

Požadavky k ústní části státní závěrečné zkoušky

Zkouška má přehledový charakter. Jsou kladeny jen širší otázky a žádá se, aby posluchač prokázal pochopení základních problémů, byl schopen je ilustrovat na konkrétních situacích a osvědčil určitou míru syntézy a hlubšího pochopení. Kromě znalosti teorie jevu se tedy předpokládá i znalost základní metodiky měření příslušných veličin.

NSZF032, Poslední úprava: Mgr. Petr Jedelský (17.06.2021)

Předmětem zkoušky jsou následující partie fyziky:

Obsah

1	Mechanika hmotných bodů	1
1.1	Základní kinematické veličiny, Newtonovy pohybové zákony.	1
1.2	Inerciální a neinerciální soustavy.	4
1.3	První a druhá impulzová věta.	5
1.4	Keplerovy zákony.	6
1.5	Harmonický oscilátor (netlumený, tlumený, vynucené kmity).	7
1.6	Pohyb s vazbami, d'Alembertův princip.	11
1.7	Lagrangeovy rovnice druhého druhu.	13
1.8	Hamiltonovy kanonické rovnice a Poissonovy závorky.	14
1.9	Hamiltonův variační princip.	16
2	Mechanika tuhého tělesa	17
2.1	Eulerovy úhly a Eulerovy kinematické rovnice.	17
2.2	Tenzor setrvačnosti.	18
2.3	Eulerovy dynamické rovnice, pohyb jednoduchých setrvačníků.	21
3	Mechanika kontinua	23
3.1	Tenzor napětí a deformace, Hookův zákon.	23
3.2	Rovnice struny a její řešení.	28
3.3	Pohybová rovnice ideální tekutiny, rovnice kontinuity, Bernoulliho rovnice.	31
3.4	Viskózní tekutiny, Navierovy-Stokesovy rovnice, laminární a turbulentní proudění.	35
4	Speciální teorie relativity	37
4.1	Otázka éteru a Michelsonův-Morleyův experiment.	37
4.2	Výchozí principy teorie relativity, Lorentzova transformace.	40
4.3	Minkowského prostoročas, světelný kužel.	42
4.4	Relativistická pohybová rovnice, ekvivalence hmotnosti a energie.	45
4.5	Maxwellovy rovnice ve čtyřrozměrném formalismu.	47
5	Termodynamika a statistická fyzika	50
5.1	Teplo, teplota, tepelná kapacita, tlak.	50
5.2	Vnitřní energie, termodynamické potenciály.	52
5.3	Hlavní zákony termodynamiky, entropie.	54
5.4	Ideální plyn, stavová rovnice, Carnotův cyklus.	55
5.5	Fázový prostor, rozdělovací funkce, Liouvilleova rovnice.	58
5.6	Maxwellovo-Boltzmannovo rozdělení.	59
5.7	Základní statistická rozdělení, statistická entropie.	61
6	Elektrostatika, stacionární elektrické a magnetické pole	66
6.1	Elektrostatické pole ve vakuu (Gaussův a Coulombův zákon, elektrostatický potenciál).	66
6.2	Elektrostatické pole v přítomnosti vodičů a v dielektrikách (polarizace, multipólový rozvoj, susceptibilita a permitivita).	67
6.3	Stacionární elektrické pole a elektrický proud.	68
6.4	Stacionární magnetické pole (Biotův-Savartův a Ampérův zákon).	69
6.5	Magnetické pole v látkovém prostředí (magnetizace, typy magnetických látek, susceptibilita a permeabilita).	70

7	Elektrodynamika	71
7.1	Elektromagnetická indukce.	71
7.2	Kvazistacionární elektrické a magnetické pole.	72
7.3	Elektrické obvody (stacionární, střídavé, neustálený stav, metody řešení lineárních obvodů, Kirchhoffova pravidla).	73
7.4	Maxwellovy rovnice.	74
7.5	Elektromagnetické potenciály a jejich vlastnosti.	75
7.6	Zákony zachování v teorii elektromagnetického pole.	76
8	Elektromagnetické vlny	77
8.1	Vlnová rovnice, rovinná elektromagnetická vlna.	77
8.2	Polarizační vlastnosti elektromagnetické vlny.	78
8.3	Šíření elektromagnetické vlny v látkovém prostředí (konstanta šíření, útlum, komplexní index lomu, disperze).	79
8.4	Odraz a lom elektromagnetických vln na rozhraní dvou prostředí (Fresnelovy vzorce).	80
8.5	Elektromagnetické vlny ve vlnovodech.	82
8.6	Dipólové elektromagnetické záření.	84
9	Optika	85
9.1	Interference světla, optické interferometry.	85
9.2	Koherence světla.	89
9.3	Ohyb světla (Fraunhoferova a Fresnelova aproximace, optická ohybová mřížka, Braggova rovnice).	91
9.4	Šíření světla v anizotropních látkách (použití dvojlomných látek).	94
9.5	Geometrická optika (eikonálová rovnice, geometrická optika sférických ploch, zobrazovací rovnice).	96
9.6	Optické zobrazovací přístroje.	98
9.7	Spektrální přístroje a základní metody optické spektroskopie.	101
9.8	Základy holografie.	102
9.9	Princip laseru.	103
9.10	Tepelné záření, zákony záření absolutně černého tělesa.	105
10	Struktura atomů, molekul a kondenzovaných látek	109
10.1	Dualismus vlna-částice, fotoefekt, Comptonův rozptyl.	109
10.2	Bohrův model atomu.	113
10.3	Základní typy vazeb mezi atomy, meziatomový potenciál.	115
10.4	Popis symetrie molekul a krystalů pomocí grup, kvazikrystaly.	119
10.5	Krystalová struktura látek, základní typy mříží, prostorové grupy.	122
10.6	Experimentální studium struktury látek pomocí rtg. záření, difrakční podmínky, strukturní faktor.	125
10.7	Einsteinův a Debyeův model vibrací atomů v kondenzovaných látkách.	130
10.8	Molekulové orbitály, metoda LCAO, hybridizace orbitalů.	133
10.9	Model volných a téměř volných elektronů, pásová struktura pevných látek, Blochův teorém.	140
11	Formalismus kvantové teorie	147
11.1	Popis stavů kvantového systému (princip superpozice, vlnová funkce, relace neurčitosti).	147
11.1.1	Matematické prostředky kvantové mechaniky	147
11.1.2	Hilbertův prostor	147
11.1.3	Operátory, vlastní čísla a vlastní vektory	147
11.1.4	Základní postuláty	148
11.1.5	Měření	149
11.1.6	Relace neurčitosti	151
11.1.7	Robertsonův vztah	152
11.1.8	Heisenbergovy relace	152
11.2	Reprezentace fyzikálních veličin, diskrétní a spojitě spektrum, stacionární Schrödingerova rovnice.	154
11.2.1	Stacionární Schrödingerova rovnice	154
11.2.2	Schrödingerova rovnice v souřadnicové reprezentaci	155
11.3	Souřadnicová, impulsová a maticová formulace kvantové mechaniky.	156
11.3.1	Maticová reprezentace	156
11.3.2	Souřadnicová a impulsová reprezentace	157
11.4	Variační metoda a stacionární poruchová metoda hledání vázaných stavů.	158
11.4.1	Variační metoda	158
11.4.2	Poruchová metoda	160
11.4.3	Rozdělovací metoda (partitioning)	160

11.4.4	Nedegerovaná hladina	161
11.4.5	Degenerovaná hladina	161
12	Kvantová dynamika	162
12.1	Nestacionární Schrödingerova rovnice, rovnice kontinuity, Ehrenfestovy rovnice.	162
12.1.1	Nestacionární Schrödingerova rovnice	162
12.1.2	Rovnice kontinuity	163
12.1.3	Ehrenfestovy rovnice	164
12.2	Evoluce obecného kvantového systému, kvantové měření.	165
12.2.1	Evoluce obecného kvantového systému	165
12.2.2	Hamiltonián nezávislý na čase	165
12.2.3	Evoluční operátor	166
12.2.4	Kvantové měření	167
12.3	Integrály pohybu, kvantová čísla, symetrie v kvantové mechanice.	169
12.3.1	Integrály pohybu	169
12.3.2	Kvantová čísla	170
12.3.3	Výběrová pravidla	171
12.3.4	Symetrie v kvantové mechanice	173
12.3.5	Homogenita času	173
12.3.6	Homogenita prostoru	174
13	Jednoduché kvantové systémy	175
13.1	Kvantování energie pro vázanou částici: pravoúhlá potenciálová jáma a harmonický oscilátor.	175
13.2	Volná částice, vlnové balíky, průchod částice potenciálovou bariérou.	180
13.3	Orbitální a spinový moment hybnosti, základy skládání momentů hybnosti.	184
13.4	Částice ve sféricky symetrickém potenciálu, atom vodíku.	186
13.5	Částice v elektromagnetickém poli: Zeemanovo štěpení hladin, Larmorova precese.	189
13.6	Systémy s více částicemi: nerozlišitelnost, Pauliho princip, jednočásticová aproximace.	190
14	Jaderné záření	193
14.1	Interakce jaderného záření s látkou.	193
14.2	Detekce a spektroskopie jaderného záření.	196
14.3	Využití jaderného záření.	200
15	Atomové jádro	202
15.1	Základní vlastnosti a charakteristiky jádra.	202
15.2	Jaderné síly, vazbová energie jádra.	204
15.3	Radioaktivita, jaderné reakce.	205
15.4	Jaderné zdroje energie.	207
16	Částicová fyzika	208
16.1	Fundamentální částice (kvarky, leptony, intermediální bosony).	208
16.2	Základní interakce (elektromagnetická, slabá a silná).	209
16.3	Standardní model elementárních částic.	210
16.4	Vazba částic, barevný náboj, asymptotická volnost, gluony.	212
16.5	Symetrie a narušení symetrií.	213
16.6	Rozpad částic a detekce částic.	215

Suma sumárum:

- 2x Theoretická mechanika
- 1x Mechanika
- 1x STR
- 1x Thermodynamika

- 2,2x Elektrodynamika+Elmag
- 1,8x Optika
- 1x Atomovka
- 3x Kvantovka
- 3x Jaderka

1 Mechanika hmotných bodů

1.1 Základní kinematické veličiny, Newtonovy pohybové zákony.

Základní kinematické veličiny

Hmotný bod (HB)

- matematická abstrakce, modeluje pouze 3 translační stupně volnosti těžiště tělesa bez uvažování jakýchkoliv dalších.
- popis pohybu dán časovou závislostí trojice katézských souřadnic sdružených do **polohového vektoru**

$\vec{r} = \vec{r}(t)$... Tato spojitá funkce času je nazývána **trajektorie**

Průměrná rychlost tělesa

- Průměrná rychlost tělesa mezi časy t_1, t_2 je dána následovně:

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

Okamžitá rychlost

- Okamžitá rychlost v t_1 je dána **časovou derivací** \vec{r} v bodě t_1 .

Zrychlení

- definováno jako časová derivace rychlosti. Zrychlení lze rozložit na normálovou \vec{a}_n a tečnou \vec{a}_t složku:

$$\vec{a}_t = (\vec{a} \cdot \vec{e}_v) \vec{e}_v,$$

$$\vec{a}_n = \vec{a} - \vec{a}_t = \frac{v^2}{R} \vec{e}_r$$

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

Pro $\vec{a}_t = 0$... rovnoměrný pohyb

Pro $\vec{a}_n = 0$... přímočarý pohyb

Hybnost HB

$$\vec{p} = m\vec{v}$$

Moment hybnosti vzhledem k nějakému bodu:

$$\vec{L} = \vec{p} \times \vec{r}$$

Newtonovy pohybové zákony

1. Newtonův zákon (zákon setrvačnosti, počet sil = 0)

Těleso setrvává v klidu nebo v rovnoměrném přímočarém pohybu, dokud není nuceno vnějšími vlivy (působením jiného tělesa) tento svůj stav změnit.

