18.3)$$

A chápeme jí jako vzdálenost, kterou musí částice v materiálu urazit, aby jednou zainteragovala.

Závislost energetických ztrát dE/dx na x dráze částice v materiálu se nazývá Braggova křivka. Neutrální částice detekujeme podle sekundárních produktů jejich interakcí.

18.1.1 Těžké částice

Do této kategorie spadají částice s klidovou hmotností srovnatelnou s hmotností protonu a větší, tedy například α částice (jádro hélia). Pokud těžké částice procházejí látkovým prostředím, dochází k rozptylu na jádrech atomu této látky viz Rutherfordův pokus (ostřelování tenké zlaté fólie α částicemi). Z něj se zjistilo, že jádro je velmi malé a kladně nabitě, a že na něm dochází k rozptylu popsáno formulí

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{Zze^2}{8\pi\epsilon_0mv^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}, \quad (18.4)$$

kde Z je počet protonů v jádře terče, z , m a v je násobek elementárního náboje, hmotnost a rychlost nalétávající částice, θ je úhel rozptylu. Pomocí impaktního parametru b (vzdálenost nalétávající částice od osy procházející terčem a rovnoběžné se směrem vektoru v dostaneme $\sigma = \pi b^2$).

Pro malé energie záření převažuje ztráta energie částic excitací (dodání energie elektronu v obalu okolních atomů, ale ne dostatečnou na jeho uniknutí, přičemž následně pozorujeme vyzáření elmag kvanta pro deexcitaci elektronu, maximálně desítky eV) či ionizací (vytržení elektronu z obalu nějakého atomu s maximální energií stovek keV). Postupnou ztrátou energie částic; známá je Bethe-Blochova formule pro ionizační ztráty (vzorec si asi nikdo nezapamatuje ale je dobré vědět na čem závisí)

$$\frac{dE}{dx} = -\frac{4\pi}{m_e c^2} \frac{nz^2}{\beta^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left[\ln \left(\frac{2m_e c^2 \beta^2}{I(1-\beta^2)} \right) - \beta^2 \right] \quad (18.5)$$

(kde ϵ_0 je permitivita vakua, n je elektronová hustota materiálu, I je střední excitační potenciál (pro větší Z je $\approx (10 \text{ eV})Z$) a z je násobek elementárního náboje částice); dochází ke zpomalení až nakonec zastavení částice a proto definujeme dolet částice v materiálu. Například je známé, že α částice dokážeme odstínit i jedním listem papíru.

18.1.2 Lehké částice

Do této kategorie spadají například miony, elektrony a piony. Na jejich ztráty v materiálu má vliv ionizace (velikost ztrát závisí na náboji, hmotnosti a $1/\beta^2$, hlavně pro nižší energie) a dále hlavně tzv. radiační ztráty (vyzáření brzděného záření, dominuje pro vyšší energie). Brzděné záření vzniká v důsledku nutnosti zachování energie a tedy pokud se elektrony zbrzdí v důsledku interakce s okolními atomovými obaly dojde k vyzáření fotonu. Toto záření způsobuje hlavně energetické ztráty pro vysokoenergetické částice.

Dalším druhem záření je Čerenkovovo záření, které vzniká v důsledku pohybu částice v prostředí rychleji než se v něm pohybuje světlo. Částice tímto způsobem velké množství energie neztratí, ale tento efekt je velmi důležitý pro detekci částic. Částice totiž jinak není snadné detekovat, ale světlo vzniklé v důsledku Čerenkovova záření (obvykle je modré) již detekujeme pomocí například fotonásobičů či fotodiod.

Posledním typem je přechodové záření, které vzniká při přechodu částice mezi prostředími s různými indexy lomu světla (ekvivalentně s různou dielektrickou konstantou). V důsledku vytvoření časově proměnného dipólu dojde k vyzáření elmag kvanta.

18.1.3 Fotony

Pro fotony známe tři základní interakce (resp. druhy ztrát energie) a to fotoefekt (podstatný pro nejnižší energie ≈ 100 keV, vysokoenergetické fotony se dostanou hluboko do materiálu), Comptonův rozvoj (široký střední obor energií, řádově MeV, nedominuje ale jen je solidním příspěvkem) a tvorba elektron-pozitronových párů (pro dostatečně vysoké energie $\gg 1,022$ MeV jasně dominuje).

Fotoefekt rozeznáváme vnitřní (elektrony jsou z valenčního pásu excitovány do vodivostního, tedy neopouštějí materiál, využití u snímačů digitálních foťáků) a vnější (excitace elektronu ho zcela vyrazí z atomového obalu, využívají foto-násobiče), u obou ale foton zcela zaniká. U Comptonova rozptylu naopak foton přežívá jen se změnila jeho dráha a změnila energie část ji totiž předal elektronu.

Pro porovnání uvádím jak závisí účinné průřezy na protonovém čísle Z materiálu a energii γ kvanta:

$$\sigma_f \sim \frac{Z^5}{E_\gamma^{7/2}} \quad \sigma_C \sim \frac{Z}{E_\gamma} \quad \sigma_p \sim Z^2 \ln 2E_\gamma. \quad (18.6)$$

18.1.4 Vliv na lidský organismus

Jaderné záření může působením na živou tkáň poškodit, zničit či výrazně změnit funkčnost jednotlivých buněk a tím ohrozit zdraví či život člověka. Proto se množství ozáření hlídá a fyzikální veličiny ozáření jsou definovány dokonce v zákoně. Zavedme tedy tyto veličiny:

- Aktivita - udávaná v becquerelech, vypovídá o intenzitě uvolňování záření ze zářiče. Přesně je to množství jaderných přeměn za jednotku času ($1 \text{ Bq} = 1 \text{ přeměna}/1 \text{ s}$). Běžná aktivita zářičů v praxi, které nejsou vůbec zdraví nebezpečné, je 100 kBq .
- Dávka - udává se v grayích. Říká nám jaké množství energie záření se předalo jednotce hmotnosti prostředí ($1 \text{ Gy} = 1 \text{ J}/1 \text{ kg}$).
- Dávkový ekvivalent - udává se v sievrtech [Sv]. Je to stejné jako dávka jen navíc zohledňuje nebezpečnost typu záření na živou tkáň tím, že se dávka vynásobí tzv. radiačním váhovým koeficientem W_R .
- Příkon dávkového ekvivalentu - je to jen dávkový ekvivalent vztažený na určité časové období. Průměrná hodnota přírodního pozadí v ČR je $3 \text{ mSv}/\text{rok}$ (v Íránu je to až $400 \text{ mSv}/\text{rok}$).

Je dobré znát jak záření má nejvyšší radiační váhový faktor, protože ty jsou nejnebezpečnější. Pro α záření a ozáření jinými těžkými jádery je tento faktor 20, ale jak známo tak α záření je zase poměrně snadné odstínit (proniká jen do max. milimetrů). Protony a piony mají $W_R = 2$, neutrony přibližně $6 > W_R > 2,5$, rentgen, β záření, γ záření a miony $W_R = 1$ (ovšem tato záření velmi snadno pronikají hluboko do materiálu a je velmi obtížné je odstínit).

Původ přírodního pozadí je nejvíce z radonu v budovách (50%), γ záření Země (17%) a kosmické záření (14%).

Pro pracovníky s radiací je roční limit $50 \text{ mSv}/\text{rok}$ přičemž je možné ho dosáhnout jen jedenkrát za 5 let a dále je limit $100 \text{ mSv}/5 \text{ let}$. Pro obyvatele je roční

limit nad rámec přírodního pozadí 1 mSv/rok, což se kontroluje např. při exkurzích v jaderných elektrárnách či výzkumných ústav, kde je kontrolované pásmo. Běžně se jinak člověk s ozářením (vyjma přirozeného pozadí) setká jen při lékařských vyšetřeních (hodnoty pro vybraná jednorázová vyšetření: rentgen páteře 1,8 mSv, CT hlavy 1,1 mSv. Kvůli kosmickému záření může člověk vyšší dávky dostat i během letu 4 μ Sv/hod.

Nebezpečné hodnoty jsou již 100 mSv/rok, kdy je prokázané zvýšení možnosti vzniku rakoviny. Jednorázová smrtelná dávka je 8 Sv.

18.1.5 Detektory částic

V prvopočátcích se k detekci používala **fotoemulze**, z níž se pak získal snímek a ten se zkoumal pod mikroskopem. V dnešní době se fotoemulze využívá občas pro její dobré prostorové rozlišení a jasnou detekci. Další byly **mlžné** a **bublínkové komory**, kde se využívalo toho, že ionty svým průletem způsobily kondenzaci přechlazené páry či předáním energie vytvořili v přehřáté kapalině bublinky, které se následně vyfotily a snímky byly dále zpracovávány.

18.1.5.1 Plynové ionizační komory

Následují plynové ionizační detektory, u kterých částice svým průchodem způsobí ionizaci plynu a tyto ionty jsou zachycovány na elektrody. Z nich jsme pak získali elektrický signál, který se dále zpracovával. Důležité rozdílly se dají získat přiložením různě velkého napětí na sběrné elektrody, podle toho rozlišujeme:

- Ionizační komora - jen zaznamenává malá elektrické signály přicházející z elektrod, protože pro příklad argonu je ionizační energie na vznik jednoho iontu 26 eV přičemž, ale minimální ionizační ztráty v něm jsou 2,7 keV/cm tedy pokud částice projde jen 1 centimetrem detektoru je třeba zaznamenat změnu proudu v obvodu úměrné 100 elementárním nábojům.
- Proporcionální komora - tvořena válcovou katodou a anodou ve tvaru tenkého drátku uvnitř. Přivedeme na elektrody vysoké napětí, čímž dosáhneme toho, že při průchodu částice detektorem vznikne ne jeden iont ale celá lavina (zesílení např. 10^6).
- Geiger-Müllerův počítač - operuje při tak vysokých napětích na elektrodách, že jediný iontový pár způsobí výboj v plynu.

18.1.5.2 Další dráhové detektory

Do této kategorie spadají mnoho-drátové komory a tzv. driftové komory.

V dnešní době jsou především na velkých experimentálních zařízeních používány mnoho-drátové komory, které jsou umístěny v nejbližším okolí místa srážek a mají za úkol zaznamenávat dráhu vyletujících částic, které jsou navíc silným magnetickým polem ohýbány. Jejich princip je v podstatě velmi jednoduchý. Buďto máme jednu vrstvu, ve které je těsně vedle sebe umístěno velké množství tenkých drátků (které tvoří anodu) v podélném směru, a nad ní je další vrstva tenké katody. Dále pak opět vrstva s tenkými drátky, ale tentokrát v příčném směru, pak jim říkáme stripové detektory. Celkově jsou detektory obtočeny kolem válcovité

trubice. Nebo je druhý typ tzv. pixelové detektory, která jsou sestaveny z mnoha velmi malých obdelníků, které každý sám vyčítá zda v něm prošla částice či nikoliv.

Driftové komory jsou založeny na velmi přesném měření času. Měří se rozdíl časů, kdy dorazí uvolněný elektron z atomového obalu na anodový drát, a kdy dorazí zbylý kladný kationt z atomu na katodu (ta je plošná). Díky tomu zjistíme, v jaké vzdálenosti mezi elektrodami vznikl elektron a iont, což bylo způsobeno průchodem sledované částice.

18.1.5.3 Polovodičové detektory

Fungují opět na principu excitace elektronů podobně jako ionizační komory fungují na základě ionizace. Pokud se částice dostane do polovodiče (obvykle je použit kus čistého křemíku či gallia), díky elektromagnetickému působení dodá některému z elektronů dostatek energie na to, aby z valenčního pásma se dostal přes zakázané až do vodivostního, čímž vznikne v materiálu pár elektron-díra. Jediný problém je, že kvůli velkému počtu děr v polovodiči z tepelného šumu se nám signál, který není zas tak velký ztrácí. Tento nedostatek odstraníme silným chlazením a omezením tepelného pohybu. A také vytvořením PN-přechodu, protože pak po vytvoření páru elektron-díra průchodem částice se každý rozběhnou na svou stranu a vznikne tím změna napětí, které měříme.

18.1.5.4 Scintilační detektory

Jejich princip je založen na vyzáření jistého množství elmag záření při deexcitaci atomů. Ty se opět excitovali díky předání energie z prolétávající částice. Ke scintilátorům pak již stačí přidat nějaké zařízení, které přemění světelný signál na elektrický. To jsou například fotonásobiče, které mají na začátku destičku z materiálu, který má malou výstupní práci při fotoefektu. Takto uvolněné elektrony jsou elektrickým polem usměrněny a postupnými nárazy do dynod (elektrod speciálně tvarovaných ze materiálů), které sekundární emisí snadno uvolní další elektrony a tím vznikne již dobře měřitelný elektrický signál. Jiným zařízením jsou tzv. fotodiody, které jsou vlastně jen polovodičový PN přechod zapojený v závěrném směru a pokud projde částice vzniknou elektron-díra páry, které mají za následek průchod proudem obvodem, který se opět zaznamenává (vylepšením této metody jsou APD diody, kde se navíc využívá lavinového efektu při tvorbě elektron-díra párů). Scintilátory rozlišujeme organické a anorganické (dle chemického složení). Možnými materiály jsou například plasty obohacené olozem, aromatické uhlovodíky či sloučenina NaI(Tl).

18.1.5.5 Kalorimetry

Jsou to zařízení na urychlovačích, které mají za úkol měřit energii částic. V principu se v materiálu kalorimetru rozvine v důsledku interakcí primární (nalétávající) částice vytvoří sekundární částice a ty zase interakcí vytvoří množství dalších částic. Tomuto procesu říkáme sprška a rozlišujeme elektromagnetické, které obsahují elektrony, pozitrony a fotony a jsou rozvíjeny v důsledku elektromagnetické interakce, a druhým typem jsou hadronové, které jsou rozvíjeny v důsledku silné interakce částic jako například nukleony, piony a mnoho dalších.

Spršky se rozvíjí tak dlouho, dokud energie sekundárních částic neklesne pod určitou úroveň energie, kterou nazýváme kritickou. Výhodou kalorimetrů je, že ke svému měření nepotřebují magnetické pole na rozdíl například od dráhových detektorů. Jejich konstrukce se odvíjí od požadavku, aby výstupní signál byl co nejlépe přímo úměrný energii primární částice (provádí se testování na svazcích s dobře definovanou energií).

Dle použité technologie dělíme kalorimetry na homogenní a vrstevnaté. Homogenní jsou tvořeny jedním typem materiálu, který zajišťuje detekci i rozvíjení elektromagnetické spršky (na hadronové spršky se používá výhradně vrstevnatých kalorimetrů). Mezi materiály, které se používají patří olovnaté sklo a vzácné plyny v kapalném skupenství. Vrstevnaté kalorimetry naproti tomu jsou tvořeny vrstvami absorbátoru prokládanými vrstvami aktivních materiálů. Jako absorbatory obvykle slouží dostupné kovy (železo, olovo) a jako aktivní médium jsou často používány scintilátory z nichž je světelný signál odváděn pomocí tzv. wavelenght shifterů, což jsou v podstatě optická vlákna nesoucí jen úzké spektrum vlnových délek.