2. Newtonův zákon (zákon síly, počet sil = 1)

Síla \vec{F} působící na těleso o hmotnosti m mu uděluje zrychlení \vec{a} .

$$\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt} = m \cdot \vec{a}$$

3. Newtonův zákon (zákon akce a reakce, počet sil = 2)

Každá akce vyvolává reakci stejné velikosti a opačného směru, aneb vzájemná silová působení dvou těles jsou stejně veliká a opačně orientovaná.

Takto formulované NPZ platí pouze v **inerciální souřadné soustavě (IS)**.

Pojmy:

- **inerciální souřadný systém (IS)**
isolovaná částice v IS zůstává v klidu/rovnoměrném přímočarém pohybu
- **hmotnost**
míra odporu tělesa ke zrychlení (změně směru nebo velikosti rychlosti)
- **síla**
způsobena působením druhého tělesa (přímým, polním)

– **moment síly** vůči nějakému bodu

$$\vec{M} = \vec{F} \times \vec{l}$$

kde \vec{l} je vektor relativní vzdálenosti působení síly od bodu.

Přímým výpočtem lze ukázat, že z druhého Newtonova zákona plyne:

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{M}$$

– **impuls síly**

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

- **diferenciál práce dW**

$$dW = \vec{F} \cdot d\vec{r}$$

kde $d\vec{r}$ je nějaký element dráhy podél které síla \vec{F} působí.

- **kinetická energie E_k**
práce, která by musela být vykonána pro urychlení tělesa z nulové rychlosti:

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

- **potenciální energie** $E_p(\vec{r})$ jako funkce polohy

Pokud na hmotný bod působí síla, jíž vykonaná práce nezávisí na dráze.

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:

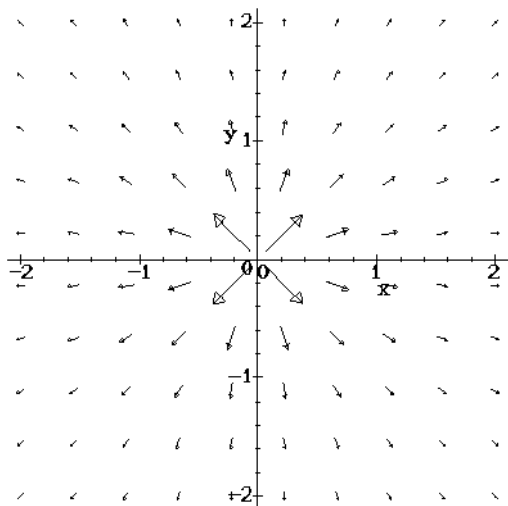
$$\nabla \times \vec{F} = 0$$

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

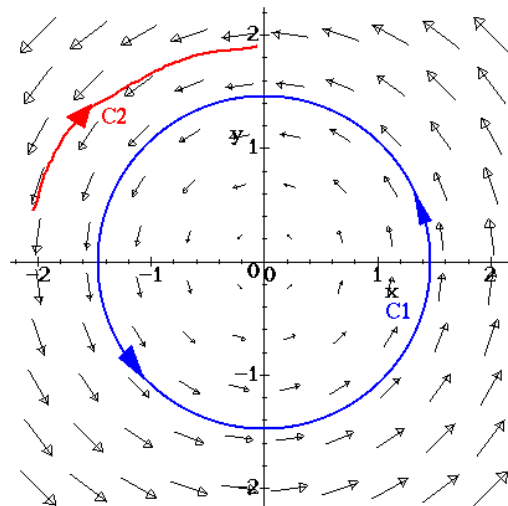
Lze ukázat, že součet potenciální a kinetické energie nazvaný celková mechanická energie se nemění, pokud jsou všechna silová pole v systému konzervativní.

$$E = E_p + E_k$$

Konzervativní pole



Nekonzervativní pole



1.2 Inerciální a neinerciální soustavy.

Inerciální soustavy

- ⇒ platí zde Newtonovy zákony
- ⇒ vyskytují se zde pouze pravé síly (vystihují fyzikální interakci), síly definované NPZ
- ⇒ existuje **alespoň jedna IS**, pak dle Galileova principu relativity jich existuje **nekonečně mnoho**

Newtonův inerciální systém předpokládá:

- **absolutní eukleidovský 3D prostor**
vůči němuž určíme, zda je těleso v klidu či nikoliv
- **absolutní lineární čas**
- **prostor a čas jsou odděleny**

Symbolicky:

$$\sum_{i=1}^N \vec{F}_i = \vec{0} \Leftrightarrow \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{0} \quad \dots \quad \vec{F}_i, \text{ pravé síly}$$

Souřadné systémy spjaté se Zemí jsou inerciální jen přibližně, protože Země se otáčí s relativně malou, ale nenulovou úhlovou rychlostí.

Neinerciální soustavy

Pokud je ale zaveden do rovnic pohybu člen způsobující zrychlení pohybu vůči neinerciálnímu systému, ale ne vůči IS, mluvíme o **silách zdánlivých (nepravých)**.

$$F_S + \sum_{i=1}^N \vec{F}_i = \vec{0} \Leftrightarrow \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{0} \quad \dots \quad \vec{F}_S, \text{ setrvačná, nepravá síla}$$

Speciálně pro soustavu otáčející se vůči IS s rovnoměrnou úhlovou rychlostí ω vůči ose z lze z transformačních vztahů odvodit dvě zdánlivé síly:

- **Coriolisovu sílu \vec{F}_C**

$$\vec{F}_C = -2m\vec{\omega} \times \vec{v} = (2m\omega v_2, -2m\omega v_1, 0)$$

- **Odstředivou sílu \vec{F}_o**

$$\vec{F}_o = (2m\omega x_1, 2m\omega x_2, 0)$$

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.

1.3 První a druhá impulzová 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** ⇒ 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:

$$\vec{r}_S = \frac{\sum_i^N m_i \vec{r}_i}{\sum_i^N m_i}$$

První impulzová věta

Časová změna celkové hybnosti soustavy \vec{P} je rovna výslednici \vec{F}_E vnějších sil působících na soustavu. Tedy:

$$\frac{d\vec{P}}{dt} = \vec{F}_E$$

Vyplývá z **3. Newtonova zákona**, protože každá vnitřní síla má svůj opačný ekvivalent a tudíž se při sčítání do výslednice celkové změny hybnosti vynulují.

Integrovaný tvar:

$$\vec{P}_2 - \vec{P}_1 = \int_{t_1}^{t_2} \vec{F}_E dt$$

⇔

Ekvivalentní je **Věta o pohybu hmotného středu soustavy**

- 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.

Druhá impulzová věta

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:

$$\frac{d\vec{L}_c}{dt} = \vec{M}_E$$

Důsledek: Zákon zachování momentu hybnosti

$$\vec{M}_E = \vec{0} \quad \Rightarrow \quad \vec{L}_c = \text{konst.}$$

1.4 Keplerovy zákony.

1. Keplerův zákon (tvar oběhu)

Planety se pohybují po elipsách málo odlišných od kružnic, v jejichž společném ohnisku je Slunce.

Řešení Lagrangeovy rovnice 2. druhu pro pohyb v centrálním poli:

$$r(\varphi) = \frac{p}{1 + \varepsilon \cos(\varphi)} \quad \dots \quad \text{rovnice kuželosečky}$$

2. Keplerův zákon (průvodič)

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 .

Zákon zachování momentu hybnosti.

3. Keplerův zákon (poměr)

Poměr druhých mocnin oběžných dob libovolných 2 planet je roven poměru třetích mocnin jejich velkých poloos. Tuto skutečnost lze alternativně vyjádřit:

$$\frac{T^2}{a^3} = K = \text{konst.}$$

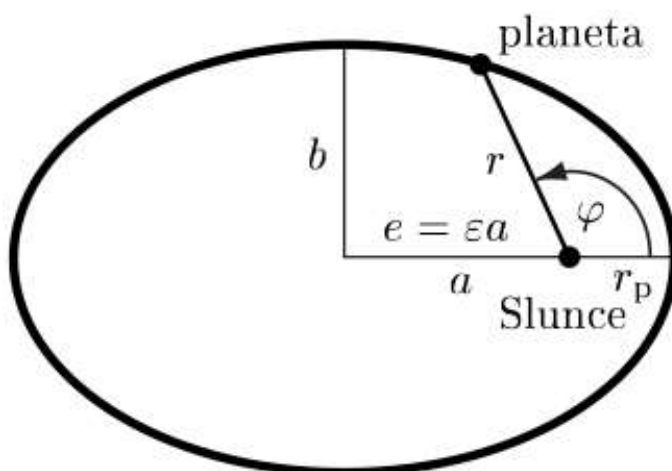
Kde T je doba oběhu a a je velká poloosa dané elipsy.

Zákon lze odvodit pomocí druhého Keplerova zákona:

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

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

$$K = \frac{4\pi^2}{GM}$$

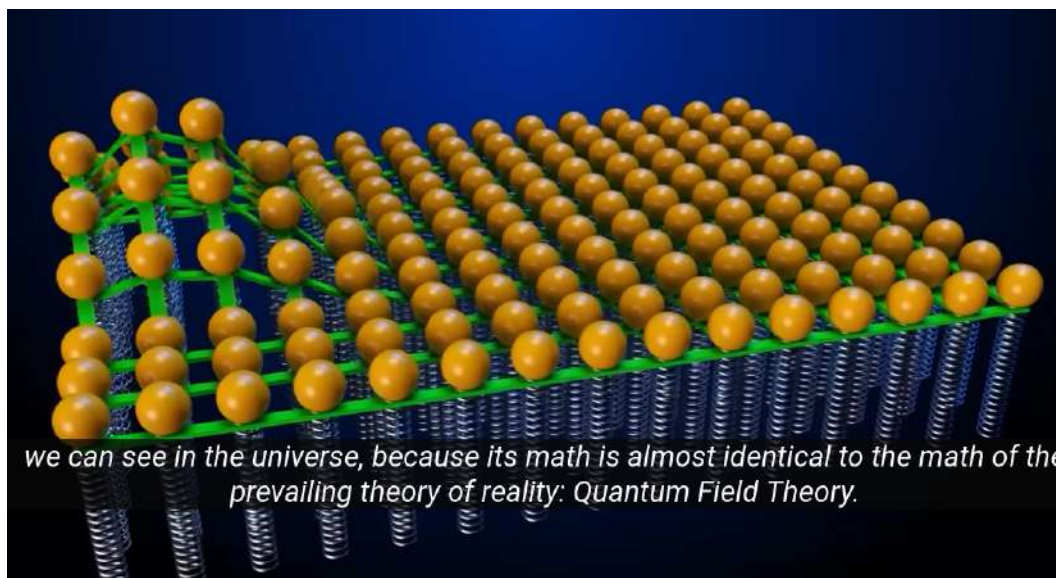
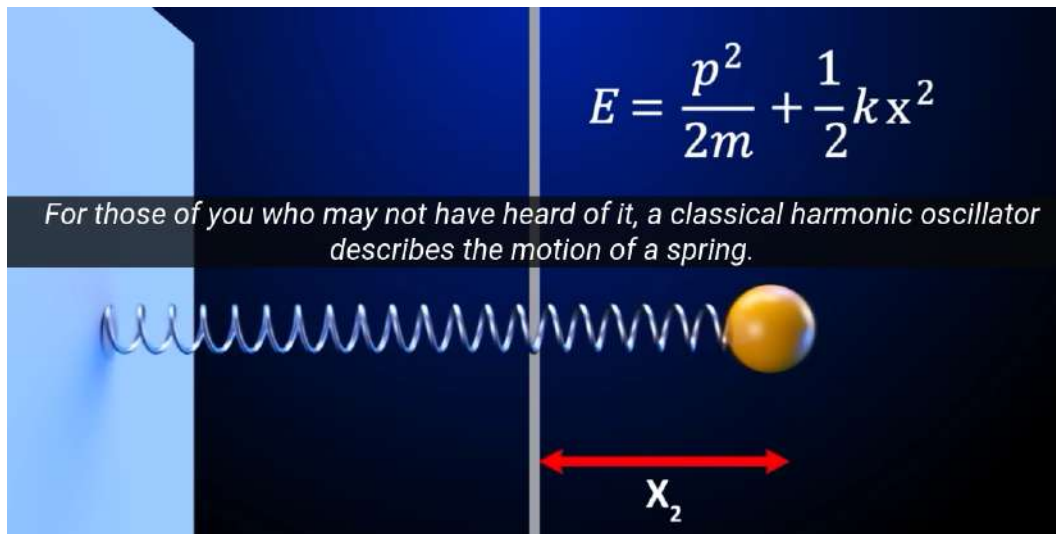


1.5 Harmonický oscilátor (netlumený, tlumený, vynucené kmity).

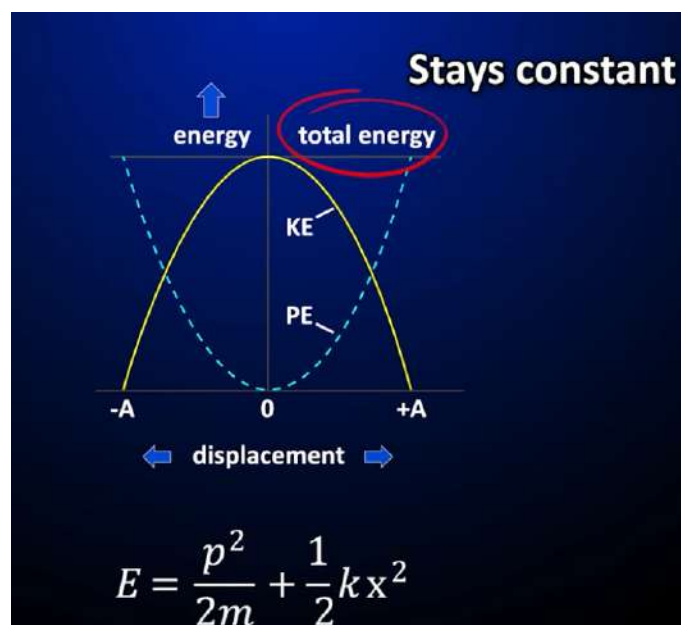
90-95% fyziky

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$$

For those of you who may not have heard of it, a classical harmonic oscillator describes the motion of a spring.



we can see in the universe, because its math is almost identical to the math of the prevailing theory of reality: Quantum Field Theory.



Netlumený harmonický oscilátor

⇒ nejsou uvažovány disipativní síly

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

$$m\ddot{x} = -kx$$

Energie harmonického oscilátoru:

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}kx^2$$

tedy $q \equiv x$ a **kanonická hybnost** je $p \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}$.

Trajektorie vývoje jsou křivky

$$\begin{aligned}q(t) &= A \cos(\omega t + \delta), \\p(t) &= -m\omega A \sin(\omega t + \delta),\end{aligned}$$

kde A a δ jsou integrační konstanty a $\omega = \sqrt{k/m}$.

Pro různé počáteční podmínky dané A, δ vypadají trajektorie vývoje tvořící **fázový portrét** takto: Vidíme, že se jedná o **soustředné uzavřené křivky**, a snadno dokážeme, že to jsou elipsy, neboť platí

$$\left(\frac{q(t)}{A}\right)^2 + \left(\frac{p(t)}{m\omega A}\right)^2 = 1.$$

Čím větší amplituda oscilací A , tím větší je elipsa.

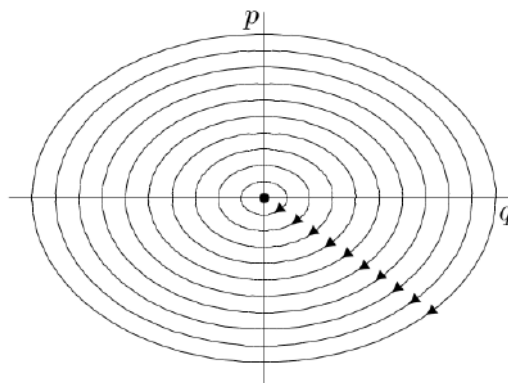
Elipsy jsou současně energetickými nadplochami $E = \text{konst}$, protože v důsledku zákona zachování mechanické energie je

$$E = T + V = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}kq^2 = \frac{1}{2}kA^2 = \text{konst}.$$

Všimněme si také, že každým bodem fázového prostoru prochází **právě jedna trajektorie vývoje**: křivky se nikde neprotínají, neboť vývoj systému je jednoznačný.

Speciálním bodem je samotný **počátek fázového prostoru** $(q, p) = (0, 0)$, který zjevně odpovídá stojícímu oscilátoru s nulovou amplitudou $A = 0$ a tedy s nulovou energií $E = 0$.

Protože to je nejnižší možná energie, představuje tento singulární bod fázového portréту stabilní rovnovážný stav systému.



Tlumený harmonický oscilátor

⇒ disipativní síly doplněny

$$\vec{F} = m\ddot{x}\vec{e}_x = (-kx - b\dot{x})\vec{e}_x \quad b > 0$$

Značení: $w_0^2 = \frac{k}{m}$... vlastní frekvence

$2\delta = \frac{b}{m}$... součinitel tření

$$\Rightarrow \boxed{\ddot{x} + 2\delta\dot{x} + w_0^2x = 0}$$

- **nadkritický útlum** (aperiodický pohyb)

$\delta > \omega_0$, velké tlumení, obecné řešení:

$$x(t) = C_1e^{\alpha_1 t} + C_2e^{\alpha_2 t}$$

- **kritický útlum** (mezní aperiodický pohyb)

$\delta = \omega_0$, konverguje rychleji, než v případě aperiodického tlumení, obecné řešení:

$$x(t) = (A + Bt)e^{-\omega_0 t}$$

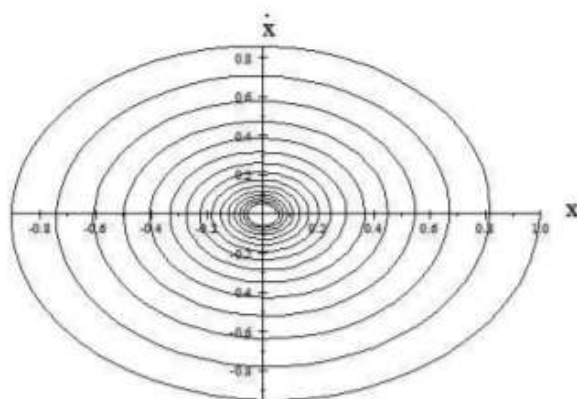
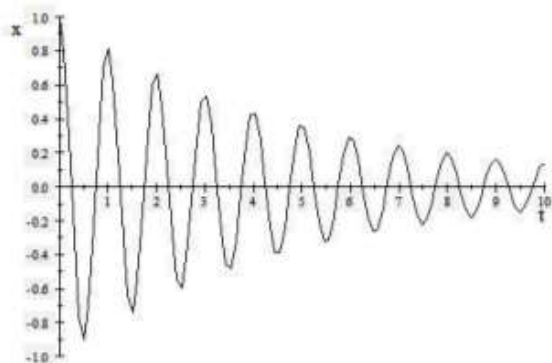
- **slabé tlumení**

$\delta < \omega_0$, tlumené harmonické kmitání, obecné řešení:

$$x(t) = C_1e^{-\delta t + i\omega t}$$

Pro tlumený oscilátor kvůli disipaci již **neplatí zachování mechanické energie**. Soustředné elipsy fázového portréту se proto změňi na neprotínající se spirály, které se postupně blíží stabilnímu singulárnímu bodu v počátku fázového portréту $(q, p) = (0, 0)$.

Protože tlumení je exponenciální funkce času, trajektorie by do tohoto singulárního bodu dospěly až v nekonečném čase $t \rightarrow \infty$.



Vynucené kmity

⇒ doplnění budicí síly do pohybové rovnice

$$m\ddot{x} = -kx - b\dot{x} + F_0 \cos(\Omega t)$$

Značení: Ω ... úhlová frekvence budicí síly

$\omega_0^2 = \frac{k}{m}$... vlastní frekvence

$2\delta = \frac{b}{m}$... součinitel tření

Pohybová rovnice: $\ddot{x} + 2\delta\dot{x} + \omega_0^2 x = S e^{i\Omega t}$

Reálná část obecného řešení: $x(t) = A e^{-\delta t} \sin(\omega t + \alpha) + |A_0| \cos(\Omega t + \varphi)$

1.6 Pohyb s vazbami, d'Alembertův princip.

Pohrb s Vasbami (AI překlad)

- **vazba** = podmínka omezující volný pohyb hmotného bodu
- Newtonova pohybová rovnice s vazbou

$$\boxed{m\ddot{\vec{x}} = \vec{F} + \vec{R}} \quad \vec{F} = \text{ftištěná síla}, \quad \vec{R} = \text{vazbová síla}$$

Klasifikace vazeb podle tří různých kritérií:

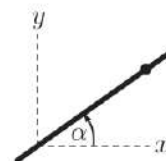
vazba	$\left\{ \begin{array}{l} \textit{oboustranná} : \phi = 0 \\ \textit{jednostranná} : \phi \geq 0 \end{array} \right.$	omezení na podprostor , omezení na poloprostor .
vazba		$\left\{ \begin{array}{l} \textit{skleronomní} : \phi(x^j) \\ \textit{rheonomní} : \phi(x^j, t) \end{array} \right.$
vazba	$\left\{ \begin{array}{l} \textit{holonomní} : \phi(x^j, t) \\ \textit{neholonomní} : \phi(x^j, \dot{x}^j, t) \end{array} \right.$	nezávislá na rychlosti , závislá na rychlosti .

Příklady jednoduchých vazeb:

- *nakloněná přímka:*

$$\phi \equiv y - x \tan \alpha = 0 .$$

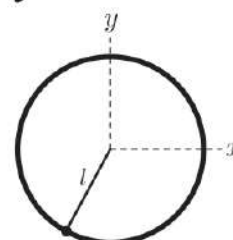
Bod o souřadnicích (x, y) se může pohybovat jen po přímce, úhel jejího sklonu je α , neboť $\tan \alpha = y/x$ (předpokládáme $z = 0$; pro z libovolné jde o nakloněnou rovinu).



- *matematické kyvadlo:*

$$\phi \equiv x^2 + y^2 - l^2 = 0 .$$

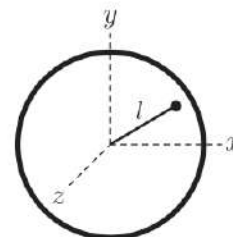
Bod o souřadnicích (x, y) se může pohybovat jen po kružnici, jejíž střed je v počátku a poloměr má l (předpokládáme $z = 0$).



- *sférické kyvadlo (pohyb po povrchu koule):*

$$\phi \equiv x^2 + y^2 + z^2 - l^2 = 0 .$$

Bod o souřadnicích (x, y, z) se může pohybovat jen po sféře, jejíž střed je v počátku a poloměr má l .



- *pohyb po zvětšující se kouli:*

$$\phi \equiv x^2 + y^2 + z^2 - l^2(t) = 0 .$$

Bod o souřadnicích (x, y, z) se může pohybovat jen po sféře, její poloměr se mění jako *zadaná* funkce času $l(t)$.