Dle účelu rozdělujeme kalorimetry na elektromagnetické (EMC) a hadronové (HC). EMC zaznamenávají jen energii z elektromagnetický spršek a HC zase jen z hadronových. Z důvodů charakteristických rozměrů elmag spršek a hadronových spršek jsou EMC u velkých a komplexních experimentů zařazeny před HC, protože hadronová sprška se začne rozvíjet až po průletu většího množství materiálu. Jsou však i částice, s jejichž zaznamenáním mají kalorimetry velký problém, jsou to hlavně miony a neutrina. Neutrina neinteragují skoro vůbec s čímkoliv (jen v opravdu velkém množství materiálu se je podaří detekovat). U mionů zase narážíme na problém, že neinteragují silně a tedy hadronovou spršku nerozvíjí vůbec, a elektromagnetická interakce je zase celkem slabá na to, aby vysokoenergetické miony výrazně zbrzdila. Proto má detektor ATLAS v CERNu obří systém mionových komor, díky kterému zaznamenávají energii procházejících mionů a je tedy jasné jaké množství energie primární částice uteče.

18.2 Spektrometrie jaderného záření

Spektrometrie se zabývá měřením energie záření (resp. částic). Pro různé typy částic byly vyvinuty různé typy detekce a výpočtu energií:

- Těžké nabitě částice - jejich energii je nejsnazší určit z měření jejich doletu (délku dráhy můžeme získat z fotoemulze, bublinkové či mlžné komory).
- Libovolné nabitě částice - pomocí magnetického pole měníme jejich dráhu, kterou sledujeme dráhovými detektory a následně počítáme jakou měli energii.
- γ záření - z interakce záření s prostředím například v polovodičových detektorech. Pro malé energie se dá využít i difrakce na krystalické mřížce.

Pro každý spektrometr je třeba udat jeho energetické rozlišení, rozsah a detekční účinnost.

Jinak lze použít i univerzálnější kalorimetry, polovodiče či ionizační komory (kde je výstupní elektrický signál úměrný energii částic).

18.3 Umělé zdroje jaderného záření

18.3.1 Lékařské vyšetření

V dnešní době se čím dál tím více využívá různých metod ozáření, protože se tím dají získat velmi detailní a kompletní informace o těle pacienta aniž by musel „pod kudlu“. Mezi tato vyšetření patří rentgen, počítačová tomografie (CT) a irigoskopie. Lékařská vyšetření v průměru tvoří až 10 % z celkového ozáření jedince (započteny jsou všechny přírodní vlivy). Hodnoty pro některá vyšetření jsou již v části Vliv na lidský organismus.

18.3.2 Urychlovače částic

Urychlovače částic nám slouží k získání intenzivních svazků iontů nebo částic s velkou rychlostí a energií. Takto urychlené částice nám totiž poskytují možnost dívat se i do temnějších hlubin hmoty a třeba k pochopení principu jejího fungování. Nejvýkonnější urychlovače dneška jsou schopné dosáhnout několika TeV, což z makroskopického hlediska není příliš (odpovídá cca 10^{-7} J), ale pro částice v malou klidovou hmotností je to jinak. Tak například pokud bude mít proton kinetickou energii 200 keV bude jeho rychlost 2 % c a pro přibližně 2000–krát lehčí elektron to bude znamenat dokonce 70 % c . Je zajímavé si uvědomit, že slovo urychlovač vlastně ztrácí pro vysoké energie trochu význam, protože částice již nezískávají větší rychlost (mají například již 99 % c) ale jejich dalším „urychlením“ jim dodám především větší množství energie a v důsledku Einsteinova vztahu jim zvýšíme relativistickou hmotnost.

Urychlovače částic nejsou v dnešní době jen vymoženost a velká hračka fyziků, ale instalují se i v průmyslu, malých výzkumných centrech a velkou novinkou jsou i v oboru lékařství (zajímavá aféra mezi Všeobecnou Zdravotní Pojišťovnou a nemocnicí na Motole, kde byla snaha zavést novou léčebnou metodu rakoviny (vyvinutá v centru GSI v Německu) pomocí ozáření svazkem částic, kterou nechce pojišťovna hradit).

18.3.2.1 Základní principy a dělení

Základní princip urychlování částic s elektrickým nábojem Q je velice prostý a to ho umístit do elektrického pole mezi dvě elektrody, které mají mezi sebou v důsledku rozdílných potenciálů napětí U . Částice pak získá kinetickou energii

$$T = QU \quad (18.7)$$

(odtud plyne používání jednotek eV elektronvolt, neboť je snadné zjistit velikost náboje částice jako násobku elementárního náboje a také urychlovací napětí).

Technicky je v dnešní době možné udržet na elektrodách napětí o velikosti 10 MV. Pro jadernou fyziku nám podobné hodnoty stačí (obvykle je třeba urychlit těžké ionty například zlata či olova na energie několika MeV), ale v částicové fyzice potřebujeme co možná největší energie, aby bylo možné prozkoumat čím dál tím nižší úroveň struktury hmoty. Proto je nutné najít způsob jak částice urychlit několikanásobně, proto se nabízí dva základní přístupy k urychlovačům a to lineární a kruhové. Urychlené svazky částic často obsahující miliardy stejných částic by samozřejmě po urychlení se měli od sebe oddělit vzhledem k elektric-

kému náboji, aby toto nenastalo je nutné částice držet pomocí magnetického pole (dipólové ale hlavně kvadrupólové působení).

Z důvodu toho, že nabitá letící částice, jejíž dráha je zakřivená vyzařuje elektromagnetické záření (tzv. synchrotronové), je výhodné lehké částice (elektrony a pozitrony) urychlovat na lineárním urychlovači, kdežto těžší částice (protony, ionty) u nichž vyzařené energetické ztráty nejsou relativně tak velké urychlovat na kruhových urychlovačích, kde je možné na malém prostoru dosáhnout vysokých energií. Neutrální částice není možné přímo urychlovat, ale je možné urychlit nabitě částice, které pomocí různých reakcí přeměníme na neutrální s vysokou energií.

18.3.2.2 Lineární urychlovače

Jak název napovídá částice se v tomto případě pohybují a jsou urychlovány na dráze tvaru přímky (resp. úsečky) a tedy urychlovacím zařízením projdou jen jedenkrát. Lineární urychlovače dále dělíme dle typu urychlujícího potenciálu na elektrostatické a rezonanční.

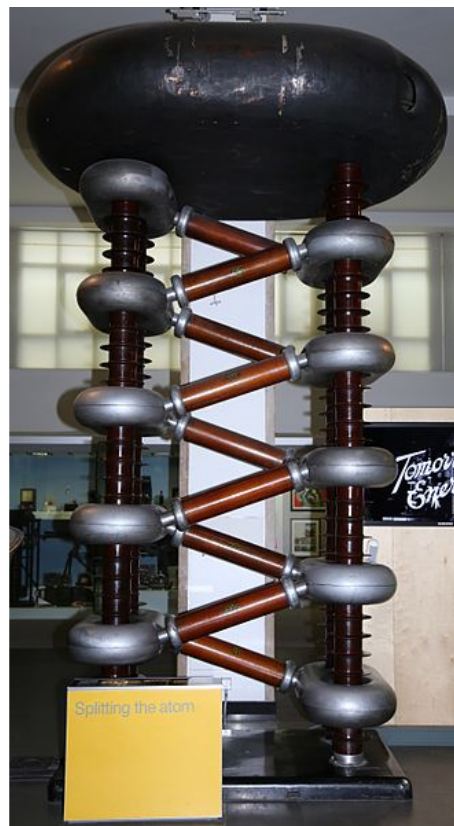
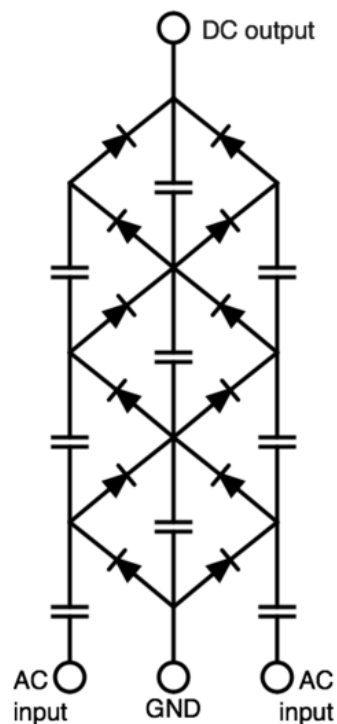
Elektrostatické urychlovače

Částice projdou mezi dvěma elektrodami elektrostatickým polem, jehož rozdíl potenciálů dosahuje maximálně několika MV. Takto velkého napětí můžeme dosáhnout pomocí dvou možných metod:

Kaskádní generátor Principiálně se jedná o násobič napětí, který se skládá z kaskády kondenzátorů a usměrňovacích diod. První typ sestrojili pánové Cockcroft a Wallton z Cavendishových laboratoří v Cambridgi v roce 1932 a díky pozorování jaderných reakcí za použití prvního urychlovače dostali v roce 1951 Nobelovu cenu (viz obrázek 18.1). Jedná se však o velmi nákladné zařízení a tak byl vymyšlen lepší způsob a to..

Van der Graafův generátor Ten využívá pohybujícího se nevodivého pásu, na který srší z jedné elektrody náboj, mechanicky se na pásu přenesa následně je na druhé elektrodě odsáván (i když je tato elektroda stejně elektricky nabitá jako nesený náboj, tak je pro něj energeticky výhodné přejít na vodivý materiál elektrody). Tato horní elektroda je výhodně geometricky tvarovaná (tvoří takovou čepičku jako když si Jágr nasadí kulicha :-)), aby měla velkou kapacitu. Maximální dosažitelné napětí je limitováno elektrickou pevností prostředí, což znamená jen to aby mezi elektrodami nepřeskočil výboj. Proto se generátor umísťuje do vysokotlaké nádoby, kterou naplníme vysušenou směsí plynů (N_2 , CO_2 , SF_6). Problémem tohoto typu generátoru vysokého napětí je malá trvanlivost nevodivých pásů.

Oba typy se používají k tandemovém urychlovači. Ten funguje tak, že ve zdroji se atomům do obalu přidá několik elektronů, nechají se projít ke kladné elektrodě, kde jim do cesty umístíme tenkou fólii, která „utrhá“ atomu většinu elektronů a ten je zas přitážen zpět k záporné elektrodě. tyto urychlovače se používají k materiálové analýze látek či implantace iontů do materiálu.



Obrázek 18.1: Kaskádový generátor schéma + foto.

Lineární Rezonanční Urychlovač (linac)

V rezonančních (někdy též vysokofrekvenčních) lineárních urychlovačích na rozdíl od elektrostatických projde částice urychlovacím potenciálem několikrát a ne jen jedenkrát. Toho je docíleno tak, že částice sice stále letí jedním směrem, ale potenciál se harmonicky mění s tím, jak částice zrychluje. Tedy částice vždy dorazí ke druhé elektrodě, ale v tom okamžiku se elektrody přepólují. A tak stále dál jen s tím rozdílem, že se musí měnit vzdálenost mezi elektrodami tak, jakou rychlost od částic požadujeme. Dochází totiž k tomu, že např. elektrony nedorazí ke druhé elektrodě všechny ve stejný moment a přepólování elektrod je zastihne v jiném místě. To způsobí, že na výstupu z urychlovače máme shluky elektronů, které mají s dost dobrou přesností stejnou energii. V dnešní době se jen místo elektrod používají dutinové rezonátory, jejichž napětí je opravdu harmonické a ne takové skoky jako dělá θ -funce. Největším exemplářem takového urychlovače je SLAC (Stanford Linear Collider) v Kalifornii USA postavený v 90. letech, který urychloval elektrony a pozitrony na energii 50 GeV.

18.3.2.3 Kruhové urychlovače

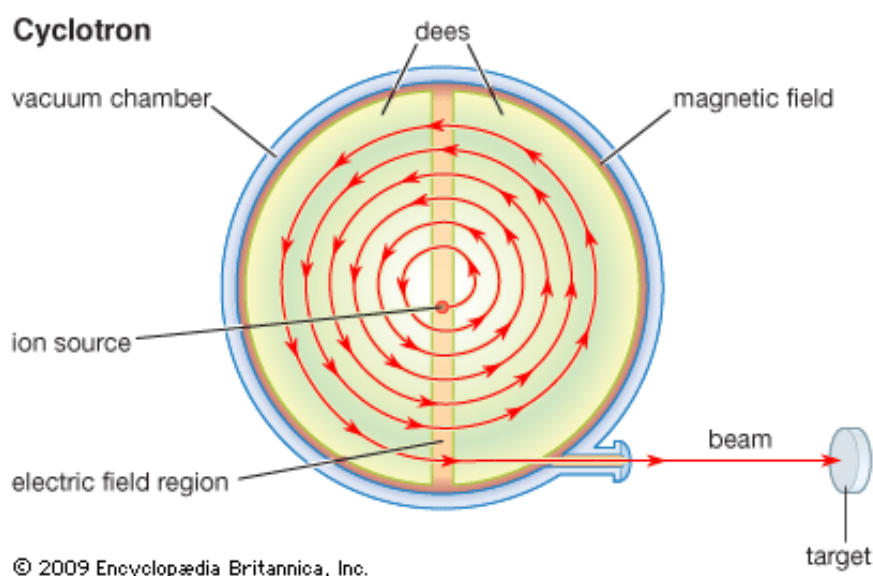
Jejich výhoda je zřejmá, použitím jednoho zdroje napětí díky mnohonásobnému průchodu částice urychlovací částí lze dosáhnout vysokoenergetických částic.

Cyklotron

Schématické znázornění cyklotronu vidíme na obrázku 18.2. Částice zde vyletují ze zdroje umístěného uprostřed a jsou okamžitě urychlovány elektrickým polem, které se nachází mezi duanty (na obrázku dees). V nich jsou trajektorie částic magnetickým polem s velikostí indukce B otočeny o 180° a opět urychleny elektrickým polem, které mezitím změnilo polaritu. A tak stále dál, až energie částic dosáhne maxima pro daný cyklotron a jsou vyvedeny ven. Podobně jako u lineárních rezonančních urychlovačů i zde musí být splněna podmínka synchronosti změny polarity

$$\tau = \frac{2\pi r}{v} = \frac{2\pi m}{qB}, \quad (18.8)$$

kde m a q jsou hmotnost (relativistická) a náboj částice. Je zřejmé, že pro nerelativistickou oblast energií částic stačí zdroj střídavého napětí s konstantní frekvencí. Pokud chceme urychlovat na větší energie musíme kompenzovat zpomalení urychlování v důsledku nárůstu hmotnosti. Taková zařízení pak nazýváme synchrocyklotrony (mění se frekvence urychlovacího napětí) nebo izocyklotrony (mění se velikost magnetického pole). Pro protony dosahují tato zařízení maximální energie stovek MeV. Je samozřejmé, že vnitřní oblast cyklotronu musí být vakuovaná. Cyklotrony jsou velmi dobře zvládnutá technologie urychlovačů a proto jsou relativně levné a mají širokou aplikaci, například: ozařování léčiv, ionizace materiálů.



Obrázek 18.2: Schématický obrázek cyklotronu.