D'Alembertův princip

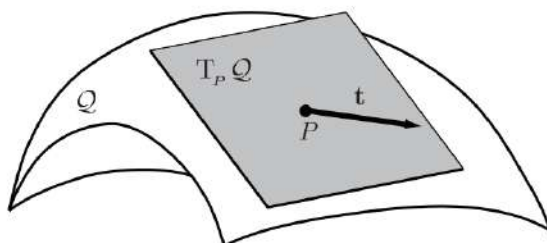
Soustava N hmotných bodů se vyvíjí takovým způsobem, že

$$\sum_{i=1}^{3N} (m_i \ddot{x}_i - F_i) \delta x^i = 0 \quad (2.31)$$

pro každé virtuální posunutí δx^i , které je v souladu s vazbami.

Virtuální posunutí

Co přesně je ale míněno „nekonečně malým posunutím“? Odpověď dává až moderní *geometrická* definice: virtuální posunutí δx^i jsou kartézské složky libovolného vektoru \mathbf{t} , jenž leží v tečné rovině k vazbám v daném bodě a v daném čase, jak ukazuje následující obrázek:



Geometrická podoba

D'Alembertův princip mechaniky můžeme přeformulovat do **ryze geometrické podoby** (kdy oproti (2.31) se již neodvoláváme na použité souřadnice a složky vektorů), totiž

$$(m\ddot{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{F}}) \cdot \vec{\mathbf{t}} = 0 \quad \text{pro všechna } \vec{\mathbf{t}} \in T_P Q$$

kde symbol \cdot značí skalární součin vektorů.

Ekvivalentnost

D'Alembertův princip mechaniky je ekvivalentní Lagrangeovým rovnicím I. druhu a tedy Newtonovým pohybovým rovnicím s holonomními vazbami.

Princip virtuální práce

⇒ ŠPEKCIÁLNÍ případ d'Alembertova principu, neodehrává se při ní žádný pohyb

$$\sum_{i=1}^{3N} F_i \delta x^i = 0$$

Říkáme mu princip virtuální práce, protože výraz nalevo můžeme fyzikálně chápat jako skalární součin působících sil a vektoru virtuálního posunutí z daného bodu.

Práce vykonaná při virtuální výchylce systému z rovnovážné polohy je nulová.

1.7 Lagrangeovy rovnice druhého druhu.

⇒ Pohybové rovnice soustavy, jejíž konfigurace jsou vyjádřeny vhodnými zobecněnými souřadnicemi.

1D tvar

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial T}{\partial q} = Q \right)$$

kde Q jest zobecněná síla, tedy průmět obvyklé síly F do tečného směru k zobecněné souřadnici q a T jest kinetická energie

$$F \frac{\partial T}{\partial q} = Q$$

Zobecněný tvar

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}^j} - \frac{\partial T}{\partial q^j} = Q_j \right)$$

Pro pole, v němž působí pouze konservativní síly (potenciál V nezávisí na zobecněných rychlostech)

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^j} - \frac{\partial L}{\partial q^j} = 0 \right)$$

kde $L = T - V$ (lagrangián),

$V(\varphi)$... potenciální energie

Praktická „Lagrangeova kuchařka“ pro sestavení pohybových rovnic tedy zní takto:

1. Určíme počet stupňů volnosti n a zavedeme vhodné zobecněné souřadnice q^j , $j = 1, \dots, n$ (neboli n parametrů q^j jednoznačně popisujících pohyb soustavy v souladu s vazbami).
2. Vyjádříme kartézské souřadnice x^i pomocí zobecněných souřadnic q^j , t.j. určíme vztahy $x^i(q^j, t)$, kde $i = 1, \dots, 3N$, $j = 1, \dots, n$.
3. Vypočteme kartézské rychlosti $\frac{dx^i}{dt} \equiv \frac{d}{dt}[x^i(q^j(t), t)]$.
4. Dosazením do definice kinetické energie $T = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3N} m_i \left(\frac{dx^i}{dt} \right)^2$ získáme $T(q^j, \dot{q}^j, t)$.
5. Dosazením $x^i(q^j, t)$ do potenciální energie $V(x^i)$ vypočteme $V(q^j, t)$.
6. Stanovíme Lagrangeovu funkci $L = T - V$.
7. Jejím derivováním získáme Lagrangeovy pohybové rovnice $\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^j} \right) - \frac{\partial L}{\partial q^j} = 0$.

1.8 Hamiltonovy kanonické rovnice a Poissonovy závorky.

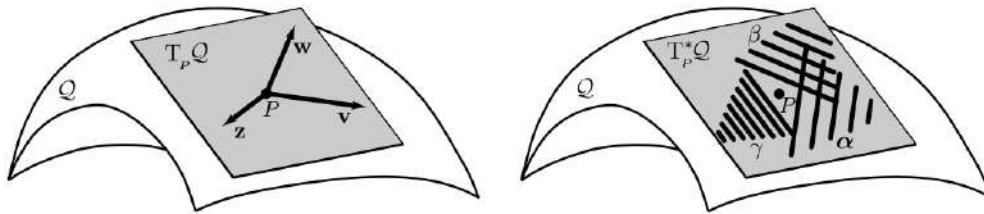
Hamiltonovy kanonické rovnice

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

$$p_j \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^j} \quad \dots \quad \text{kanonická hybnost}$$

$$H(q^j, p_j, t) = \sum_{i=1}^n p_i \dot{q}^i - L \quad \dots \quad \text{Hamiltonova funkce}$$

$$H = T + V \quad \dots \quad \text{hamiltonián}$$



Z pohledu exaktní formulace mechaniky v jazyce diferenciální geometrie lze tedy shrnout, že Lagrangeova mechanika se odehrává na tečném bundlu TQ konfiguračního prostoru (variety) Q , zatímco Hamiltonova mechanika se odehrává na kotečném bundlu T^*Q téhož výchozího prostoru Q . Používají tudíž navzájem duální popisy („1-formy jsou duální k vektorům, a naopak“). Dynamika (časový vývoj) daného systému jsou pak určeny Lagrangeovou resp. Hamiltonovou funkcí, což jsou skalární funkce na různých prostorech:

Lagrange: L je funkce na TQ , což je rychlostní fázový prostor

Hamilton: H je funkce na T^*Q , což je (hybnostní) fázový prostor

Poissonovy závorky

$$\{f, g\} \equiv \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial q^j} \frac{\partial g}{\partial p_j} - \frac{\partial f}{\partial p_j} \frac{\partial g}{\partial q^j} \right)$$

Vlastnosti Poissonových závorek

- | | | |
|----|--|----------------------------|
| 1. | $\{f, g\} = -\{g, f\}$ | antisymetrie |
| 2. | $\{c_1 f_1 + c_2 f_2, g\} = c_1 \{f_1, g\} + c_2 \{f_2, g\}$ | (bi)linearita |
| 3. | $\{\{f, g\}, h\} + \{\{g, h\}, f\} + \{\{h, f\}, g\} = 0$ | Jacobiho identita |
| 4. | $\{f, f\} = 0$ | důsledek antisymetrie |
| 5. | $\{f g, h\} = \{f, h\} g + f \{g, h\}$ | Leibnizovo pravidlo |
| 6. | $\frac{\partial}{\partial t} \{f, g\} = \left\{ \frac{\partial f}{\partial t}, g \right\} + \left\{ f, \frac{\partial g}{\partial t} \right\}$ | derivace dle parametru t |

Fundamentální PZ

$$\{q^i, q^j\} = 0, \{p_j, p_i\} = 0 \quad \forall i, j \in \{1, \dots, n\}$$
$$\{q^i, p_j\} = \delta_j^i$$

Integrál pohybu je výraz tvaru $f(q^j, \dot{q}^j)$, který v každém čase t nabývá konstantní hodnoty, když ho vyčíslíme podél libovolné trajektorie $q^j(t)$ řešící pohybové rovnice daného systému.

• PZ a integrály pohybu (IP)

$$\frac{df}{dt} = \{f, H\} + \frac{\partial f}{\partial z}$$

- $F(q_j, p_j)$ je IP $\Leftrightarrow \{f, H\} = 0$.
- $H(q_j, p_j)$ nezávislá na čase je IP.
- Jsou-li f a g IP, pak $\{f, g\}$ je IP.

1.9 Hamiltonův variační princip.

Formulace Hamiltonova variačního principu

Pohyb soustavy se v časovém intervalu $t \in [t_1, t_2]$ děje tak, že

$$\delta S = 0.$$

Funkcionál S se nazývá akce a je definován pomocí integrálu

$$S \equiv \int_{t_1}^{t_2} L dt = \int_{t_1}^{t_2} L(q^j(t), \dot{q}^j(t), t) dt,$$

kde L je příslušná Lagrangeova funkce systému.

Skutečná trajektorie $q^j(t)$ je taková, že akce S pro ni nabývá stacionární hodnotu.

Jednotka akce $[S] = J \cdot s$, stejnou jednotku má planckova konstanta \hbar

$q^j(t)$	$j \in \mathbb{N}$
↓	spojité prostředí
$q^x(t) \equiv q(x, t)$	$x \in \mathbb{R}$
↓	více dimenzí prostoru
$\Phi(x, y, z, t)$	
↓	relativisticky
$\Phi(x^\mu)$	
↓	složitější pole
$A_\nu(x^\mu), g_{\mu\nu}(x^\mu),$	atd.
Maxwell	Einstein

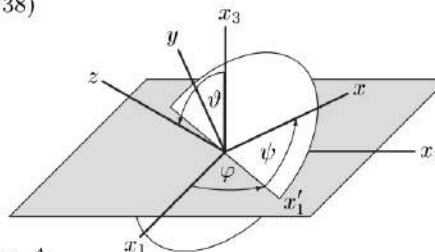
V teorii kontinua a teorii pole nás samozřejmě zajímá protoročasný vývoj příslušných fyzikálních veličin. Ty jsou určeny pohybovými rovnicemi resp. evolučními rovnicemi pole. Je opravdu pozoruhodné, že tyto rovnice pole lze odvodit z variačního principu $\delta S = 0$.

2 Mechanika tuhého tělesa

2.1 Eulerovy úhly a Eulerovy kinematické rovnice.

Ortogonální matice A jednoznačně určující vztah mezi dvěma libovolně natočenými bázemi je určena pouhými 3 nezávislými parametry (matice 3×3 obsahuje obecně 9 prvků, relace ortogonalitě však představují 6 vazeb). Libovolnou rotaci kolem počátku můžeme přitom realizovat třemi po sobě jdoucími jednoduchými rotacemi kolem vhodné pevné osy. Za úhlové parametry zmíněných tří jednoduchých rotací zvolil Euler (1738)

φ ... precesní úhel
 ϑ ... nutační úhel
 ψ ... rotační úhel



Jejich význam plyne z následující konstrukce matice A :

1. Vyjdeme z báze \mathbf{e}_i pevné v prostoru a provedeme otočení kolem osy x_3 o úhel φ . Otočení je dáno maticí (6.8)

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

2. Následně provedeme otočení kolem osy x'_1 o úhel ϑ dané maticí

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

3. Nakonec provedeme otočení kolem osy x''_3 o úhel ψ dané maticí

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

Eulerovy kinematické rovnice

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

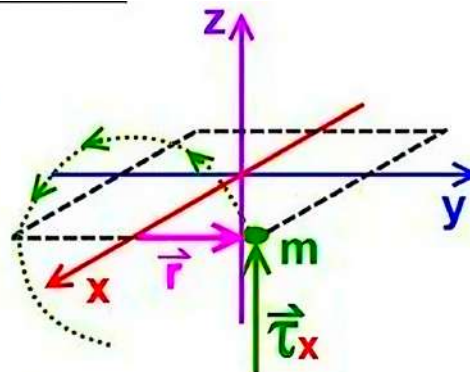
kde jsme označili osy výsledného systému korotujícího s tělesem jako (x, y, z) .

2.2 Tenzor setrvačnosti.

⇒ Tenzor setrvačnosti popisuje setrvačné vlastnosti tuhého tělesa vůči rotačnímu pohybu.

$$\begin{bmatrix} \tau_x \\ \tau_y \\ \tau_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_{xx} & I_{xy} & I_{xz} \\ I_{yx} & I_{yy} & I_{yz} \\ I_{zx} & I_{zy} & I_{zz} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d\omega_x \\ d\omega_y \\ d\omega_z \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \tau_x \\ \tau_y \\ \tau_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_{xx} & I_{xy} & I_{xz} \\ I_{yx} & I_{yy} & I_{yz} \\ I_{zx} & I_{zy} & I_{zz} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_x \\ \alpha_y \\ \alpha_z \end{bmatrix}$$



$$\begin{aligned} \tau &= I\alpha & I &= mR^2 \\ F &= ma \end{aligned}$$

Odvození

- Vydeme z momentu hybnosti L tuhého tělesa

$$L = \sum_a \mathbf{r}^a \times \mathbf{p}^a = \sum_a m^a \mathbf{r}^a \times (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}^a),$$

kde sumace probíhá přes všech N bodů tělesa, $a = 1, 2, \dots, N$, majících hmotnosti m^a v místech \mathbf{r}^a . Ve vzorci jsme použili vztah $\mathbf{v}^a = (d\mathbf{r}^a/dt)|_{\text{prostor}} = \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}^a$

- Libovolný vektor $\boldsymbol{\xi}$, promítneme L na $\boldsymbol{\xi}$,

$$L \cdot \boldsymbol{\xi} = \sum_a m^a \mathbf{r}^a \times (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}^a) \cdot \boldsymbol{\xi} = \sum_a m^a (\boldsymbol{\xi} \times \mathbf{r}^a) \cdot (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}^a),$$

Definujeme tenzor setrvačnosti

$$I(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\Omega}) \equiv \sum_a m^a (\boldsymbol{\xi} \times \mathbf{r}^a) \cdot (\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}^a) = L \cdot \boldsymbol{\xi}$$

- Funkce $I(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\Omega})$ definovaná tímto vztahem přiřazuje dvojici vektorů $(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\Omega})$ reálné číslo rovné $L \cdot \boldsymbol{\xi}$
- Evidentně je **lineární** v obou argumentech a **symetrická**.

- momenty vůči souřadnicovým osám x, y, z

$$I_{xx} = \sum_i m_i (y_i^2 + z_i^2)$$

$$I_{yy} = \sum_i m_i (x_i^2 + z_i^2)$$

$$I_{zz} = \sum_i m_i (x_i^2 + y_i^2)$$

- deviační momenty

$$D_{xy} = \sum_i m_i x_i y_i$$

$$D_{yz} = \sum_i m_i y_i z_i$$

$$D_{xz} = \sum_i m_i x_i z_i$$

- tenzor momentu setrvačnosti

$$\mathbf{I} = \begin{pmatrix} I_{xx} & -D_{xy} & -D_{xz} \\ -D_{yx} & I_{yy} & -D_{yz} \\ -D_{zx} & -D_{zy} & I_{zz} \end{pmatrix}$$

- pokud zvolíme jako souřadnicové osy hlavní osy tělesa jsou deviační momenty nulové

- tenzor momentu setrvačnosti

$$I = \begin{pmatrix} I_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & I_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & I_{zz} \end{pmatrix}$$

Definujeme kinetickou energii otáčejícího se tělesa

- Dosadíme za vektor ξ vektor Ω

$$I(\Omega, \Omega) = \sum_a m^a (\Omega \times \mathbf{r}^a) \cdot (\Omega \times \mathbf{r}^a) = \sum_a m^a \mathbf{v}^a \cdot \mathbf{v}^a = 2T,$$

kde T je kinetická energie otáčejícího se tělesa.

Složky I_{ij} tenzoru I jsou definovány jako obrazy vektorů báze \mathbf{e}_i a \mathbf{e}_j ,

$$I_{ij} \equiv I(\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j) = \sum_a m^a (\mathbf{e}_i \times \mathbf{r}^a) \cdot (\mathbf{e}_j \times \mathbf{r}^a)$$

Polohové vektory jednotlivých bodů tělesa lze ovšem také vyjádřit v bázi $\{\mathbf{e}_i\}$, $\mathbf{r}^a = x_i^a \mathbf{e}_i$ pro spojité prostředí

$$I_{ij} = \int (\delta_{ij} x_k x_k - x_i x_j) \rho dV,$$

$$\begin{array}{ll} L_i = I_{ij} \Omega_j & \dots \text{ složky momentu hybnosti} \\ T = \frac{1}{2} I_{ij} \Omega_i \Omega_j & \dots \text{ kinetická energie} \end{array}$$

Zjednodušený vztah

$$I_{\mathbf{n}} = I_{ij} n_i n_j,$$

kde $I_{\mathbf{n}}$ je obvyklý moment setrvačnosti tělesa při otáčení kolem osy vedoucí zvoleným počátkem soustavy.

Transformační vlastnosti tensoru setrvačnosti

- Vůči **rotacím** se chová jako tensor

$$I'_{ij} = A_{ik}A_{jl}I_{kl}$$

- Vůči **translacím** (posuv počátku o konstantní vektor \mathbf{a} bez otočení os) lze odvodit Steinerovu větu

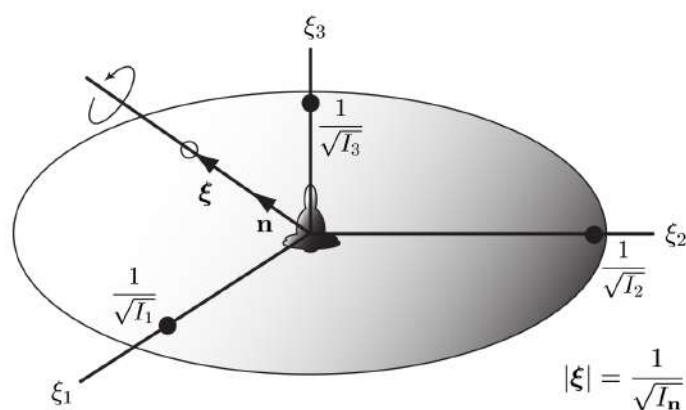
$$I_{ij} = I_{ij}^0 + (\delta_{ij}a_k a_k - a_i a_j) m$$

Elipsoid setrvačnosti

Označíme-li $\xi_i \equiv n_i/\sqrt{I_{\mathbf{n}}}$, pak v bázi hlavních os má podmínka tvar

$$I_{ij}\xi_i\xi_j = I_1\xi_1^2 + I_2\xi_2^2 + I_3\xi_3^2 = 1$$

V prostoru parametrů (ξ_1, ξ_2, ξ_3) tato podmínka určuje povrch elipsoidu s osami $\frac{1}{\sqrt{I_1}}, \frac{1}{\sqrt{I_2}}, \frac{1}{\sqrt{I_3}}$, kterému říkáme **elipsoid setrvačnosti**.



Vlastnosti

- Zvolíme-li libovolný směr osy otáčení \mathbf{n} , je tím určen též **směr vektoru** $\boldsymbol{\xi} \sim \mathbf{n}$.
- Jeho **délka** $|\boldsymbol{\xi}|$ je jednoznačně určena průsečíkem daného směru s elipsoidem setrvačnosti.
- Odtud lze tedy již určit **hodnotu momentu setrvačnosti** $I_{\mathbf{n}}$ při otáčení podél dané osy pomocí vztahu $|\boldsymbol{\xi}| = |\mathbf{n}|/\sqrt{I_{\mathbf{n}}}$, neboli $I_{\mathbf{n}} = 1/|\boldsymbol{\xi}|^2$.
- Pokud má těleso jistou **symetrii**, pak se tenzor setrvačnosti dále zjednodušuje.
- Pro $I_1 = I_2 = I_3$ se elipsoid setrvačnosti zdegeneruje na sféru.

2.3 Eulerovy dynamické rovnice, pohyb jednoduchých setrvačníků.

Eulerovy dynamické rovnice

⇒ Pohybové rovnice určující otáčivý pohyb tuhého tělesa.

⇒ Při odvozování vycházíme z 2. impulsové věty



$$\left. \frac{d\mathbf{L}}{dt} \right|_{\text{prostor}} = \left. \frac{d\mathbf{L}}{dt} \right|_{\text{těleso}} + \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{L}.$$

Odtud okamžitě dostáváme

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

$$M_y = I_2 \dot{\Omega}_y + (\Omega_z L_x - \Omega_x L_z),$$

$$M_z = I_3 \dot{\Omega}_z + (\Omega_x L_y - \Omega_y L_x),$$

neboli

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

$$I_2 \dot{\Omega}_y - (I_3 - I_1) \Omega_z \Omega_x = M_y,$$

$$I_3 \dot{\Omega}_z - (I_1 - I_2) \Omega_x \Omega_y = M_z,$$

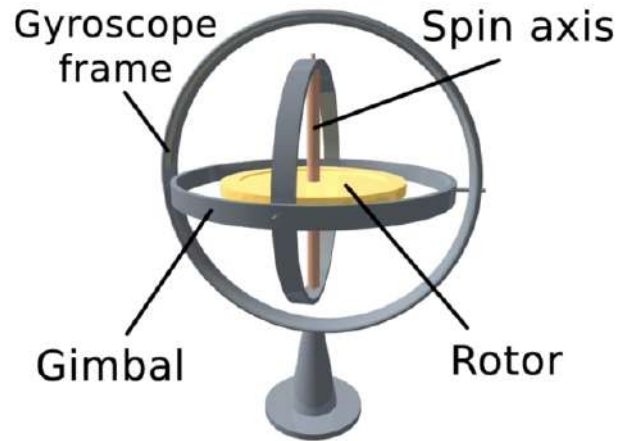
Pohyb jednoduchých setrvačníků

Setrvačník

- zařízení využívající zachování momentu hybnosti
- jest rotačně symetrické



- volný setrvačník (gyroskop)
- nulový moment vnějších sil
- osa rotace je stálá



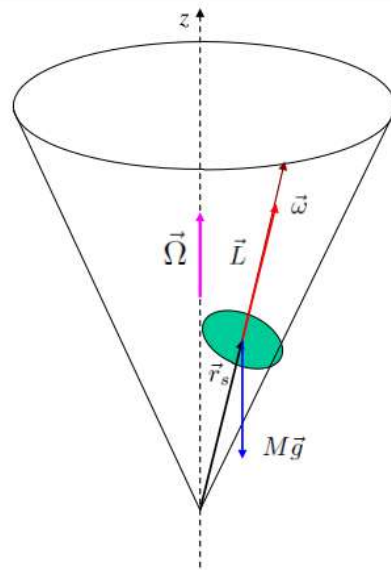
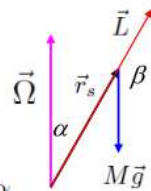
• 2. impulsová věta: $\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{\tau}^E = \vec{r}_s \times M\vec{g}$

$$\vec{\tau}^E = \vec{\Omega} \times \vec{L}$$

$$\vec{r}_s \times M\vec{g} = \vec{\Omega} \times \vec{L}$$

$$Mr_s g \sin \beta = \Omega L \sin \alpha$$

$$\beta = \pi - \alpha \rightarrow \sin \beta = \sin \alpha$$



• precesní rychlost $\Omega = \frac{r_s M g}{I_z \omega}$

- Volur setračník (bezsvov'): $\vec{M} = \vec{0}$ - $I_1 = I_2$ a osa z arialtwv sumetricoon oson rísa EDR: $I_1 \angle \dot{\Omega}_x = (I_1 - I_3) \propto \Omega_y \Delta \Omega_z$ $I_A < \dot{S}_y = (I_3 - I_1) \Omega_x < \Omega_z$ 300R 1. Fída

$$I_3 \dot{\Omega}_z = 0$$

z brik dvt ree $\Omega_x = \frac{I_1 - I_2}{I_1} \omega_{0z} 2\Omega_r \equiv \omega_0 < \Omega_2$

$$\Delta \Omega_y = \frac{J_2 - I_1}{J_1} \omega_{0t} \Sigma_x = -\omega_0 L \Omega_x$$

D) ra HO $\ddot{\pi}_x + \omega_0^2 < u_x = 0$ rissuc': $\Omega_1 = A \sin(\omega_0 t + \delta)$
 $\Omega_x = A \cos(\omega_0 t + \delta)$ A, ω_0 , δ liberolwr int. Kenst.