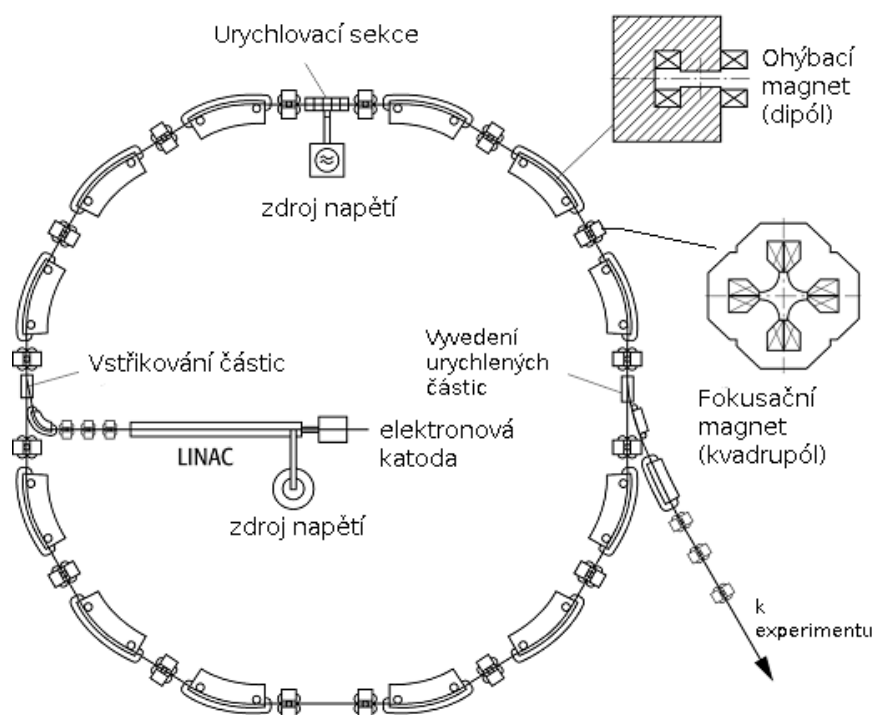
Synchrotron

Schématické znázornění synchrotronu opět nalezneme na obrázku 18.3. Pokud chceme dosáhnout vyšších energií je třeba sestavit urychlovací obvod. Ten bude mít tvar pravidelného kruhu (v jistém přiblížení, protože stále platí, že částice budeme urychlovat na rovných částech a dále je pak budeme pomocí magnetů ohýbat). Ve vakuované trubici se budou pohybovat částice, které na jistých místech pomocí dutinových rezonátorů (viz lineární rezonanční urychlovače) urychlíme a

pak pomocí dipólových magnetů jejich dráhu ohneme, jak budeme potřebovat (příčemž částice budou vyzařovat synchrotronové záření, které se využívá pro další experimenty jako je materiálový výzkum). Množství energie, které částice při zakřivení své dráhy vyzáří se dá vypočítat pomocí vztahu

$$\Delta E [\text{keV}] = 6 \cdot 10^{-12} \frac{\left(\frac{E}{m_0 c^2}\right)^4}{R [\text{m}]}, \quad (18.9)$$

kde E je energie částice, m_0 její klidová hmotnost a R poloměr křivosti dráhy. Následně svazek fokusujeme kvadrupólovými magnety (někdy i vícenásobnými-pólovými magnety). V takto vytvořeném kruhu necháme částice obíhat tak dlouho, jak potřebujeme získat velkou jejich energii. Toto řešení je levné oproti ekvivalentně silným lineárním urychlovačům, ale je potřeba do synchrotronu dodat již urychlené částice a navíc velikost magnetické indukce potřebné k ohýbání a fokusaci roste spolu s růstem energie částic (proto se využívají supravodivé materiály).

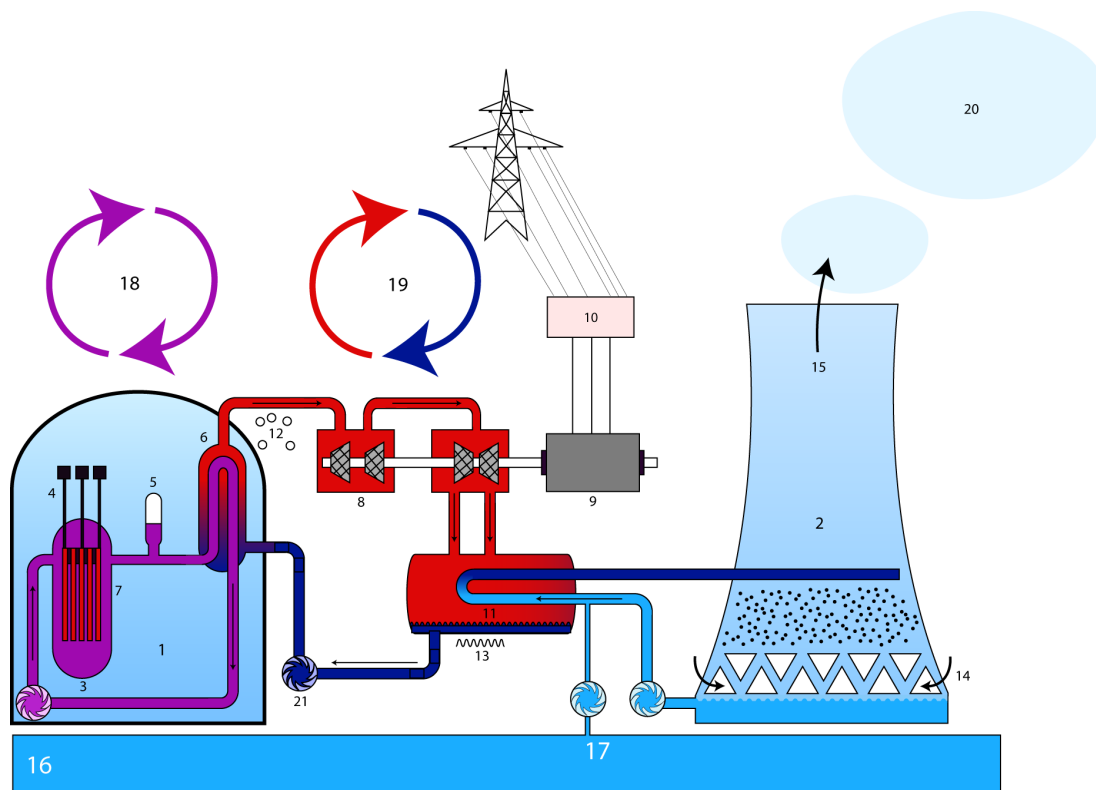


Obrázek 18.3: Schématické znázornění synchrotronu.

18.3.3 Jaderné elektrárny

Princip jejich fungování je velice prostý. Uvolněnou vazebnou energii z rozštěpení jader paliva (uran či plutonium) přeměníme a teplo (prosté ochlazování palivových tyčí) uložené ve vodě. Kvůli tomu, že tato voda primárního okruhu je radioaktivní v důsledku kontaktu se zářením těžkých rozštěpených jader, neutronů a γ záření, je přes výměník tepla tato voda ochlazována vodou ze sekundárního okruhu, která se mění na páru a ta pohání turbíny a ty zase elektrický generátor. Voda v sekundárním okruhu ochlazuje v kondenzátoru, který je tepelně napojen na chladicí věže, ze kterých uniká jen vodní pára. Celý primární okruh

spolu s reaktorem je uzavřen v tzv. kontejneru, což je vlastně jen betonová a ocelová schránka chránící reaktor před možným útokem a zároveň okolí před možnou poruchou a následným únikem radiace. Schématu jaderné elektrárny je na obrázku 18.4.



Obrázek 18.4: Schéma jaderné elektrárny. Význam jednotlivých čísel: 1. Reaktorová hala, uzavřená v nepropustném kontejneru. 2. Chladicí věž. 3. Tlakovodní reaktor. 4. Řídící tyče. 5. Kompenzátor objemu. 6. Parogenerátor. V něm horká voda pod vysokým tlakem vyrábí páru v sekundárním okruhu. 7. Aktivní zóna. 8. Turbína - vysokotlaký a nízkotlaký stupeň. 9. Elektrický generátor. 10. Transformační stanice. 11. Kondenzátor sekundárního okruhu. 12. Plyný stav. 13. Kapalný stav. 14. Přívod vzduchu do chladicí věže. 15. Odvod teplého vzduchu a páry komínovým efektem. 16. Řeka. 17. Chladicí okruh. 18. Primární okruh (voda pouze kapalná pod vysokým tlakem). 19. Sekundární okruh (červeně značena pára, modře voda). 20. Oblaka vzniklá kondenzací vypařené chladicí vody. 21. Pumpa

19. Atomové jádro

Čerpáno převážně z knihy

I. Úlehla, M. Suk, Z. Trka: Atomy, jádra, částice, Academia, Praha 1990.

Jelikož rozvoj této části fyziky nastal v důsledku několika významných experimentů, začneme pro úvod jimi. Ukážeme si tím rovnou, oprávněnost některých předpokladů a poznatků.

Rutherfordův experiment měl rozhodnout, zda je Thompsonův „pudinkový“ model atomu oprávněná hypotéza. Ukázal, že nikoliv, správný model je planetární.

J. J. Thompson již z dřívějších poznatků usoudil, že jsou-li atomy celkově elektricky neutrální a přesto obsahují nabitě elektrony, pak musí mít nějakou vnitřní strukturu. Jím navržený model měl podobu kladně nabitě látky, v níž „plavou“ záporně nabitě elektrony. E. Rutherford v návaznosti na to navrhnul experiment, kdy pomocí α -částic (neboli jader ${}^4\text{He}$) bude ostřelovat velmi tenkou fólii zlata a bude pozorovat dopad částic v různých úhlech vůči původnímu svazku. Jelikož zdrojem částic byl radioaktivní rozpad, měly α -částice prakticky konstantní energii.

První předpoklad, že α -částice budou látkou procházet obtížně, byl zcela vyvrácen - naopak procházely velmi snadno. Tedy se jednotlivé atomy jevily α -částicím jako téměř prázdné místo.

Další předpoklad byl, že částice budou vychýleny od původního směru jen o velmi malý úhel, což bylo rovněž vyvráceno tím, že bylo možno pozorovat částice vychýlené i zpět do zdroje (tedy o téměř 180°).

Z klasické mechaniky pro pohyb v centrálním poli (potenciální energie $U(r)$) můžeme ukázat, že při vyšetřování pohybu stačí uvažovat rovinný pohyb v rovině $x - y$ a tedy možný přechod do polárních souřadnic $r - \varphi$. Celkovou energii

$$E = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2) + U(r) \quad (19.1)$$

tak můžeme zapsat jako

$$E = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2) + U(r) \quad (19.2)$$

kde m je hmotnost pohybující se částice a časová derivace je značena tečkou. Jelikož se jedná o centrální pole, zachovává se energie a je i moment hybnosti částice konstantní. Jeho z -tová složka je tedy (při naší volbě pohybu v rovině $x - y$ je L v ose z)

$$L = L_z = \text{konst.} = xp_y - yp_x = mr^2\dot{\varphi} \quad (19.3)$$

Dosazením získáváme

$$E = \frac{m\dot{r}^2}{2} + \frac{L^2}{2mr^2} + U(r) \quad (19.4)$$

Integrací (19.4) a (19.3) a separací proměných z (19.3) získáme vztah pro $\varphi(r)$, který ukazuje, že drahami jsou různé kuželosečky, přesněji pro námi zvolenou nezápornou potenciální energii se jedná o hyperboly.

Vzhledem k tomu, že se jedná o rozptyl nabitých částic na kladně nabitých

jádrech, budeme uvažovat Coulombickou interakci mezi těžkým jádrem (dále považujeme za statické) a lehkou α -částicí. Potenciální energie je

$$U(r) = \frac{2Z}{r} \cdot \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \quad (19.5)$$

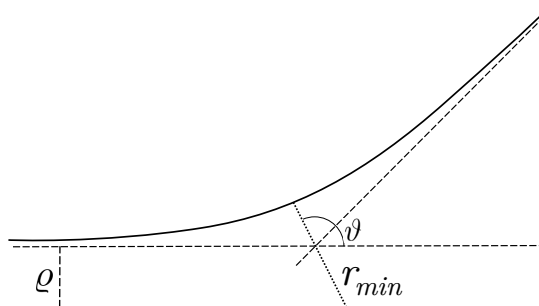
Nesledujeme však pohyb jediné částice, ale celkový rozptyl. Proto si zavedeme veličinu, která nezávisí na počtu částic N , ale charakterizuje rozptyl - diferenciální účinný průřez

$$d\sigma = \frac{dN}{n} \quad (19.6)$$

kde n je počet částic, co projdou jednotkovou plochou za jednotku času. Dále budeme předpokládat, že se částice před rozptylem ve větší vzdálenosti od rozptylového pohybuji po drahách rovnoběžných s osou svazku a jádro na ně ještě nepůsobí. Tedy

$$E = \frac{1}{2}mv_0^2 \quad (19.7)$$

a náš problém je osově symetrický - rozptylové centrum je na ose svazku dopadajících částic.



Obrázek 19.1: Hyperbolická dráha částice

Pro zjištění počtu částic dopadajících do nějakého prostorového úhlu tak stačí uvažovat v rovině rovnoběžné s osou svazku - viz obr. 19.1. Z něj vidíme, že částice dopadající do prostorového úhlu $d\Omega = (\vartheta, \vartheta + d\vartheta) \times (\varphi, \varphi + d\varphi)$ (kde φ je úhel charakterizující rovinu kolmou na osu svazku) musí nejprve projít ploškou $(\varrho, \varrho + d\varrho) \times (\varphi, \varphi + d\varphi)$. Tato ploška je část z mezikruží o ploše $2\pi \cdot \varrho(\vartheta) \cdot d\varrho$. Počet částic rozptýlený do prostorového úhlu $d\Omega$ tak je

$$dN = n \cdot \varrho(\vartheta) \cdot d\varrho \cdot d\varphi \quad (19.8)$$

Nyní využijeme poznatků z pohybu v centrálním poli a zjištěný diferenciální účinný průřez můžeme vyjádřit jako

$$d\sigma = \frac{1}{4} \cdot \frac{Z^2 \cdot e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \cdot E^2} \cdot \frac{d\Omega}{\sin^2 \frac{\vartheta}{2}} \quad (19.9)$$

Srovnání tohoto vztahu a experimentálně získaných hodnot mělo výbornou shodu. Rovněž tento přístup dovozoval zjistit přibližnou velikost jádra - nejbližší se dostane částice s minimálním momentem hybnosti, která bude na své dráze k jádru nejbližší ve vzdálenosti

$$r_{min} = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot E} \quad (19.10)$$

což pro α -částice o energii $E = 7,7$ MeV a zlatou fólii $Z = 79$ vychází přibližně $r_{min} \approx 3 \cdot 10^{-14}$ m.

Z Rutherfordova experimentu tak máme přibližný model atomu - okolo těžkého jádra o přibližné velikosti 10^{-15} obíhají lehké elektrony, které tak tvoří obal o velikosti 10^{-10} . S tímto modelem ale přichází rovněž nová otázka: jestliže je tato soustava analogií sluneční soustavy, pak se elektrony pohybují po zakřivených drahách okolo jádra. Nabitá částice by při nerovnoměrném pohybu měla vyzařovat část své energie. V rámci doby 10^{-10} s by tak měl elektron veškerou svou energii vyzářit a „spadnout“ do jádra. Tato otázka pak nastartovala vývoj kvantové mechaniky (viz kapitola 15).