3 Mechanika kontinua

3.1 Tenzor napětí a deformace, Hookův zákon.

Tensor napětí

- tenzor napětí

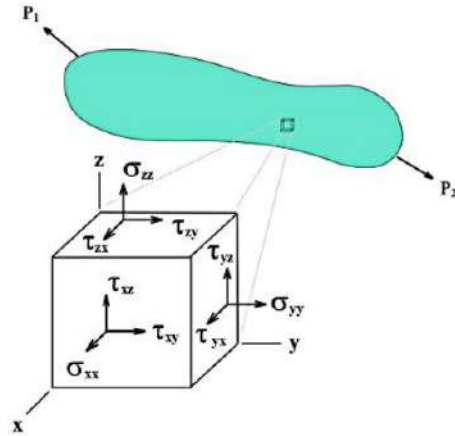
$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \quad \begin{aligned} \tau_{xy} &= \tau_{yx} \\ \tau_{xz} &= \tau_{zx} \\ \tau_{zy} &= \tau_{yz} \end{aligned}$$

- čistě tahové složky (tlakové) složky:

$$\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}$$

- smykové složky:

$$\tau_{xy}, \tau_{xz}, \tau_{yz}$$



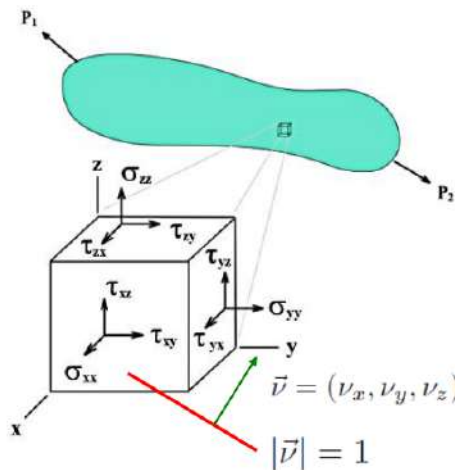
- tenzor napětí

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \quad \begin{aligned} \tau_{xy} &= \tau_{yx} \\ \tau_{xz} &= \tau_{zx} \\ \tau_{zy} &= \tau_{yz} \end{aligned}$$

- napětí v obecné rovině:

$$\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nu_x \\ \nu_y \\ \nu_z \end{pmatrix}$$

$$\vec{\sigma} = \boldsymbol{\sigma} \vec{\nu}$$



• tenzor napětí

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix}$$

$$\tau_{xy} = \tau_{yx}$$

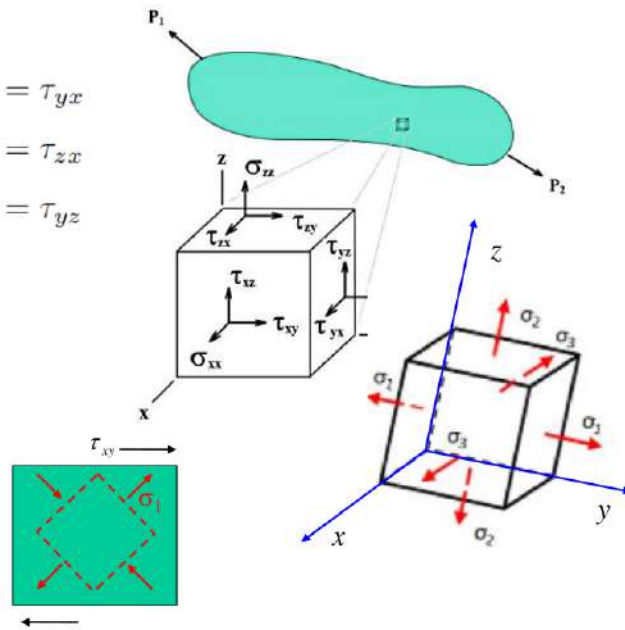
$$\tau_{xz} = \tau_{zx}$$

$$\tau_{zy} = \tau_{yz}$$

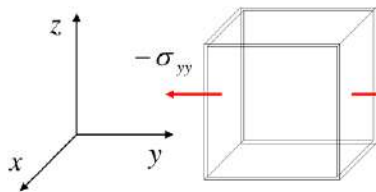
• hlavní roviny

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 \end{pmatrix}$$

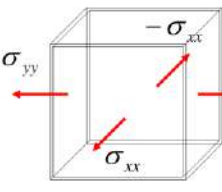
• $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ - hlavní napětí



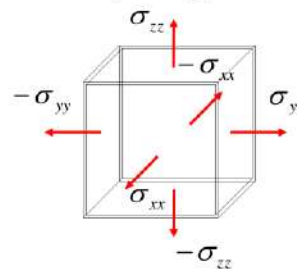
• jednoosá napjatost



• dvojosá napjatost



• trojosá napjatost



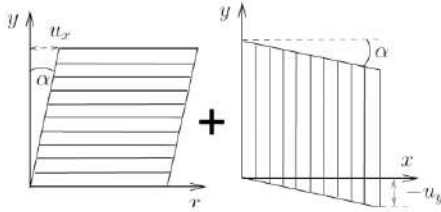
tenzor napětí σ
$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix}$$

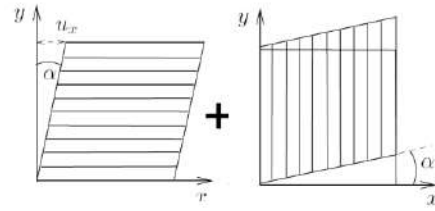
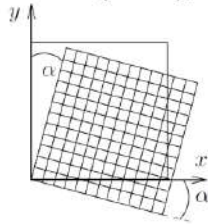
Tensor deformace

• deformace smykovými napětími

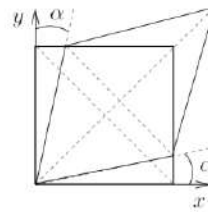


- ϵ_{xy} a $-\epsilon_{yx}$ dohromady
- rotace, ale žádná deformace

$$\epsilon_{xy} = -\epsilon_{yx}$$

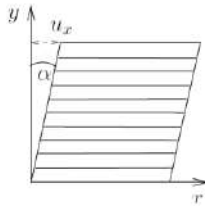


- ϵ_{xy} a ϵ_{yx} dohromady
- **prostý smyk**

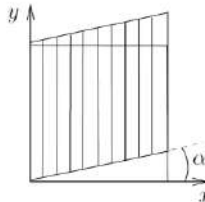


• deformace smykovými napětími

- deformace ve směru osy x: $\epsilon_{yx} = \frac{u_x}{y} = \operatorname{tg} \alpha$



- deformace ve směru osy y: $\epsilon_{xy} = \frac{u_y}{x} = \operatorname{tg} \alpha$



• malé deformace

$$\operatorname{tg} \alpha \approx \alpha$$

$$\epsilon_{yx} = \frac{\partial u_x}{\partial y} = \alpha_{yx}$$

$$\epsilon_{xy} = \frac{\partial u_y}{\partial x} = \alpha_{xy}$$

$$\epsilon_{xy} = \epsilon_{yx} \Rightarrow \alpha_{xy} = \alpha_{yx}$$

• úhel smyku

$$\epsilon_{xy} \equiv \alpha_{xy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right)$$

• tenzor malých deformací

$$\boldsymbol{\epsilon} \equiv \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{yx} & \epsilon_{yy} & \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} & \epsilon_{zy} & \epsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad \begin{matrix} \epsilon_{xy} = \epsilon_{yx} \\ \epsilon_{xz} = \epsilon_{zx} \\ \epsilon_{yz} = \epsilon_{zy} \end{matrix}$$

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

ϵ_{xx} – relativní změna délky elementu, který byl před deformací rovnoběžný s osou x

ϵ_{yy} – relativní změna délky elementu, který byl před deformací rovnoběžný s osou y

ϵ_{zz} – relativní změna délky elementu, který byl před deformací rovnoběžný s osou z

ϵ_{xy} – je rovna polovině úhlu o který se deformací změní pravý úhel mezi elementy původně rovnoběžnými s osou x a y

ϵ_{xz} – je rovna polovině úhlu o který se deformací změní pravý úhel mezi elementy původně rovnoběžnými s osou x a z

ϵ_{yz} – je rovna polovině úhlu o který se deformací změní pravý úhel mezi elementy původně rovnoběžnými s osou y a z

Hookův zákon

• čistý tah

• napětí $\sigma_{xx} = \frac{F}{S}$ [Nm⁻² = Pa]

• guma: $E = 0.01-0.1$ GPa
 • ocel: $E = 200-220$ GPa
 • měď: $E = 117$ GPa
 • beton: $E = 30$ GPa

• prodloužení

• deformace $\varepsilon_{xx} = \frac{l - l_0}{l_0}$

Hookův zákon $\varepsilon_{xx} = k_l \sigma_{xx}$

Youngův modul pružnosti $E \equiv \frac{1}{k_l}$

• čistý tah

• napětí $\sigma_{xx} = \frac{F}{S}$ [Nm⁻² = Pa]

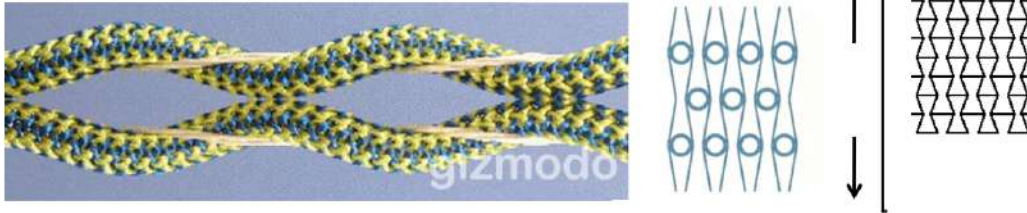
• příčné zkrácení

• deformace $\varepsilon_{yy} = -\frac{R - R_0}{R_0}$

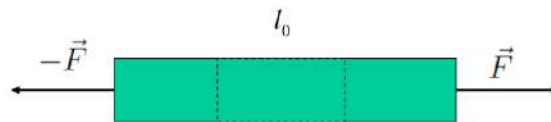
Hookův zákon $\varepsilon_{yy} = k_t \sigma_{xx} = \frac{k_t}{k_l} \varepsilon_{xx} = \nu \varepsilon_{xx}$

Poissonův poměr $\nu = \frac{k_t}{k_l} = k_t E$

- Poissonův poměr $\nu = \frac{k_t}{k_l}$
- v izotropních materiálech $-1 \leq \nu \leq 0.5$
- guma: $\nu \approx 0.5$ $E = 0.01-0.1$ GPa
- ocel: $\nu \approx 0.3$ $E = 200-220$ GPa
- měď: $\nu \approx 0.37$ $E = 117$ GPa
- beton: $\nu \approx 0.2$ $E = 30$ GPa
- korek: $\nu \approx 0.0$ $E = 0.032$ GPa
- auxetické materiály – materiály s negativním Poissonovým poměrem

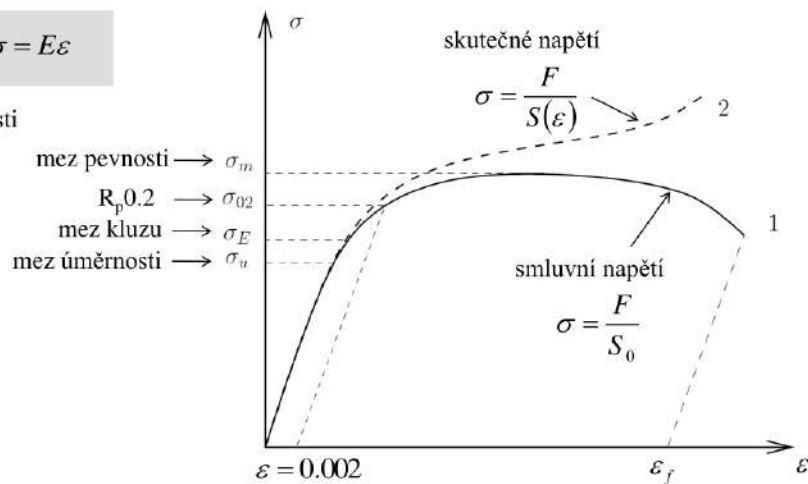


• čistý tah



• Hookův zákon $\sigma = E\varepsilon$

• E – modul pružnosti



$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C}\boldsymbol{\varepsilon}$$

tenzor napětí $\sigma_{i,j}$ tenzor deformace $\varepsilon_{k,l}$
 elastické koeficienty $C_{i,j,k,l}$

- izotropní prostředí \rightarrow 2 nezávislé elastické koeficienty
 - Youngův modul pružnosti E (modul pružnosti v tahu)
 - Poissonův poměr ν

zobecněný Hookův zákon pro izotropní prostředí

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{E} [(1+\nu)\boldsymbol{\sigma} - \nu \text{Tr}(\boldsymbol{\sigma})\mathbf{E}]$$

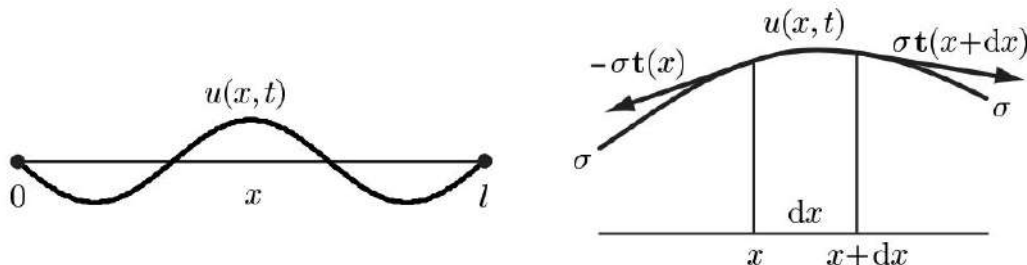
stopa matice $\text{Tr}(\boldsymbol{\sigma}) = \sum_i \sigma_{ii}$

\mathbf{E} jednotková matice

3.2 Rovnice struny a její řešení.

Rovnice struny

Uvažujme strunu, jejíž konce jsou upevněny v bodech 0 a l na ose x . Předpokládejme, že struna je napjatá vnitřním napětím σ a její hmotnost je ve směru x rozložena s konstantní lineární hustotou ρ .



Nechť struna koná jen příčné kmity. Její výchylku z rovnovážné polohy popíšeme funkcí $u(x,t)$. Při kmitech se sice mění délka struny a podle Hookova zákona i napětí v ní. Budeme však předpokládat, že tato změna napětí σ je zanedbatelná, což bude splněno například tehdy, když struna má velké základní předpětí. Protože struna kmitá jen kolmo na osu x , je její zrychlení v příčném směru dáno veličinou $\frac{\partial^2}{\partial t^2} u(x,t)$. Newtonova pohybová rovnice úseku struny délky dx o hmotnosti ρdx proto je

$$\rho dx \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = F_y$$

Nyní musíme odvodit velikost kolmé síly F_y působící na daný úsek struny v důsledku napětí σ . Uvažme tedy obecnou výchylku struny popsanou v daném okamžiku funkcí $y(x)=u(x,t)$. To je rovinná křivka $x=x$, $y=y(x)$ s jednotkovým tečným vektorem $\mathbf{t}(\mathbf{x})=k\left(1, \frac{dy}{dx}\right)$, kde k je normalizační faktor. Předpokládáme-li, že úhly, jež struna svírá s osou x , jsou malé, pak na úseku struny mezi x a $x+dx$ působí síla $\mathbf{F}=\sigma \mathbf{t}(x+dx)-\sigma \mathbf{t}(x)$. Pomocí Taylorova rozvoje upravíme y -ovou složku síly do tvaru $F_y = \sigma \frac{d^2 y}{dx^2}(x) dx$. Pak dostáváme rovnici struny jako

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

což je jednorozměrná vlnová rovnice pro funkci $u(x,t)$, přičemž $c = \sqrt{\frac{\sigma}{\rho}}$ je, jak uvidíme, rychlost šíření vlny.

Řešení rovnice struny

Metoda d'Alembertova

Zavedeme transformaci

$$\xi = x - ct \quad (1)$$

$$\eta = x + ct \quad (2)$$

pomocí těchto relací dostáváme libovolné řešení ve tvaru

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

přičemž F reprezentuje profil vlny šířící se rychlostí c směrem doprava, zatímco G profil vlny putující doleva. Konkrétní tvar řešení určují počáteční podmínky, které klademe na řešení. Všimneme si, jak dostaneme funkce F a G z počátečních podmínek v případě nekonečné struny. Předpokládejme, že v čase $t = 0$ je zadána funkce u i její časová derivace

$$u(x, 0) = u_0(x)$$

$$u_{,t}(x, 0) = v_0(x)$$

$$G(x) - F(x) = \frac{1}{c}V_0(x)$$

kde $V_0(x) = \int v_0(x)dx$. Dosazením dostáváme řešení vyhovující uvedeným počátečním podmínkám

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

Konstrukce řešení je jednoznačná (primitivní funkce V_0 je určena až na aditivní konstantu, která z výsledného řešení vypadne). Platí věta o jednoznačnosti, podle které je řešení vlnové rovnice jednoznačně určeno zadáním počátečních podmínek. Uvedené řešení se nazývá d'Alembertovo.

Metoda Bernoulliova–Fourierova

V principu lze výše uvedeného d'Alembertovo postupu užít i pro hledání řešení konečné struny, například s pevnými konci, ale výhodnější je užít postupu Bernoulliova. Při něm se hledá řešení rovnice (3.2) v separovaném tvaru $u(x, t) = X(x)T(t)$. Dosazením do rovnice struny dostáváme problém ve tvaru

$$c^2 \frac{\ddot{X}(x)}{X(x)} = \frac{\ddot{T}(t)}{T(t)} = -\omega^2$$

Vztah vyjadřuje rovnost mezi dvěma funkcemi různých proměnných, která má být splněna pro všechny hodnoty x a t . To nastává jen tehdy, rovnají-li se obě strany téže separační konstantě $-\omega^2$, kde ω je reálné. Tento problém představuje dvě diferenciální rovnice pro $X(x)$ a $T(t)$. Rovnice pro X má obecné řešení

$$X(x) = C_1 \cos\left(\frac{\omega}{c}x\right) + C_2 \sin\left(\frac{\omega}{c}x\right)$$

kde C_1 a C_2 jsou konstanty. Z okrajových podmínek plyne, že $C_1 = 0$ a $\sin\left(\frac{\omega}{c}l\right) = 0$, což je možno splnit pro úhlové frekvence $\omega_n = n\pi \frac{c}{l}$. Obdobné řešení dostáváme pro $T(t)$. Tedy

$$u_n(x, t) = \sin\left(\frac{\omega_n}{c}x\right) [a_n \cos(\omega_n t) + b_n \sin(\omega_n t)]$$

je partikulárním řešením rovnice struny. Jelikož rovnice struny je lineární, bude i libvolná superpozice funkcí u_n řešením. Bude jí řešit i nekonečná řada

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} u_n(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \sin\left(\frac{x}{l}n\pi\right) \left[a_n \cos\left(\frac{ct}{l}n\pi\right) + b_n \sin\left(\frac{ct}{l}n\pi\right) \right]$$

pokud ji lze derivovat člen po členu a stejnoměrně konverguje. To samozřejmě závisí na hodnotách koeficientů a_n , b_n , které určíme z počátečních podmínek

$$u(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin\left(n\pi \frac{x}{l}\right) = u_0(x)$$

$$u_{,t}(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n n\pi \frac{c}{l} \sin\left(n\pi \frac{x}{l}\right) = v_0(x)$$

$u_0(x)$ je spojitá funkce, která vymizí v koncových bodech a $v_0(x)$ je po částech spojitá funkce. Z teorie Fourierových řad plyne, že koeficienty jsou určeny vztahy

$$a_n = \frac{2}{l} \int_0^l u_0(x) \sin\left(n\pi \frac{x}{l}\right) dx \quad (3)$$

$$b_n = \frac{1}{n\pi c} \int_0^l v_0(x) \sin\left(n\pi \frac{x}{l}\right) dx \quad (4)$$

3.3 Pohybová rovnice ideální tekutiny, rovnice kontinuity, Bernoulliho rovnice.

Definice pojmů

Tekutiny

- kapaliny & plyny

Ideální tekutina

- V ideální tekutině **neexistuje smykové napětí**.
- Napětí lze tedy vyjádřit jako

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

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

Dokonalá tekutina

- navíc požadujeme její **nestlačitelnost**, tedy musí splňovat podmínku

$$\rho = \text{konst.}$$

Dokonalý plyn

- Dokonalý plyn je stlačitelný.

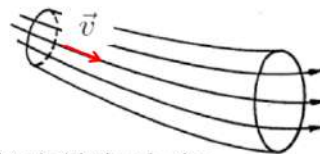
Barotropní plyn

- hustotu plynu lze vyjádřit jako funkci tlaku

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

Hydrodynamika

- ustálené proudění
- rychlost tekutiny se v žádném místě nemění $\longrightarrow \vec{v}$ je statické vektorové pole
- proudnice – čáry k nimž je rychlost neustále tečnou



- při ustáleném proudění jsou proudnice skutečné trajektorie částic tekutiny
- Průtok $dQ = \vec{v} d\vec{S}$

Pohybová rovnice ideální tekutiny

Analogicky Newtonově pohybové rovnici získáváme také **pohybovou rovnici kontinua**

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

kde σ_{ij} je tenzor napětí a G_i vektor objemových sil.

Eulerova hydrodynamická rovnice

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

V rovnici má poměr $\vec{I} = \vec{G}/\rho$ význam intenzity silového pole.