O několik let později Rutherford pokračoval dalším pokusem - **transmutací prvku**.

Ve Wilsonově mlžné komoře „ostřeloval“ pomocí α -částic atomy dusíku. Původní stopa se pak rozdělila na dvě, z nichž jedna šla identifikovat jako jádro ionizovaného kyslíku a druhá jako atom vodíku, neboli probíhala reakce



Jádra tedy obsahovala protony (jak byla nazváno jádro nejjednoduššího prvku). Vznikl nový problém: atomová čísla neodpovídala celkové hmotnosti atomů M

$$Z \cdot m_p < M \quad (19.12)$$

a celková hmotnost atomů ani nebyla celistvým násobkem hmotnosti protonů¹.

Chadwickovým pokusem pak byly objeveny neutrony.

Reakcí



byly objeveny částice s podobnou hmotností jako protony, avšak nemající elektrický náboj.

19.1 Základní vlastnosti a charakteristiky atomového jádra

Jak jsme si ukázali, skládá se atom z elektronů, protonů a neutronů. Pro jeho charakterizaci tak využíváme **tři čísla**.

Atomové číslo Z udává počet elektronů, neboli také počet protonů v jádře a dle tohoto čísla jsou prvky řazeny v periodické tabulce. *Neutronové číslo* N udává počet neutronů v jádře. *Hmotnostní (nukleonové) číslo* A udává počet protonů a neutronů v jádře, neboli

$$A = Z + N$$

Nuklid je soubor několika atomů, jež mají stejná všechna tři čísla - značíme symbolem ${}^A_Z\text{X}$, kde X je chemická značka daného prvku. *Izotopem* prvku X pak značíme nuklid, který se od dalších nuklidů liší v N . Dále můžeme využít i pojmů *izobar* (A stejná, Z různá) a *izoton* (N stejná, Z různá).

¹Tento vztah nemusí být zcela přesný. Ze speciální teorie relativity víme, že klidová energie jader musí být menší než součet klidové energie protonů a vazbové energie

Izomer značí nuklid, jehož jádra jsou delší dobu ve stejném vzbuzeném stavu - značíme ${}^A_m Z X$ a *radionuklid* nuklidy, jejichž jádra jsou nestabilní a rozpadají se.

Dle sudosti či lichosti Z a N pak můžeme charakterizovat i stabilitu nuklidu. Nestabilnější jsou jádra sudo-sudá, nejméně stabilní lichá-lichá.

Hmotnost jádra vyjadřujeme obvykle pomocí hmotnostní jednotky u , což je 1/12 hmotnosti C, neboli

$$u = 1,660 \cdot 10^{-27}$$

jelikož změření poměru je přesnější. Hmotnost celého atomu $m({}^A_Z X)$ s jádrem o hmotnosti $M(A, Z)$ pak je

$$m({}^A_Z X) = M(A, Z) + Z \cdot m_e - \frac{|W_a(A, Z)|}{c^2} \quad (19.14)$$

kde $W_a(A, Z)$ značí vazbovou energii atomu (viz dále) a pro neveliká Z ho můžeme často zanedbat.

K určení hmotnosti se využívají hlavně hmotové spektrometry, které se skládají ze tří hlavních částí. V první části se nachází nějaký iontový zdroj, v druhé energetický selektor, který vybírá pouze částice s vhodnou energií, a v třetí magnetický analyzátor, který různě rychlé ionty se stejnou hmotností zfokusuje do stejného místa.

Jak jsme si ukázali, jde určit **rozměr jádra** například Rutherfordovým experimentem (rozptyl α -částic na jádrech Au). Další možností je odhad z coulombické elektrostatické energie jádra. Považujeme jádro za elektricky nabitou kuličku s poloměrem R , jeho elektrostatická energie pak je

$$E_C = \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\vec{r}) \cdot \rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dV dV' \quad (19.15)$$

kde $\rho(\vec{r}) = konst.$ Integrací přes celý objem jádra získáváme

$$E_C = \frac{3}{5} \cdot \frac{Z^2 e_0^2}{R} \quad (19.16)$$

přičemž známe celkový náboj jádra a jeho elektrostatickou energii.

Experimentálně bylo zjištěno, že dosah jaderných sil odpovídá $R = r_0 \cdot A^{1/3}$, což zde dává hodnotu $r_0 = 1,2 \cdot 10^{-15}$ m, u Rutherfordova pokusu $r_0 \approx 1,52 \cdot 10^{-15}$ m. Z rozptylu neutronů o přibližné energii 100 MeV na jádrech získáváme hodnotu $r_0 \approx 1,35 \cdot 10^{-15}$ m.

Pro určení **rozložení hustoty elektrického náboje v jádře** můžeme vycházet ze znalosti pružného rozptylu elektronů na jádrech. Diferenciální účinný průřez pro pružný rozptyl na jádře s atomovým číslem Z (tedy srážka bez excitace jádra) je

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_M |F(\vec{q})|^2 \quad (19.17)$$

kde $d\Omega = \sin\vartheta \cdot d\vartheta \cdot d\varphi$, indexem M je označen teoreticky určený účinný průřez pro rozptyl elektronu na bodovém jádru, neboli *Mottův účinný průřez*. Veličina $F(\vec{q})$ se nazývá strukturním faktorem (formfaktorem) a je rovna

$$F(\vec{q}) = \int \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{q} \cdot \vec{r}\right) \rho(\vec{r}) dV \quad (19.18)$$

a charakterizuje nábojovou strukturu jádra, přičemž $\vec{q} = \vec{p}' - \vec{p}$ je přenesená hybnost (rozdíl hybností elektronu před srážkou a po srážce).

Srovnání experimentálně zjištěných hodnot účinného průřezu a teoreticky zjištěného Mottova, můžeme zjistit formfaktor. Pro přesnější zjištění rozložení pak musíme využít elektrony s vyšší energií² - pro elektrony s energií 190 MeV až do 6 GeV byla určena hustota náboje pro jádra s $A > 10$ Saxon-Woodsovým rozdělením jako

$$\varrho(r) = \frac{\varrho_0}{1 + \exp\left(\frac{r-c}{z}\right)} \quad (19.19)$$

kde ϱ_0 je dáno normalizační podmínkou

$$Z \cdot e = \int_V \varrho(r) dV \quad (19.20)$$

a z porovnání experimentu s teorií má parametr z udávající rychlost poklesu $\varrho(r)$ u povrchu jádra hodnotu asi $0,5 \cdot 10^{-15}$ m a prakticky nezávislou na A , parametr c udávající vzdálenost, kde $\varrho = \varrho_0/2$, je dán přibližně vztahem $c = c_0 \cdot A^{1/3}$, kde $c_0 = 1,05 \cdot 10^{-15}$ m. Z čehož, známe-li hustotu rozdělení náboje, můžeme určit střední poloměr jádra jako

$$\bar{R} = \frac{1}{Z \cdot e} \int_0^\infty r \cdot \varrho(r) \cdot 4\pi r^2 dr \quad (19.21)$$

Spin, parita a izospin jsou kvantová čísla, pomocí nichž můžeme charakterizovat jádro.

Spin jádra je určen složením spinů všech nukleonů a jejich orbitálních momentů dle pravidel o skládání momentů hybnosti. Pro kvadrát spinu jádra o velikosti I máme vztah

$$\vec{I}^2 = \hbar^2 I(I+1) \quad (19.22)$$

Částice s celočíselnou velikostí spinu nazýváme *bosony* (mnohačasticové stavy totálně symetrické), s poločíselnou velikostí *fermiony* (mnohačasticové stavy totálně antisymetrické). Průmět spinu do vybraného směru, například do směru vnějšího makroskopického magnetického pole, nabývá hodnot $I_z = M \cdot \hbar$, kde $M \in \{-I, -I+1, \dots, I-1, I\}$, kde M označuje často magnetické kvantové číslo.

Spin jádra chápeme jako vlastní moment hybnosti v základním energetickém stavu jádra. Je ale možné charakterizovat vzbuzeňé stavy jádra jeho spinem.

Experimentálně bylo zjištěno, že základní stavy jader mají poměrně malé spiny (nejvyšší hodnota $I = 6$ u ${}_{23}^{50}\text{V}$). Spiny s lichým počtem nukleonů nepřevyšují hodnotu $I = 9/2$. Všechna sudo-sudá jádra mají nulový spin.

Zjištění hodnoty spinu jádra je možné buď přes jeho magnetický moment (viz dále), nebo přes rozbor rotačních spekter dvouatomových molekul se shodnými jádry. Spiny vzbuzeňých jader se určují ze zákona zachování momentu hybnosti při β -rozpadech, elektromagnetických přechodech a jaderných reakcích.

Paritu udáváme vždy u základního stavu jádra a nahlížíme na ni jako na vnitřní paritu (neboli paritu vlnové funkce částice v systému, kde je tato částice

²Se zvýšením energie se zmenšuje odpovídající vlnová délka dle de Brogliovy relace $\lambda \cdot p = h$, $f \cdot h = E$, kde h je Planckova konstanta.

v klidu, případně systému částic, kde je celková hybnost nulová)³.

Experimentální výsledky ukazují, že parita sudo-sudých jader je kladná, u ostatních může být kladná i záporná (např. u jádra $^{17}_8\text{O}$ je $+1$, u jádra $^{15}_7\text{N}$ je -1). Obvykle paritu značíme pomocí horního indexu u spinu (tedy např. I^+ , I^-).

Pokud je parita excitovaného stavu shodná s paritou základního stavu, mluvíme o excitovaných stavech s *normální paritou*, pokud ne, pak o stavech s *nenormální paritou*. Obvykle je mezi základním stavem a prvním stavem s nenormální paritou několik stavů s normální paritou.

Pro slupkový model atomu (viz dále), bude parita určena vztahem

$$P = \prod_{i=1}^A (-1)^{l_i} \quad (19.23)$$

kde l_i je kvantové číslo momentu hybnosti nukleonu i . Z čehož vidíme, že jednočásticové stavy s nenormální paritou by měly v tomto modelu vznikat při změnách l o liché číslo., což nám dovoluje konfrontovat model s experimentem.

Při α a γ přechodem se parita systému zachovává, při β -rozpadech se nezachovává, ale z rychlosti děje se dá usuzovat, zda došlo ke změně parity a spinu.

Důležitým důsledkem existence parity je např. nutnost nulového elektrického dipólového momentu, neboť vlnová funkce nesmí při inverzi změnit svou absolutní hodnotu (je to funkce pro dva systémy fermionů, pro každý z nich platí Pauliho princip) a proto se hustota pravděpodobnosti pro rozložení náboje v jádře (závislá na kvadrátu absolutní hodnoty vlnové funkce) chová jako sudá funkce, neboli $\varrho(\vec{r}) = \varrho(-\vec{r})$ a tedy dipólový moment, daný integrálem

$$\vec{d} = e \int \vec{r} \varrho(\vec{r}) dV \quad (19.24)$$

je roven nule.

Izotopický spin neboli *izospin* je veličina, kterou přiřazujeme nukleonům na základě analogie se spinem u elektronů⁴. Izospin z této analogie je axiálním vektorem v „nábojovém (izotopickém) prostoru“.

Pro izospin tak platí stejná pravidla skládání jako pro momenty hybnosti. Izospin nukleonu je $T = 1/2$, jeho kvadrát pak $T(T + 1)$, projekci izospinu do vybraného směru pak pro proton určujeme jako $T_z = 1/2$ a pro neutron jako $T_z = -1/2$.

V důsledku zanedbání rozdílů hmotností a magnetických momentů se jeví nukleony jako částice s pěti stupni volnosti (třemi klasickými a dvěma kvantovými) a jelikož jsou částice nerozlišitelné, platí pro ně *rozšířený Pauliho princip*. Každý stav tak může být charakterizován pěti kvantovými čísly (n , l , m , s_z a T_z) a může být obsazen nejvýše jedním nukleonem.

Izospin jádra pro A sudé tak může nabývat hodnot $0, 1, 2, \dots$ a pro A liché

³Parita ukazuje, jak se funkce transformuje při transformaci $x \rightarrow -x$, $y \rightarrow -y$, $z \rightarrow -z$. Pohybové zákony klasické mechaniky jsou vůči této transformaci invariantní. V kvantové mechanice však nemusí být, protože se zavádí operátor parity P působící na vlnovou funkci způsobem, který reprodukuje transformaci při inverzi souřadnic - např. pro funkci $\psi(\vec{r})$ s lichou paritou máme vztah $P\psi(\vec{r}) = -\psi(\vec{r})$, pro funkci $\psi(\vec{r})$ se sudou paritou máme vztah $P\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r})$.

⁴Jelikož mají proton a neutron podobnou hmotnost, pak odhlédneme-li na chvíli od jejich rozdílného magnetického momentu, můžeme se na ně koukat jako na jednu částici *nukleon*, ve dvou nábojových stavech.

hodnot $1/2, 3/2, 5/2, \dots$. Projekce celkového izospinu jádra T_z je dána součtem izospinů jednotlivých nukleonů, tedy

$$T_z = \frac{1}{2}(Z - N) \quad (19.25)$$

Pro lehčí jádra ($A < 50$) můžeme zavést tzv. izospinový formalismus, který nám částice i s jejich stavy rozdělí do nábojových multiplétů. Pro těžší jádra toto však již nemá význam, kvůli velké elektrostatické repulsi protonů. Možnost klasifikovat izospinové stavy však dala podnět k vyslovení hypotézy o *nábojové nezávislosti jaderných sil*, podle níž se T a T_z při jaderných procesech zachovává, což je potvrzeno experimentem například z reakcí

$$\begin{aligned} p + {}^1_5\text{B} &\longrightarrow p + {}^1_5\text{B}^* \\ T : \frac{1}{2} \quad 0 &\quad \frac{1}{2} \quad 0, 1 \\ T_z : \frac{1}{2} + 0 &= \frac{1}{2} + 0 \\ \\ d + {}^1_5\text{B} &\longrightarrow d + {}^1_5\text{B}^* \\ T : 0 \quad 0 &\quad 0 \quad 0, 1 \\ T_z : 0 + 0 &= 0 + 0 \end{aligned}$$

kdy stav $T = 1$ u druhé reakce není povolen (* značí excitované jádro). Při elektromagnetických interakcích se sice nebudou měnit Z a N , tedy se bude zachovávat T_z , ale celkový izospin se obecně zachovávat nebude (např. radiační přechody γ). Při radioaktivních dějích provázených vyzářením elektronů a pozitronů se pak nezachovává ani T_z (neboť se mění proton v neutron, či naopak) a stejně tak při dějích se zachycením elektronu v jádře.

Magnetický moment jádra můžeme považovat za magnetický dipól ($\vec{\mu}$). Potenciální energie dipólu ve vnějším magnetickém poli o indukci \vec{B} je

$$U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \quad (19.26)$$

U atomových jader dále platí

$$\vec{\mu} = \gamma \vec{L} \quad (19.27)$$

kde \vec{L} je moment hybnosti jádra a γ je gyromagnetický poměr. Pro jádra nacházející se v klidu platí

$$\mu_z = \gamma I_z = \gamma \hbar M \quad (19.28)$$

kde $M \in \{-I, -I + 1, \dots, I - 1, I\}$, tedy

$$\mu = \gamma \hbar \cdot \max\{M\} = \gamma \hbar \cdot I \quad (19.29)$$

tedy $|\mu|$ je rovno maximální možné hodnotě μ_z . Pro $\vec{B} = (0, 0, B)$ bude potenciální energie magnetického momentu jádra v tomto poli

$$U = -\mu_z B = \mu B \frac{M}{I} \quad (19.30)$$

Jelikož M může nabývat $2I + 1$ hodnot, spektrum energie bude obsahovat $2I + 1$ ekvidistantních hladin. Pokud chceme stimulovat přechod jádra z jedné hladiny na sousední, musíme splnit podmínku jaderné rezonance, neboli působit vysokofrekvenčním elektromagnetickým polem s kruhovou frekvencí

$$\omega = |\gamma| B \quad (19.31)$$

Dále můžeme využít k popisu i *gyromagnetického faktoru* g definovaného jako

$$\gamma = g \frac{\mu_N}{\hbar} \quad (19.32)$$

kde μ_N je jaderný magneton. Změřené hodnoty magnetických momentů nukleonů neodpovídají představě bodových částic. v takovém případě by totiž magnetický moment protonu měl být shodný s μ_N a magnetický moment neutronu nulový.

Metody **měření magnetického momentu jádra** se dají využít i ke zjištění spinu a dají se rozdělit do dvou hlavních skupin.

První se zaměřuje na interakci jádra s vnitřním atomovým nebo molekulárním magnetickým polem vytvářeným elektrony. Energie vazby magnetického momentu jádra v tomto poli je úměrná konstantě jemné struktury a , kterou je sice možné teoreticky spočítat, ale v praxi jen velmi obtížně. Proto se tyto metody využívají hlavně jako relativní měření, neboť pro stejná Z a různá N je stavba elektronového obalu prakticky stejná, pročez a a proto je možné využít srovnávací metodu.

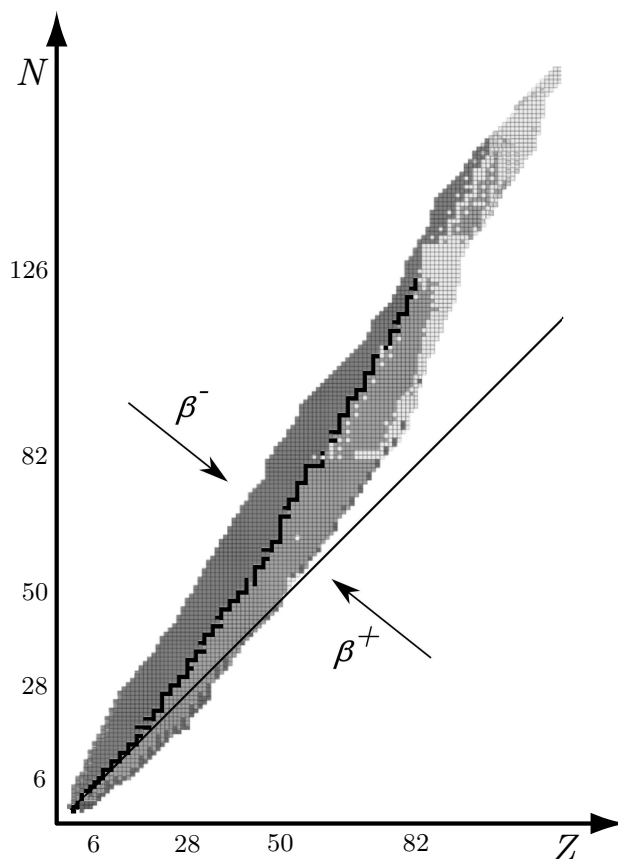
Typickým představitelem je vyšetřování velmi jemné struktury optických spekter. Spin jádra se zde určuje z počtu čar velmi jemné struktury anebo s pomocí nukleární jaderné rezonance. Další metodou je například metoda elektronové paramagnetické rezonance.

Druhá skupina využívá interakci jádra s vnějšími makroskopickými elektromagnetickými poli. Patří sem například i Stern-Gerlachův pokus. Zde je však zapotřebí využívat jádra, v nichž jsou magnetické momenty elektronů navzájem vykompenzovány (např. Ca, Zn, Cd, Hg, H₂, ...). Vzhledem k tomu, že magnetické momenty jader jsou podstatně menší než elektronů, odklon svazku je i v silně nehomogenních polích poměrně malý a proto se tato měření nedají provádět s dostatečnou přesností.

Rabiho metoda využívá nukleární magnetickou rezonanci. Svazek nejprve prochází nehomogenním magnetickým polem, které ho rozštěpí na tolik možných hodnot, kolik je kvantových čísel M . Poté svazek vstupuje do pole složeného z homogenního pole \vec{B} a vysokofrekvenčního pole kolmého na homogenní \vec{B}_0 . Pokud je splněna rezonanční podmínka, výchylky z prvního pole a druhého se nazývají nezruší a do třetí části (opět nehomogenní pole) se dostane podstatně menší část jader z původního svazku, které jsou pak zfokusovány do detektoru. Z podmínky na rezonanci se pak dá určit absolutní hodnota g (při znalosti I i μ). Další jsou metody *absorpční* a *indukční*, které jsou si velmi podobné a obě jsou založeny opět na nukleární magnetické rezonanci.

Pás (linie) stability je zobrazení (viz obr. 19.2) nuklidů stabilních vůči β -rozpadu do roviny (Z, N) . Ty nám takto vytvoří „linii“. Prvky ležící nad touto linií se rozpadají β^- -rozpadem za vzniku elektronu a antineutrína, prvky pod linií se rozpadají β^+ -rozpadem za vzniku pozitronu a neutrína.

Jádra s $A \leq 40$ jsou soustředěna okolo přímky $N = Z$, což je důsledek Pauliho vylučovacích pravidel. Pokud by jádro obsahovala více nukleonů jednoho druhu (např. mělo více neutronů), pak musí tyto nukleony obsazovat vyšší energetické hladiny, neboť protony i neutrony jsou fermiony, které můžeme rozlišovat pomocí izospinu. β -rozpady tak mění svou projekci izospinu a tím i poměr neutronů ku protonům. U prvků s $A > 40$ však začíná převažovat Coulombické odpuzování



Obrázek 19.2: Linie stability

mezi protony, které tak posune jejich energetické stavy do vyšších poloh, a linie se „stočí“ tak, aby platilo $N > Z$.

19.2 Vazbové síly, vazbová energie jader

Vazbová energie se nám objevila již ve vztahu pro hmotnost atomu.

$$m({}_Z^A\text{X}) = M(A, Z) + Z \cdot m_e - \frac{|W_a(A, Z)|}{c^2} \quad (19.33)$$

Pro jádra s $A > 1$ je účelné zavést pojem *hmotnostní úbytek* $B(A, Z)$, což je rozdíl mezi klidovou hmotností všech nukleonů, z nichž je jádro vytvořeno, a skutečnou hmotností, tedy

$$B(A, Z) = Zm_p + Nm_n - M(A, Z) \quad (19.34)$$

čímž charakterizujeme, jak silně jsou nukleony v jádře vázány. Vazbová energie je tedy energie, která se uvolní při vytvoření jádra a platí

$$W(A, Z) = c^2 \cdot B(A, Z) \quad (19.35)$$

Dále zavádíme pojem *separační energie*, což je energie potřebná k oddělení určité části z jádra. Například pro oddělení α -částice je zapotřebí (pro jádra v základním stavu)

$$S_\alpha(A, Z) = c^2 (M(A - 4, Z - 2) + M(4, 2) - M(A, Z)) \quad (19.36)$$

Odtud rovnou vidíme, že nutnou podmínkou nestability jádra vůči α -rozpadu je

$S_\alpha(A, Z) < 0$. Pro známá jádra víme $S_n(A, Z) > 0$ a $S_p(A, Z) > 0$, což vylučuje možnost neutronovho či protonového rozpadu.

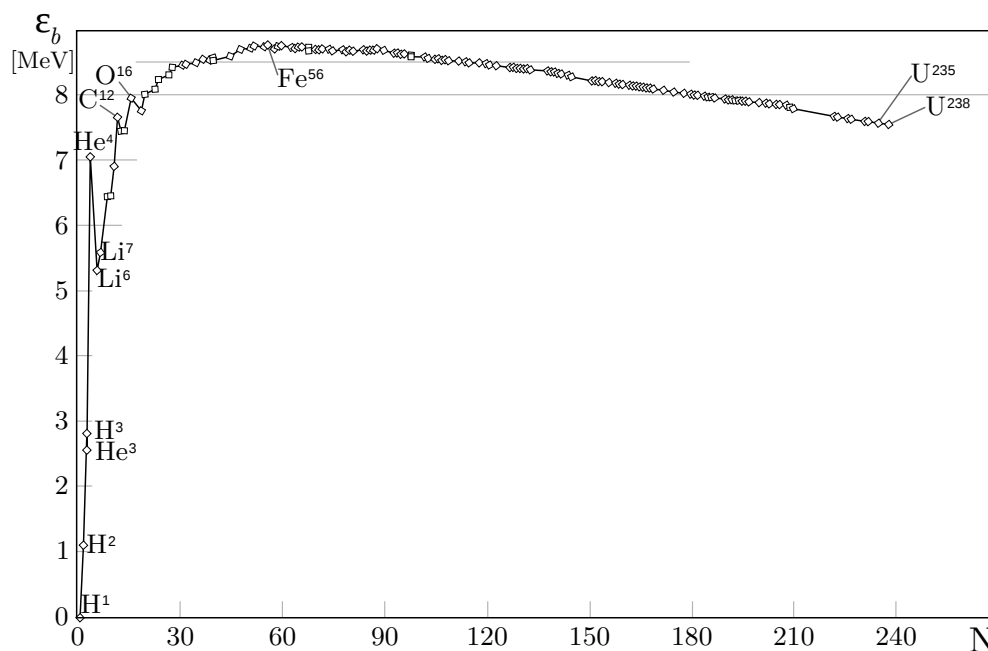
Nukleonová vazbová energie je energie připadající na jeden nukleon daného jádra

$$\varepsilon_b(A, Z) = \frac{W(A, Z)}{A} \quad (19.37)$$

Vyšetřeme nyní její závislost na A . Pro $A \lesssim 16$ ε_b rychle roste (viz obr. 19.3). V bodech $A = 4, 12, 16, 20, 24$ má výrazná maxima, což ukazuje na význam zobecněného Pauliho principu pro nukleony a z toho plynoucí stabilitu jader. Pro $A > 16$ je energie přibližně konstantní (mezi 7,4 MeV a 8,8 MeV), neboli zde $W(A, Z) \sim A$. Odtud soudíme, že může nukleon interagovat jen s omezeným počtem nukleonů. Kdyby interagoval s každým, pak musíme uvažovat všechny dvojice nukleonů a mělo by platit

$$W(A, Z) \sim \frac{1}{2}A(A-1) \quad (19.38)$$

což neplatí. Říkáme proto, že u jaderných sil mezi nukleony se projevuje *nasycení*.



Obrázek 19.3: Vazbová energie $\varepsilon_b(A, Z)$ jako funkce A

Jak vidíme, pro od $A = 60$ klesá energie ε_b z hodnoty 8,8 MeV prakticky monotónně až k energii 7,4 MeV, což je způsobeno elektrostatickým odpuzováním protonů.

Maxim pro $A = 60$ (nuklid ${}^{60}_{28}\text{Ni}$) je rozhraní, které určuje, že energii je možno uvolnit buď syntézou dvou lehčích jader, nebo rozštěpením těžšího jádra.

Závislost hmotnosti nebo vazbové energie jader na A, Z lze vystihnout např. **Weizsäckerovou a Fermiho formulí**, která se vyvozuje z tzv. *kapkového modelu*. V tomto modelu si jádro představujeme jako kapku těžko stlačitelné kapaliny, což vede k úměrnosti mezi objemem a počtem nukleonů. Poloměr by proto měl být dán vztahem

$$R = r_0 \cdot A^{1/3} \quad (19.39)$$

Formule pak je ve tvaru

$$W(A, Z) = a_v A - a_s A^{2/3} - a_c \frac{Z^2}{A^{1/3}} - a_a \frac{A - 2Z}{A} + \frac{\delta(A, Z)}{A^{3/4}} \quad (19.40)$$

kde příslušné parametry mají hodnoty

$$a_v = 15,75 \text{ MeV}, \quad a_s = 17,8 \text{ MeV}, \quad a_c = 0,71 \text{ MeV}, \quad a_a = 23,7 \text{ MeV}$$

a

$$\delta(A, Z) = \begin{cases} 34 \text{ MeV} & \text{pro jdra sudo - sud} \\ 0 \text{ MeV} & \text{pro } A \text{ lich} \\ -34 \text{ MeV} & \text{pro jdra lich - lich} \end{cases}$$

dle vztahu (19.39) můžeme první člen interpretovat jako objemovou energii jádra, druhý je úměrný povrchu jádra a vystihuje, že nukleony jsou na povrchu méně vázané, třetí člen reprezentuje elektrostatické odpuzování protonů, čtvrtý člen zde vystihuje stabilitu nuklidu (leží na linii stability a tedy přibližně platí $N = Z$). Poslední člen souvisí se spinovými a izospinovými stavy nukleonů.

Existenci posledních dvou členů jde dobře odůvodnit v jiném modelu jádra - tzv. *slupkovém*. Experimentální údaje ukazují možnost uspořádání nukleonů v jádře ve slupkách, podobně jako uspořádání elektronů v atomovém obale. Energetické stavy nukleonů v dané slupce se pak liší jen málo, ve srovnání s rozdílem mezi jednotlivými slupkami. Protony a neutrony zde považujeme za rozlišitelné objekty. Z experimentálních dat plyne, že k zaplnění dochází tehdy, když počty protonů nebo neutronů dosahují tzv. magických čísel 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126. Přičemž první dvě magická čísla jsou shodná s počtem elektronů zaplňující slupky pro $n = 1, 2$. Vhodnou volbou potenciální jámy pak lze dospět i k dalším magických čísel. Vzhledem k párování antiparalelních spinů nás tedy tento model vede k předpokladu, že sudo-sudá jádra budou mít větší vazbovou energii než sudo-lichá či lich-sudá a ta opět vyšší než lich-lichá. Dále nás tento model rovnou vede k předpokladu stability pro $N = Z$.

Zrcadlová jádra je dvojice jader, která mají navzájem prohozená čísla N a Z , tedy například jádra ${}^{10}_4\text{Be}$ a ${}^{10}_6\text{C}$. Odečteme-li od jejich vazbových energií „zrcadlové“ příspěvky coulombické energie, obdržíme stejné hodnoty. To znamená, že jaderné síly mezi dvěma nukleony jsou stejné, tedy nábojově nezávislé.

19.3 Radioaktivita

Radionuklidy, které můžeme nalézt normálně v přírodě, nazýváme *přírozené*, člověkem připravené radionuklidy nazýváme *umělé*.

Známe tři hlavní radioaktivní procesy. Při α -rozpadu fakticky dojde ke štěpení, kdy se z původního jádra oddělí jádro ${}^4_2\text{He}$ (neboli α -částice), β -rozpad je podmíněn přeměnou neutronu na proton a při γ -rozpadu je radiační proces (neboli elektromagnetický přechod), při kterém přejde jádro z vyššího energetického stavu do nižšího. Další proces, který sem spadá, je například vyzáření nukleonu z excitovaného stavu jádra. Všechny se však řídí empiricky zjištěným **rozpadovým zákonem**.

$$N(t) = N(0) \cdot e^{-\lambda t} \quad (19.41)$$

kde $N(0)$ je počáteční množství atomů a λ je rozpadová konstanta. Na veličinu $N(t)$ je třeba nahlížet jako na relativní pravděpodobnost toho, že v intervalu

$(0, t)$ nedojde u daných jader k rozpadu. Po vydělení (19.41) $N(0)$ můžeme určit diferenciální pravděpodobnost, že k rozpadu dojde v čase $t + dt$

$$-\frac{dN}{N(0)} = \lambda \cdot e^{-\lambda t} \quad (19.42)$$

Střední doba života τ pak bude dána vztahem

$$\tau = \int_0^{\infty} \lambda t e^{-\lambda t} dt = \frac{1}{\lambda} \quad (19.43)$$

Poločas rozpadu (tedy doba, za kterou zbyde polovina z původní jader) je

$$T = \frac{\ln 2}{\lambda} = \tau \ln 2 \quad (19.44)$$

Nově vzniklá jádra však nemusí být již stabilní a stejně tak nižší energetická hladina po γ -rozpadu ještě nemusí být základní. Tak mohou vznikat celé rozpadové řady, kdy rozpadem radionuklidu vzniká opět radionuklid. Radionuklidy se často navíc mohou rozpadat několika různými způsoby (např. $^{210}_{83}\text{Bi}$ se může rozpadat nejprve α -rozpadem na $^{206}_{81}\text{Tl}$ a dále β -rozpadem na $^{206}_{82}\text{Pb}$, nebo naopak nejprve β -rozpadem na $^{210}_{84}\text{Po}$ a dále α -rozpadem na $^{206}_{82}\text{Pb}$), kdy každá větev má nějaký větvící poměr (v našem případě 36% se rozpadá α -rozpadem na $^{206}_{81}\text{Tl}$ a 64% β -rozpadem na $^{210}_{84}\text{Po}$). K charakteristice radionuklidu tak využíváme typ rozpadu, poločas rozpadu, větvící poměry, energie vyzářených částic a **aktivitu** $A(t)$, neboli počet rozpadů za čas (jednotka Bq, dříve Cu). Dále můžeme definovat měrnou aktivitu, což je podíl aktivity a hmotnosti látky

$$a = \frac{A}{m} \quad (19.45)$$

Aktivitu z definice můžeme při experimentech, pro něž platí $\Delta t \ll T$, upravit na limitní vztah

$$A(t) = -\frac{\Delta N}{\Delta t} \approx -\frac{dN}{dt} = \lambda N(t) \quad (19.46)$$

α -rozpad můžeme schématicky zaznamenat



což je proces, který může probíhat pouze pokud platí relativistický zákon zachování energie

$$E(A, Z) = E(A - 4, Z - 2) + E(4, 2) \quad (19.48)$$

pročež musí být separační energie

$$S_\alpha(A, Z) = c^2 [M(A - 4, Z - 2) + M(4, 2) - M(A, Z)] < 0 \quad (19.49)$$

kde M značí klidové hmotnosti jader. Experimentálně bylo zjištěno, že jádra s $A > 150$ se vůči tomuto rozpadu jeví jako nestabilní.

Střední doba života jader, podléhajících tomuto rozpadu, jsou sice neměnné, ale mohou být v řádu 10^{-7} s až 10^{25} s.

Objasnění α -radioaktivity podává kvantová mechanika. Víme, že α -částice má poměrně vysokou vazbovou energii a proto existuje až u relativně velkých jader. Předpokládejme, že se α -částice již vytvořila, mateřské jádro je podstatně větší, pročež ho považujeme za nehybné. Hamiltonián α -částice tak je

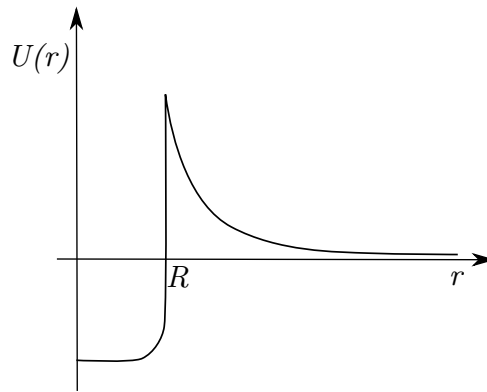
$$H = \frac{1}{2m_\alpha} p^2 + U(\vec{x}) \quad (19.50)$$

kde $U(\vec{x})$ reprezentuje potenciální energii interakce s jádrem, v jednoduchém přiblížení budeme interakci považovat za konstantní v čase. Schrödingerova rovnice tak má tvar

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m_\alpha}\Delta + U(\vec{x})\right\}\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x}) \quad (19.51)$$

kde E je celková energie α -částice, v čase konstantní. Považujme $U(\vec{x})$ za centrálně symetrické. Pak můžeme $\psi(\vec{x})$ hledat jako součin radiální funkce a sférické funkce.

$U(r)$ je rozložitelné do coulombické interakce $V_C(r)$ a silné jaderné interakce $V_J(r)$. Coulombické síly jsou repulsivní, zatímco jaderné přitažlivé. Výsledně tak získáme potenciál podobný obr. 19.4. Jak vidíme, ve vzdálenosti $r > R$ převládá coulombický repulsivní člen. Naopak pro $r < R$ a energii menší než potenciálová bariéra, je α -částice uvězněna. S nenulovou pravděpodobností však dochází k tunelovému jevu a částice se dostane mimo jádro. Při menší aproximaci potenciálu jsme schopni zjistit i koeficient průniku T_B , ten je velmi citlivý na změnu rozměrů bariéry a jelikož $\tau \sim 1/T_B$, vysvětluje to velký rozsah intervalu středních dob života.



Obrázek 19.4: Schématický průběh potenciálu pro α -částici v jádře

β^- -rozpad probíhá dle schématu



K rozpadu může dojít, jen pokud je v souladu s relativistickým zákonem zachování energie

$$E(A, Z) = E(A, Z + 1) + E_e + E_{\bar{\nu}} \quad (19.53)$$

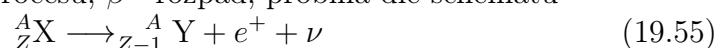
a separační energie je tak

$$S_e(A, Z) = c^2 [M(A, Z + 1) + m_e - M(A, Z)] < 0 \quad (19.54)$$

Původně se o neutrinu nevědělo a tak se reakce (19.52) psala bez něj. Pozorované spektrum vyzařovaných elektronů však neodpovídalo zákonu zachování energie a hybnosti - tedy zatímco očekávané spektrum mělo být diskrétní, získané spektrum bylo spojitě - od nulové hodnoty až po maximální povolenou. Z čehož Pauli předpověděl existenci třetí částice v reakci. Současným vznikem dvou nových částic se tak slabá interakce značně liší od např. interakce elektromagnetické.

β^- -rozpadu podléhají lehká jádra i nestabilní izotopy středně těžkých a těžkých jader, u těžších však převládá α -rozpad.

Druhá varianta tohoto procesu, β^+ -rozpad, probíhá dle schématu



kde pozitron e^+ je antičásticí k elektronu e^- a elektronové neutrino ν je antičásticí k elektrickému antineutrinu $\bar{\nu}$. Obě reakce mají stejné spektrum kinetické energie pro elektron, resp. pozitron, a obě reakce mají poměrně velké intervaly, v nichž leží poločasy rozpadu. Poslední reakcí, která je do této skupiny β -rozpadů řazena, nazýváme *záchytem* K, která probíhá dle schématu



na levé straně máme výchozí jádro a elektron ve slupce K, na pravé straně máme jádro, které má elektron ze slupky K absorbován za současného vyzáření neutrina. Všechny tyto tři β -rozpady mají základ v nestabilitě nukleonu. Jelikož volný neutron má klidovou hmotnost větší než proton, může se rozpadnout (střední doba života 896 s) dle schématu



což je vlastně základ reakce (19.52). Proton sám se rozpadnout na neutron nemůže, pokud se ale v jádře nachází na dostatečně vysoké hladině, může přejít na volnou neutronovou hladinu (leží-li níže než jeho současná). V tom případě proběhne děj



kde stav vázanosti značíme závorkami. Za stejných podmínek může proton zachytit elektron ze slupky K a stát se neutronem



z čehož vidíme, že (19.58) je základ β^+ -rozpadu a (19.59) základ záchytné reakce.

Jak bylo ale experimentálně potvrzeno, parita se ve slabých interakcích nezachovává.

γ -rozpad nevede ke změně počtu nukleonů ani izotopického stavu, během reakce je pouze vyzářen foton o určité energii. Energetické spektrum těchto fotonů je diskrétní, protože se jedná o přechody mezi diskrétními energetickými hladinami jádra. Energie vyzářeného fotonu tak musí splňovat Bohrovu podmínku

$$\hbar\omega = E_i - E_f, \quad E_i > E_f \quad (19.60)$$

kde index i značí počáteční stav a index f konečný stav. Můžeme tedy tvzení i obrátit a z čárového spektra γ -záření usuzovat o existenci diskrétních energetických hladin.

Střední doby života pro γ -rozpad jsou mezi 10^{-7} s a 10^{-11} s. Výběrová pravidla pro určení povolených přechodů jsou poněkud složitější, existují ale přechody s malou pravděpodobností přechodu, kdy jádro pak setrvává ve vzbuzeném stavu (metastabilní jádro) a je nazýváno izomerem (například pokud je přechod podmíněn změnou spinu jádra, ale dochází při něm k malé změně energie).

Vnitřní konverze je jev povahově blízký fotoelektrickému jevu. Během elektromagnetické interakci jádra s elektronem v obalu může jádro předat přebytek energie elektronu a tím ho „vyrazit“ z atomu. Spektrum takto vyzářených elektronů je tak opět diskrétní. Tento jev se tak objevuje tam, kde není dovolen klasický γ -rozpad.

Pokud je vzdálenost mezi hladinami dokonce větší než $2m_e c^2$, může jádro přejít do nižšího stavu i vytvořením elektron-pozitronového páru, který odnese přebytečnou energii. Tento jev se pak nazývá *dvojnou konverzí*.

19.4 Jaderná reakce

Jaderné reakce představují interakci mikročástic, z nichž alespoň jedna má $Z > 1$. Zde budeme mluvit převážně o reakcích relativními kinetickými energiemi do 100 MeV. Jelikož je bereme jako jakousi analogii chemických reakcí, je i zápis podobný. Zápisem



tak myslíme pružný rozptyl, zatímco zápisem



nepružný rozptyl. Kde můžeme, využíváme k zápisu symboly pro elementární částice, tedy spíše napíšeme p než ${}^1_1\text{H}$, d než ${}^2_1\text{H}$, t než ${}^3_1\text{H}$ a α než ${}^4_2\text{He}$.

Mohou se zde uplatnit tři základní interakce - silná, elektromagnetická a slabá, my se ale budeme zabývat reakcemi v důsledku silné interakce. Oblast, která nás zajímá, má zhruba rozměry jádra a tomu odpovídající doba - jelikož projektily, kterými „ostřelujeme“ jádro mají většinou rychlost blížíci se světlu, je charakteristická doba reakce okolo 10^{-24} s.

Zákony zachování v jaderných interakcích

Platí zákon zachování počtu nukleonů

$$A_1 + A_2 = A'_1 + A'_2 \quad (19.63)$$

zákon zachování náboje

$$Z_1 + Z_2 = Z'_1 + Z'_2 \quad (19.64)$$

Dále musí samozřejmě platit relativistický zákon zachování energie a hybnosti. Rozdělíme-li energii v reakci na kinetické a zbytek Q

$$E_{k-i} = E_{k-f} - Q \quad (19.65)$$

kde E_{k-i} značí kinetické energie na počátku reakce a E_{k-f} po skončení, pak pro $Q > 0$ nazýváme reakci exoenergetickou, pro $Q < 0$ endoenergetickou (pro pružný rozptyl je $Q = 0$).

Dále se zachovává moment hybnosti, přičemž se zachovává kvadrát a jedna složka vybraného směru. Formálně se složky momentů hybnosti sčítají, zatímco kvantová čísla momentů hybnosti pro jednotlivé mikročástice se skládají dle kvantových pravidel. Dle typu reakce mohou dále platit další zákony (např. zákon zachování izospinu, parity ...).

Účinné průřezy jaderných reakcí

Jelikož dané reakce využíváme i ke studiu dalších objektů, rozeberme jejich vlastnosti.

Účinné průřezy zde obecně udávají pravděpodobnosti toho, že reakce proběhne určitým způsobem. Rozeberme klasicky případ srážky neutronu s jádrem o poloměru R pro silnou interakci (o níž víme, že je krátkého dosahu). Pak pro srážkový parametr získáváme vztah

$$\varrho = R \cos \frac{\vartheta}{2} \quad (19.66)$$

a ze vztahu

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\varrho}{\sin \vartheta} \left| \frac{d\varrho}{d\vartheta} \right| \quad (19.67)$$

získáváme integrací přes celý prostorový úhel

$$\sigma = \pi R^2 \quad (19.68)$$

Neutronu se tak jeví jádro jako průmět koule do roviny kolmé ke směru svazku. Pro např. jádra zlata ($A = 197$) nám pak vychází $\sigma \approx 2,4 \cdot 10^{-28} \text{ m}^2$, což nám tak udává pravděpodobnost, že dojde k pružnému rozptylu na jádře dle klasické mechaniky.⁵

Jak jsme viděli již dříve, mohou některé reakce probíhat různými způsoby s různými koncovými stavy - „kanály“. Pravděpodobnost toho, že reakce proběhne právě daným kanálem, je pak dána specifickým účinným průřezem. Totální účinný průřez, určuje pravděpodobnost, že vůbec dojde k reakci

$$\sigma_{tot} = \sigma_{el} + \sum_{i=1}^n \sigma_i \quad (19.69)$$

kde σ_{el} je účinný průřez pro elastický rozptyl a σ_i jsou účinné průřezy všech zbývajících kanálů reakce, suma v (19.69) se tak nazývá účinným průřezem reakce, který můžeme opět zjistit. V tomto případě budeme jádro považovat za místo pohlcení neutronů v případě dopadu (černé těleso pro neutrony). Tedy pokud bude srážkový parametr neutronu větší než poloměr, pak k rozptylu nedojde, a pokud menší, dojde k pohlcení. V tomto případě je $\sigma_{el} = 0$ a $\sigma_{tot} = \pi R^2$ opět řádově okolo 10^{-28} m^2 .

Elektromagnetickou interakci nám představuje např. Rutherfordův rozptyl α -částice. Abychom zde zahrnují nenulovou velikost jádra (tedy částice nebodové částice) a nezvnikla nám divergence, musíme integrovat diferenciální účinný průřez v mezích $\langle 0, 1 \cdot \pi; \pi \rangle$, přičemž víme

$$d\sigma = \frac{1}{4} \cdot \frac{Z^2 \cdot e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \cdot E^2} \cdot \frac{d\Omega}{\sin^2 \frac{\vartheta}{2}} \quad (19.70)$$

Tím získáme pravděpodobnost, že částice bude rozptýlena do všech směrů krom malého kužele odstíněného jádrem samotným. Z čehož $\sigma \approx 1,6 \cdot 10^{-26} \text{ m}^2$.

Toto však byly klasické přístupy k velikosti účinných průřezů. Při přechodu ke kvantovému popisu, pro ověření správnosti úvah. Zde získáváme vztah pro diferenciální účinný průřez jako

$$d\sigma_0 = \frac{\sin^2 kR}{k^2} d\Omega \quad (19.71)$$

kde

$$k^2 = \frac{2m_n E}{\hbar^2} \quad (19.72)$$

z čehož vidíme, že diferenciální účinný průřez, je zde závislý na energii. Pro extrémně malé energie ($k \rightarrow 0$) dostáváme $\sigma_0 = 4\pi R^2$. A pro rozptyl ve vyšších stavech ($l \neq 0$) obecně dostáváme

$$\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l > 4\pi R^2, \quad \text{pro } k \rightarrow 0 \quad (19.73)$$

Jak vidíme, je zde rozdíl mezi kvantovou a klasickou mechanikou, experiment pak potvrzuje kvantový přístup. Obdobně kvantový přístup u silných interakcí nám

⁵Jelikož je veličina poměrně malá, byla zavedena pomocná jednotka 1barn = 1b = 10^{-28} m^2 .

dává několik závěrů. Je-li pro nějakou jadernou reakci účinný průřez σ_r různé od nuly, pak i σ_{el} pro elastický účinný průřez je různé od nuly. Jakýkoli neelastický proces je tedy vždy doprovázen i elastickým rozptylem. Účinné průřezy jsou obecně závislé na energii a kvantitativně i kvalitativně odlišné od klasicky určených.

Na závěr srovnáme účinné průřezy u slabé interakce. Pro proces



je příslušný účinný průřez $\sigma \sim 10^{-47} \text{ m}^2$. Z čehož vidíme, že v běžných jaderných procesech, je vliv slabé interakce mizivý.

Vzhledem k diskrétním energiím nemůžeme očekávat jednoduchý monotónní charakter. Naopak se nám objevují různé rezonanční jevy. Jelikož již jsme schopni nastavit poměrně přesně hodnoty spinu u vcházejících částic a určovat spin u vycházejících částic (pomocí „polarizace“ terčíku), můžeme studovat i střední hodnotu spinu svazku.

Základní typy reakcí

Při reakcích přes *složené jádro* rozdělí nalétávající částice svou kinetickou energii mezi většinu nukleonů, absorbuje se a jádro „přestaví“. Nová soustava tak má složené jádro a jiné energetické hladiny. Obecně je v nestabilním stavu a proto po poměrně krátké době vyše nukleon(y) a přejde opět do stabilního stavu. Neboli proběhne reakce



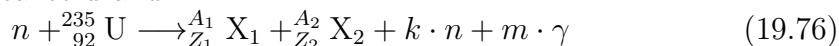
Zde můžeme dále rozlišovat mezi reakcí *rezonanční*, kdy jsou jednotlivé energetické hladiny jádra, v nichž se může nový nukleon udržet, daleko od sebe a tedy musí mít nukleon energii kolem těchto hodnot, aby mohl být zachycen, a *nerезonanční*, kdy jsou energetické hladiny jádra blízko sebe a šířkami se „překrývají“ a je tedy větší šance na zachycení nukleonu.

Při *přímých reakcích* ovlivní nalétávající částice pouze jeden až dva nukleony z jádra a ostatní neovlivní. Při vyšších energiích může být z jádra vyražen i větší fragment. Celá reakce se odehrává mnohem rychleji než přes složené jádro. Zatímco u reakcí přes složené jádro je fakticky zapomenut předešlý stav a vyloučené nukleony jsou vyzařovány izotropně do prostoru, u přímých reakcí letí vyražené částice především ve směru pokračujícím ve směru původní částice.

Štěpení

Tento odstavec je zde kvůli praktickému využití.

Pomocí projektilu lze jádro se $Z \geq 2$ rozštěpit jádro na několik nových jader. Nejpravděpodobnější je rozštěpení na dvě jádra. Samozřejmě platí zákony zachování. Obecně se zde dá říci, že čím vyšší A , tím je pravděpodobnost reakce vyšší. Významná je zde reakce uranu



kde ze zákona zachování náboje víme $Z_1 + Z_2 = 92$ a ze zákona zachování nukleonů $A_1 + A_2 + k = 236$. Pro $k = 2$ dle Weizsäckerovy formule můžeme získat energii

$$Q = (E_U + m_n c^2) - (E_1 + E_2 + 2m_n c^2) \quad (19.77)$$

z čehož získáváme hodnotu $Q \sim 180$ MeV, což je vysoká hodnota⁶. Vzniklá jádra mají přebytek neutronů, proto je jednak vyzařují a druhá se β -rozpadají, přičemž oba typy rozpadů jsou doprovázeny radiací γ .

Termojaderné reakce

Spojováním (syntézou, neboli termojadernou reakcí) jader lze rovněž uvolnit energii. Tyto reakce probíhají například ve Slunci. Jejich řízený chod v makroskopickém měřítku se zatím lidem bohužel nepodařil. Pro konstrukci zbraní jsme je už ale využili ...

Mezi nejvýznamnější cykly zde patří *uhlíko-dusíkový* a *proton-protonový*. V obou se vlastně z protonů vytvářejí α -částice a oba se samy dokáží udržovat v prostředí s převážně ionizvanými atomy vodíku o teplotě 10^7 až $2 \cdot 10^7$ (čemuž odpovídá kinetická energie protonů asi 2 keV)⁷.

⁶Experimentálně je zjištěna hodnota asi 200 MeV, kde jsou započteny i energie uvolněné při rozpadu radioaktivních jader.

⁷Právě kvůli vysoké teplotě se reakcím říká termojaderné.

20. Subjaderná fyzika

20.1 Základní skupiny částic

Pod pojmem "elementární částice" se, dle svého doslovného výrazu, rozumí částice, které již nejsou dále dělitelné, tedy nemají konstituenty. V širším slova smyslu se však tímto označují také částice s vnitřní strukturou.

20.1.1 Bosony a fermiony

V nejobecnější klasifikaci můžeme částice dělit podle jejich spinu, a to na **bosony** s celočíselným spinem a **fermiony** s poločíselným.

Fermiony lze je popsat jako částice, jejichž systémy jsou popsány úplně antisymetrickou vlnovou funkcí. Platí pro ně Pauliho vylučovací princip a řídí se Fermi-Diracovou statistikou.

Bosony naopak mají symetrickou vlnovou funkci a chovají se podle Boseho-Einsteinova rozdělení. V jednom kvantovém stavu se tak může nacházet více bosonů, tzn. bosony nedodrží Pauliho vylučovací princip. To je důvod, proč bosony na rozdíl od fermionů obvykle netvoří stabilní struktury.

20.1.2 Intermediální částice

Intermediální částice jsou částice zprostředkující interakce. Jejich společnou vlastností je, že jsou bosony.

20.1.2.1 Foton

Foton je elementární částice, kterou popisujeme kvantum elektromagnetické energie. Bývá značen řeckým písmenem γ . Jeho studiem se zabývá kvantová elektrodynamika.

Elektrický náboj fotonu je nulový, spin je roven 1.

20.1.2.2 Bosony W^\pm, Z^0

Bosony W a Z jsou elementární částice, které zprostředkovávají slabou interakci v atomovém jádře a v reakcích elementárních částic. Byly objeveny v CERNu roku 1983 a jsou považovány za hlavní úspěch teorie Standardního modelu fyziky částic.

Jméno částice W vychází z anglického slova "weak", což znamená "slabý" a označuje slabou interakci. Název Z částice pochází z domněnky, že to bude poslední částice, kterou je nutné objevit. Alternativní vysvětlení říká, že název je odvozený z toho, že má nulový elektrický náboj (Z jako "zero").

Hmotnost W je $80,387 \pm 0,017 \text{ GeV}/c^2$ a Z $91,1876 \pm 0,0021 \text{ GeV}/c^2$.

20.1.2.3 Gluon

Gluony jsou elementární částice zprostředkující silnou interakci mezi kvarky. Důsledkem působení gluonů je možnost vzniku atomového jádra, neboť umožňuje

vytvoření vazby mezi protonem a neutronem v atomovém jádře.

Název vychází z anglického glue – lepidlo, protože gluony jsou tím, co drží jádro atomu pevně pohromadě.

Zajímavostí je, že se každý gluon může vyskytovat v jedné z až 8 variant tzv. barevného náboje. Uvnitř hadronu se navíc děje silná interakce vždy tak, že si kvarky (jež mají také každý svůj barevný náboj) mezi sebou navzájem posílají gluony o takových barevných nábojích, aby se pomocí "subtraktivního míchání barev" docílilo zase neutrální kombinace barev nábojů kvarků po narušení rovnováhy samotnou interakcí.

Gluony mají nulovou klidovou hmotnost, nulový elektrický náboj a spin 1.

Kvůli aspektu kvantové chromodynamiky se gluony nemohou vyskytovat jako volné částice, jelikož interakce mezi nimi sílí se zvyšující se vzdáleností. Naopak, čím jsou k sobě blíže, síla interakce klesá. Této vlastnosti se říká asymptotická volnost.

Gluony tvoří spolu s kvarky za speciálních podmínek kvark-gluonové plazma.

20.1.2.4 Higgsův boson

Higgsův boson je hmotná skalární elementární částice předpovězená ve standardním modelu částic. Hraje klíčovou roli ve vysvětlení původu hmotnosti ostatních elementárních částic, zejména rozdílu mezi nehmotným fotonem a velmi těžkými bosony W a Z.

Higgsův boson poprvé předpověděl roku 1964 britský fyzik Peter Higgs, který rozpracoval myšlenky s Philipem Andersonem a nezávisle několika dalšími fyziky.

Na konferenci ICHEP 2012 v australském Melbourne 4. července 2012 byl na základě dat z experimentů ATLAS a CMS v CERNu oznámen objev nového bosonu, jehož vlastnosti jsou konsistentní s Higgsovým bosonem. Úroveň spolehlivosti objevu nové částice je 5σ .

20.1.2.5 Graviton

Graviton, označovaný jako g , je hypotetická částice, která by měla zprostředkovávat gravitační sílu mezi tělesy. Z teorie vyplývá, že by mělo jít o částici s nulovou klidovou hmotností, nulovým elektrickým nábojem a spinem 2.

20.1.3 Leptony

Leptony jsou fermiony se spinem $1/2$, na které nepůsobí silná interakce. V současné době jsou považovány za opravdu elementární, dále nedělitelné částice.

Leptony se vyskytují ve třech generacích s narůstající hmotností, kde k poměrně hmotnému, elektricky nabitému leptonu, existuje příslušné neutrino, slabě interagující neutrální částice. První generaci tvoří elektron s elektronovým neutrinem, druhou generaci mion a třetí tauon.

$$\begin{pmatrix} e^- \\ \nu_e^0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \mu^- \\ \nu_\mu^0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \tau^- \\ \nu_\tau^0 \end{pmatrix}.$$

Základní vlastnosti leptonů shrnuje následující tabulka.

lepton	$Q [e]$	$m_0 [\text{MeV}/c^2]$
e^-	-1	0,511
ν_e^0	0	$< 2,2 \cdot 10^{-6}$
μ^-	-1	105,658
ν_μ^0	0	< 0.17
τ^-	-1	1776,84
ν_τ^0	0	$< 15,5$

Tabulka 20.1: Leptony

kvark	vůně	$m_0 [\text{MeV}/c^2]$	$Q [e]$	podivnost	půvab	krása	pravda
d	down	3,5 - 6	-1/3	0	0	0	0
u	up	1,5 - 3,3	+2/3	0	0	0	0
s	strange	92,4 1,5	-1/3	-1	0	0	0
c	charm	1270 90	+2/3	0	+1	0	0
b	beauty/bottom	4200 120	-1/3	0	0	-1	0
t	truth/top	171300 2300	+2/3	0	0	0	+1

Tabulka 20.2: Kvarky

20.1.4 Hadrony

Jako hadrony označujeme částice, které jsou tvořeny dvěma nebo třemi kvarky. Reagují na silnou interakci a jako celek mají barevný náboj roven nule, protože jednotlivé barevné náboje kvarků se vzájemně vyruší. V každém hadronu se kromě uvedených kvarků v každém okamžiku také nachází gluony a páry kvark-antikvark. Každý kvark uvnitř hadronu si neustále vyměňuje barevné náboje s dalšími kvarky v tomtéž hadronu.

Kvarky jsou fermiony se spinem 1/2. Dle standardního modelu nemají kvarky vnitřní strukturu. Tvoří baryony a mezony. Teoreticky byly předpovězené roku 1964 Murray Gell-Mannem (a nezávisle na něm i Georgem Zweigem) ve snaze vysvětlit vlastnosti tehdy známých částic, za což roku 1969 dostal Nobelovu cenu za fyziku. Pozdější objevy dalších částic si vyžádaly zavedení dodatečných tří kvarků. V současné době tedy známe šest druhů kvarků - tzv. u, d, c, s, b, t. Ve schématu níže mají kvarky uváděné v horní řádce elektrický náboj $+2/3e$, zatímco kvarky v dolní řádce $-1/3e$.

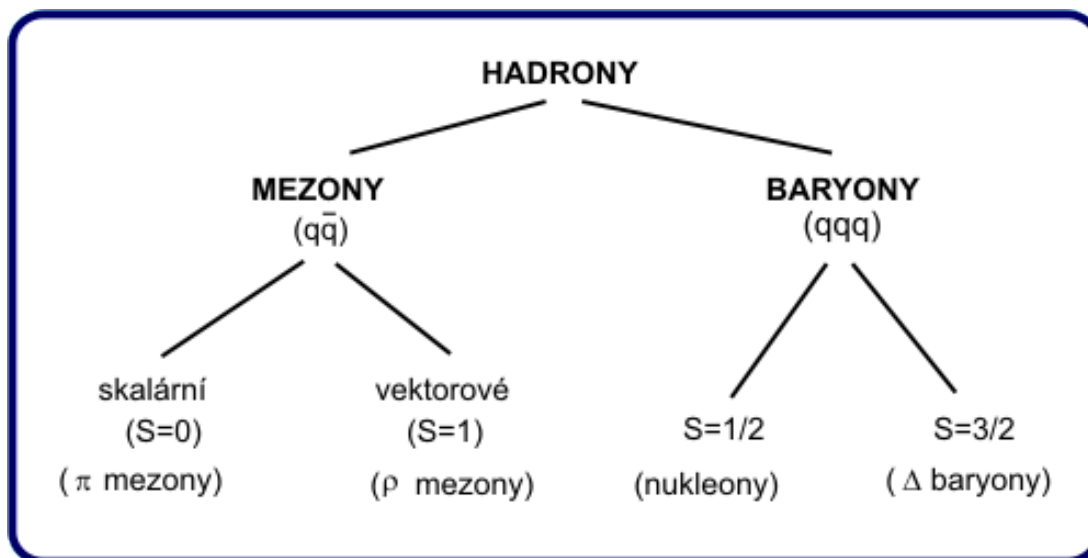
$$\begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} c \\ s \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} t \\ b \end{pmatrix}.$$

Kvarky jsou nositelé různých kvantových vlastností zvaných např. charm apod. Tyto vlastnosti shrnuje tabulka níže.

Dle kvarkové struktury rozlišujeme hadrony na mezony a baryony.

20.1.4.1 Mezony

Mezon je částice tvořená kvarkem a antikvarkem, která reaguje na silnou interakci a má nulový (skalární mezony) nebo jednotkový spin (vektorové mezony). Existují i mezony s vyšším celočíselným výsledným spinem, spiny kvarků se v nich skládají

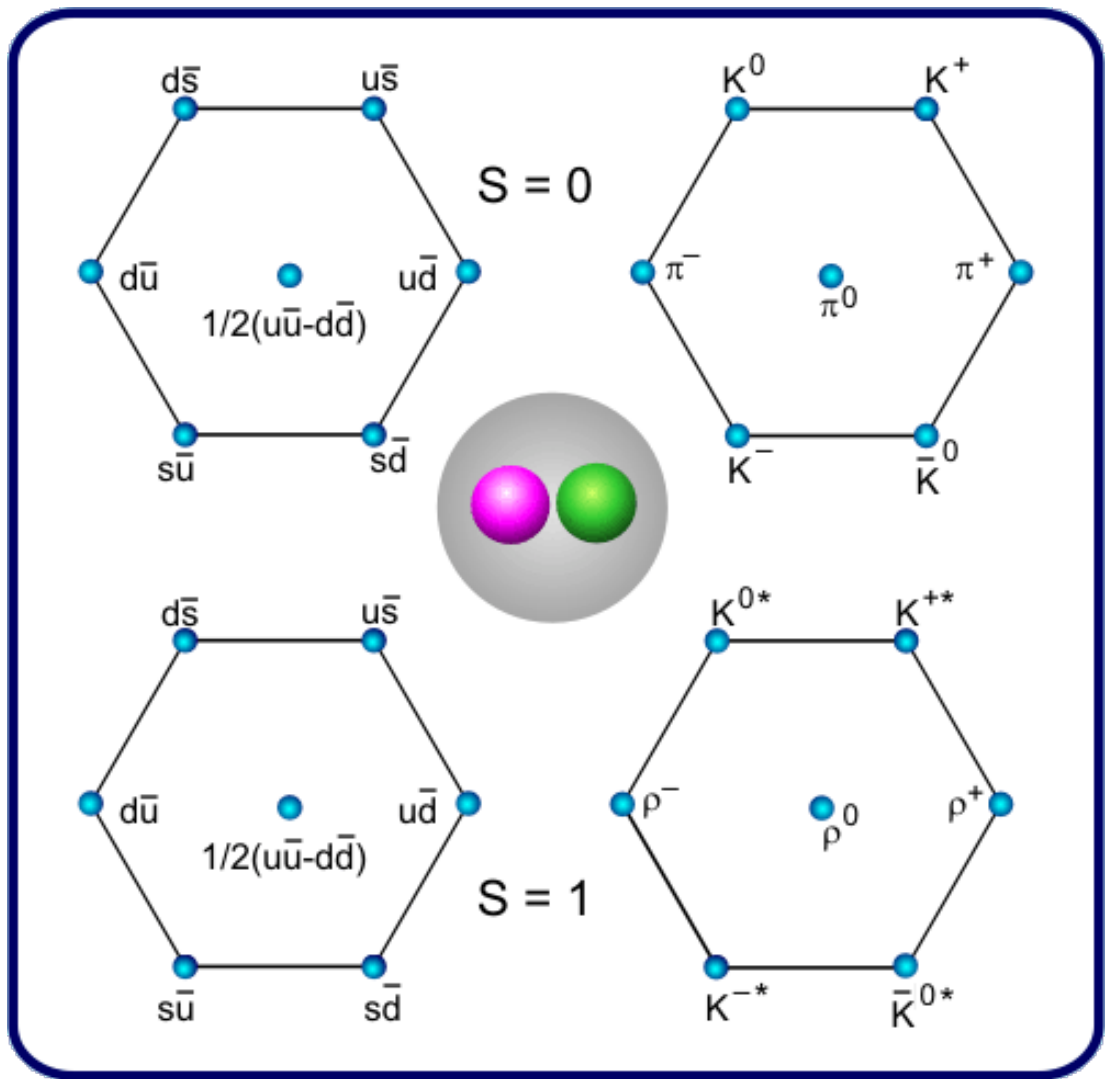


Obr. 1: Hadrony

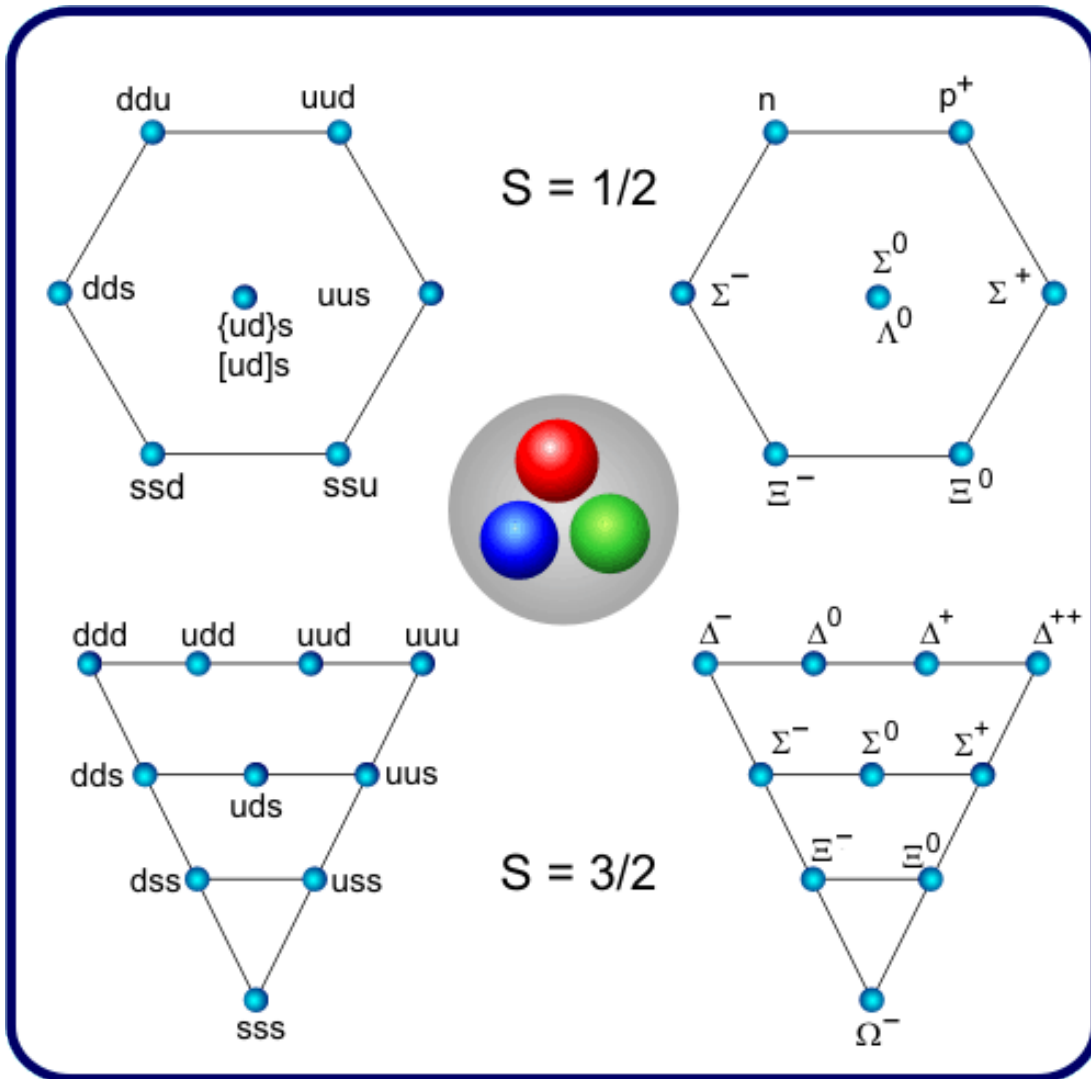
i s orbitálním momentem hybnosti (např. mezony $a_4(2040)$ a $f_4(2050)$ mají spin roven 4).

20.1.4.2 Baryony

Baryony jsou částice skládající se ze třech kvarků, celkově s poločíselným spinem. Obecně se dále dělí na nukleony (proton, neutron), hyperony (částice obsahující tzv. podivný s kvark) a Δ baryony (excitované stavy nukleonů a hyperonů).



Obr. 2: Mezony



Obr. 3: Baryony

20.2 Částicové interakce

20.2.1 Gravitační interakce

Gravitační interakce je univerzální silové působení mezi všemi formami hmoty a právě tím se odlišuje od všech ostatních interakcí. Je nejslabší ze základních interakcí, má nekonečný dosah a je vždy přitažlivá. Nejvýznamněji tedy působí na objekty o velké hmotnosti.

Pro malé rychlosti a slabá pole se k popisu gravitační interakce používá Newtonův gravitační zákon. Pro silná pole a velké rychlosti (relativistické, blíží se rychlosti světla) se používá obecná teorie relativity, která platí i pro slabé pole a malé rychlosti.

20.2.2 Elektromagnetická interakce

Elektromagnetická interakce je interakce popisující elektromagnetické pole, které odpovídá míře působení elektrické a magnetické síly v prostoru. Skládá se ze dvou fyzikálně propojených polí, elektrického a magnetického. Ačkoli elektromagnetické pole je svým dosahem nekonečné, obvykle se uvažuje jen ta část, která má význam pro pohyby těles v okolí nabitého tělesa, které pole vytváří.

20.2.3 Slabá interakce

Slabá jaderná interakce je jedna ze čtyř základních interakcí, působících mezi částicemi hmoty. Říká se jí slabá proto, že je 10^{13} krát slabší než silná interakce. Působí na všechny leptony a kvarky. Neuvažujeme-li velmi slabou gravitaci, pak je to jediná síla působící na neutrino.

Slabá interakce je zprostředkována bosony W a Z. Protože jsou velmi těžké, asi $90 \text{ GeV}/c^2$, a mají i energetickou šířku Γ v řádu GeV, je jejich střední doba života

$$\tau = \frac{\hbar}{\Gamma} \quad (20.1)$$

je asi $3 \cdot 10^{-25}$ sekund. I při pohybu rychlostí srovnatelnou s rychlostí světla je dosah slabé interakce omezen na 10^{-18} metrů, což je asi tisícinu poloměru atomového jádra.

Jedním z nejznámějších projevů slabé interakce je radioaktivní rozpad β .

20.2.4 Silná interakce

Silná jaderná interakce je nejsilnější ze všech základních interakcí, působících mezi částicemi hmoty, avšak její dosah je omezen pouze v řádech velikosti atomového jádra, tedy asi 10^{-15} m. kvůli tomu je možná existence kvarků tvořících hadrony nebo také udržení protonů a neutronů v atomovém jádře.

Teorie popisující silnou interakci se nazývá kvantová chromodynamika, neboli QCD (z řečtiny "chromos"- barva).

20.3 Antičastice

Antičastica má rovnakú hmotnosť a spin ako častica, ale má opačný náboj. Medzi ďalšie charakteristiky majúce rovnakú veľkosť ako u častíc ale opačné znamienko patria napr. spin, baryónové číslo, podivnosť a magnetický moment. Niektoré častice, napríklad fotóny a neutrálne mezóny, sú zhodné so svojimi antičasticami, tieto sa nazývajú skutočne neutrálne častice, na rozdiel od častíc ako elektrón, protón alebo neutrón, ktoré nie sú identické so svojimi antičasticami. Ak sa stretnú častica a antičastica, anihilujú a vyžiaria energiu. Anihiláciou pozitronu a elektrónu vznikajú napr. dva fotóny.

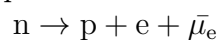
Antičastice boli prvý krát predpovedané Paulom Diracom, ktorému z riešenia tzv. Diracovej rovnice vypadlo aj riešenie so zápornou energiou. Prvou pozorovanou antičasticou bol v roku 1932 pozitron (antielektrón), ktorý v dymovej komore pozoroval Carl D. Anderson. Pozitrony vznikajú napríklad pri β^+ rozpade. Rovnako môže dôjsť k vzniku elektrón-pozitronového páru pri vniknutí energetického fotónu (energia väčšia ako 1022 keV) do elektrónového obalu atómu.

V pozorovanom svete je drvivá väčšina hmoty tvorená časticami. Objasnenie tohoto nepomeru je jednou z hlavných nezodpovedaných otázok súčasnej fyziky.

20.4 Zákony zachovania v mikrosvete

V mikrosvete platia všetky zákony zachovania, ktoré platia aj v makrosvete. Napríklad zákon zachovania hybnosti, energie, momentu hybnosti... Keďže ale mikrosvet prináša mnoho nových veličín, akými sú napríklad farba, vôňa (flavor), baryónové číslo a pod., prichádzajú s nimi aj príslušné zákony zachovania, ktoré avšak nemusia platiť všeobecne ale napríklad len pre určitý druh interakcie (slabá, silná, elektromagnetická,...). V nasledujúcich bodoch uvediem niekoľko takýchto zákonov zachovania, spolu s interakciami ku ktorým prislúša.

- **Zákon zachovania baryónového čísla:** Baryónové číslo B je kvantové číslo systému. Je definované tak, že baryóny (protón, neutrón,..) majú $B = 1$, mezóny majú $B = 0$ a antibaryóny (antiprotón, antineutrón,..) $B = -1$. Toto číslo sa zachováva (i.e. jeho hodnota je rovnaká pred aj po reakcií) v takmer všetkých interakciách štandardného modelu. Doteraz avšak nebol pozorovaný ani jediný prípad reakcie, pri ktorej by sa toto číslo nezachovávalo avšak niektoré teórie to povolujú (chirálna anomália). Takou by mohol byť napríklad rozpad protónu, ktorý avšak doteraz nebol pozorovaný.
- **Zákon zachovania leptónového čísla:** Leptónové číslo L je definované následovne. Pre leptóny (elektrón, mión, tau + neutrína) je rovné 1, pre ich antičastice -1 a pre zvyšné neleptonické častice 0. Toto číslo sa, podobne ako baryónové číslo, zachováva takmer pri všetkých reakciách štandardného modelu, napríklad pri β^- rozpade:



kde je leptónové číslo rovné 0 pred reakciou a 0 po reakcií (elektrónové a antineutrínové sa navzájom odčítajú). Výnimkou je chirálna anomália (neviem čo to je, ale je to len niečo teoretické) pri ktorej sa toto číslo nemusí zachovávať. Definujú sa aj tzv. "rodinné" leptónové čísla, kde každej rodine

leptónov prisudzujem vlastné číslo (elektrón a elektrónové neutríno by mali elektrónové číslo rovné 1 atď.). Toto číslo sa avšak zachováva len približne (pre nenulovú hmotnosť neutrín a ich oscilácie).

- **Zákon zachovania vône:** Medzi "voňavé" kvantové čísla patria napríklad (budem používať anglické názvy) strangeness, charm, bottomness a topness. Tieto sú rovné 1 pre príslušné kvarky a -1 pre antikvarky. Tieto čísla sa zachovávajú pri silných a elektromagnetických interakciách ale nie pre slabé interakcie.