Rovnici můžeme přepsat do řeči vektorů

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

Rovnice kontinuity

- hmotnost kapaliny, která proteče za čas Δt

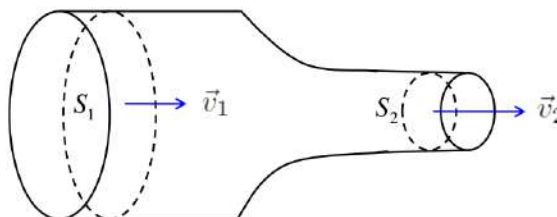
$$\Delta m = \rho S_1 v_1 \Delta t = \rho S_2 v_2 \Delta t$$

- zákon zachování hmotnosti

$$S_1 v_1 = S_2 v_2$$

rovnice kontinuity

$$Q = \text{konst}$$



Diferenciální podoba rovnice kontinuity

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

kde ρ_A je hustota veličiny A , \vec{v} je rychlost toku veličiny

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

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

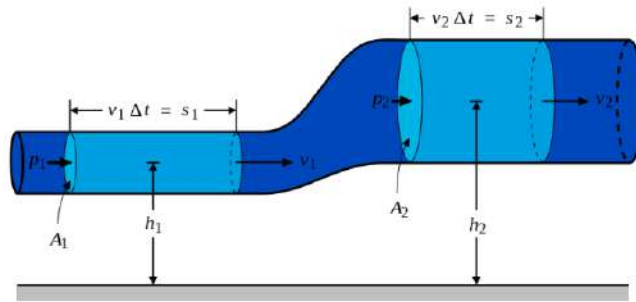
Bernoulliho rovnice

- ideální (nestlačitelná) kapalina
- kdyby kapalina stála

$$p_1 - p_2 = -\rho g(h_2 - h_1) = \rho g h$$

↑
potenciální energie na jednotku objemu: $\frac{E_p}{V}$

práce, kterou vykoná tlaková síla při přemístění jednotkového objemu do výšky h :



$$\frac{W}{V} \quad dW = p dV$$

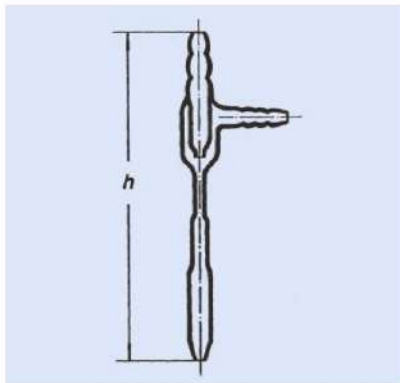
- pokud voda teče rychlostí v je kinetická energie na jednotku objemu: $\frac{E_K}{V} = \frac{1}{2} \rho v^2$
- zákon zachování energie: $\frac{E_p}{V} + \frac{E_K}{V} + p = \text{konst.}$

• **Bernoulliho rovnice:** $\frac{1}{2} \rho v^2 + p + \rho g h = \text{konst}$

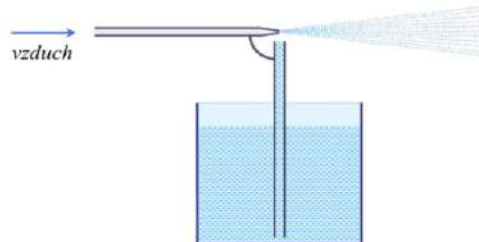
- pokud se nemění výška ($W_g = 0$)

$$\frac{1}{2} \rho v^2 + p = \text{konst}$$

- Vodní vývěva



- stříkáci pistole



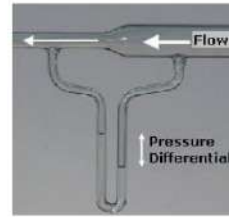
• pokud se nemění výška ($W_g = 0$)

• Venturiho efekt

$$\frac{1}{2} \rho v^2 + p = \text{konst}$$

dynamický tlak

statický tlak

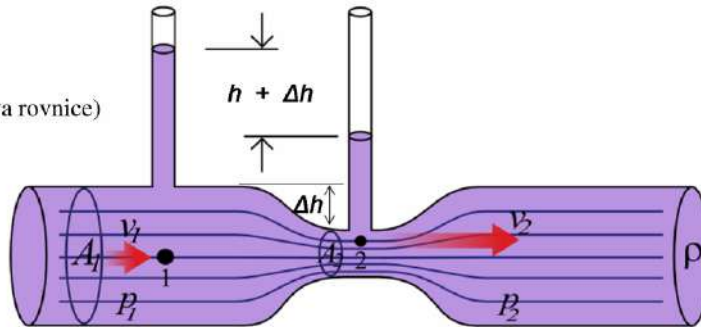


$$A_1 v_1 = A_2 v_2 \quad (\text{rovnice kontinuity})$$

$$\frac{1}{2} \rho v_1^2 + p_1 = \frac{1}{2} \rho v_2^2 + p_2$$

(Bernoulliho rovnice)

$$v_1 = \sqrt{\frac{2(p_1 - p_2)}{\rho \left(\frac{A_1^2}{A_2^2} - 1 \right)}}$$

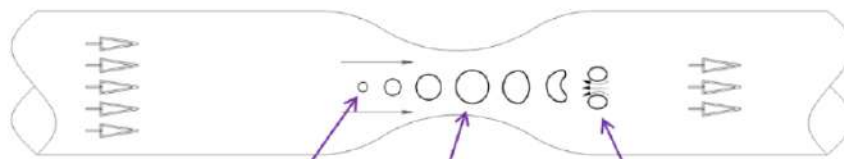


• pokud se nemění výška ($W_g = 0$)

$$\frac{1}{2} \rho v^2 + p = \text{konst}$$

dynamický tlak

statický tlak

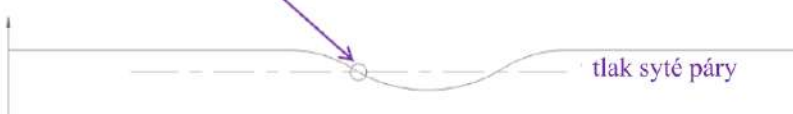


vznik bublin

zvětšování bublin

kolaps bublin

statický tlak



tlak syté páry

3.4 Viskózní tekutiny, Navierovy-Stokesovy rovnice, laminární a turbulentní proudění.

Viskosní tekutiny a Navier-Stokesova rovnice

Je-li newtonovská tekutina vazká, jsou koeficienty λ a μ nenulové.

Nestlačitelná kapalina

$$\operatorname{div}(\vec{v}) = 0$$

Navierova–Stokesova rovnice pro nestlačitelnou vazkou tekutinu.

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \operatorname{grad}) \mathbf{v} = \mathbf{G} - \frac{1}{\rho} \operatorname{grad} p + \nu \Delta \mathbf{v}$$

kde $\nu = \mu/\rho$ je tzv. kinematická viskozita.

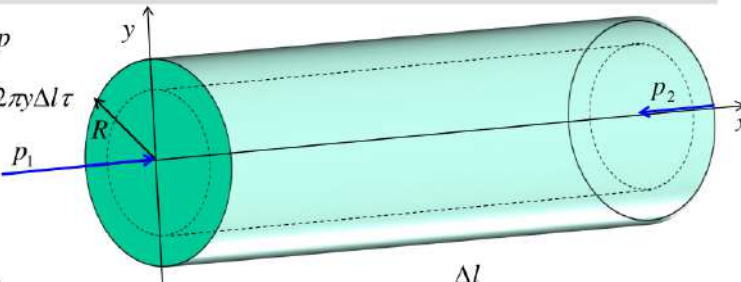
Okrajová podmínka pro vazkou tekutinu se klade $\mathbf{v} = 0$ na hranici. V jejím důsledku je proudění kromě triviálních případů vířivé a nelze proto zavést rychlostní potenciál.

Laminární a turbulentní proudění

Laminární proudění

- Proudění při kterém nedochází k mísení tekutiny a sice se jeho proudnice neprotínají

- tlaková síla: $F_p = \pi y^2 \Delta p$
- síla vnitřního tření: $F_t = 2\pi y \Delta l \tau$
- laminární proudění: $\pi y^2 \Delta p = 2\pi y \Delta l \tau$

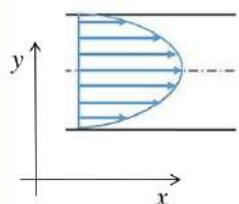


$$\tau = -\eta \frac{dv}{dy} \rightarrow dv = -\frac{\Delta p}{2\Delta l \eta} y dy \quad v(R) = 0$$

$$v = -\frac{\Delta p}{4\Delta l \eta} y^2 + C \quad C = \frac{\Delta p}{4\Delta l \eta} R^2$$

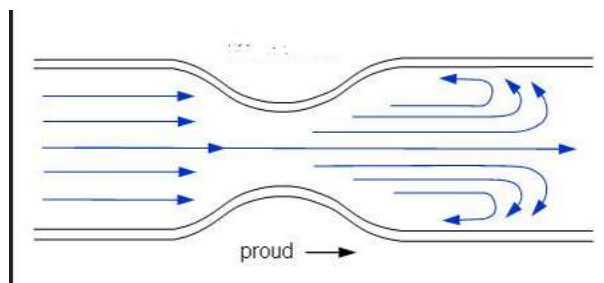
$$v = \frac{\Delta p}{4\Delta l \eta} (R^2 - y^2)$$

parabolický rychlostní profil



Turbulentní proudění

- Vířivé proudění, při němž dochází k protínání jednotlivých proudnic



Reynoldsovo číslo

K jakému typu proudění dochází můžeme určit exaktním řešením **Navierr-Stokesovy rovnice**.

Pro hrubý odhad však postačí užití tzv. Reynoldsova čísla

$$Re = \frac{vR}{\nu}$$

kde v je střední rychlost proudění, R charakteristický rozměr systému a kde $\nu = \frac{\mu}{\rho}$ je dynamická viskozita.

- Jest-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 (1000, 20000).

4 Speciální teorie relativity

4.1 Otázka éteru a Michelsonův-Morleyův experiment.

Newtonova fyzika:

- Na základě znalosti **silového působení** lze **určit pohyb** daného tělesa.
- Určit pohyb \Rightarrow říci, kde se těleso v kterém okamžiku nachází (v čase a v prostoru)

Vůči čemu ovšem polohu a čas vztahovat?

Absolutní prostor a absolutní čas

- jevištěm fyzikálního dění je nepohyblivý „absolutní prostor“, který je geometricky třírozměrným eukleidovským prostorem.
- existence „absolutního času“, který „plyne sám od sebe a díky své povaze rovnoměrně“

Oba tyto pojmy jsou „absolutní“ \Leftrightarrow jsou nezávislé na hmotě, tedy na fyzikálním dění

Newtonovy zákony

- 1. Newtonův zákon tvrdí
 - Existuje alespoň jeden inerciální systém, a z jeho definice je ihned jasné, že takových systémů existuje nekonečně mnoho; navzájem se pohybují rovnoměrně přímočaře, tedy jsou svázány Galileiho transformací.
- 2. Newtonův zákon tvrdí
 - Newtonův druhý zákon a následně celá jeho teorie platí ve stejném tvaru ve všech inerciálních systémech — je invariantní vůči Galileiho transformaci. (Při této transformaci zůstává čas stejný, tedy je „absolutní“ i v tom smyslu, že nezávisí na tom, zda a jak se pozorovatel 3 pohybuje vůči absolutnímu prostoru.)

Galileiovska invariance

- Inerciální vztažné soustavy vůči sobě **nejdou rozlišit**, tedy speciálně mezi nimi **nelze** najít systém, který je v klidu vůči absolutnímu prostoru. (Pak by musely být vůči absolutnímu prostoru v klidu všechny soustavy.)
-

Æther

- S úvahami o světle se však na scéně objevil éter (æther).
 - \Rightarrow Éter ... nosič světelných signálů.
 - \Rightarrow Fresnel ... světlo jako příčné vlnění éteru.
 - \Rightarrow **PROBLÉMY!** Éter musel mít velmi zvláštní vlastnosti
 - ☞ Představa světelného vlnění byla mechanistická (éterem se šířily vlny „elastického napětí“)
 - ☞ Naproti tomu éter musel vším prostupovat bez mechanické interakce (např. tření)
 - ☞ Byl považován za nehmotný

Klidová soustava éteru by každopádně měla být privilegovaná; bylo přirozené předpokládat, že je inerciální a že je dokonce v klidu vůči Newtonovu absolutnímu prostoru.

Maxwellovy rovnice a theorie

- Světlo je elektromagnetické vlnění šířící se konečnou rychlostí c
- Nejsou invariantní vůči Galileiově transformaci, dávají různé výsledky v různých inerciálních soustavách

Hledání ætheru, Michelson-Morleyho experiment

- Hledání klidové soustavy ætheru

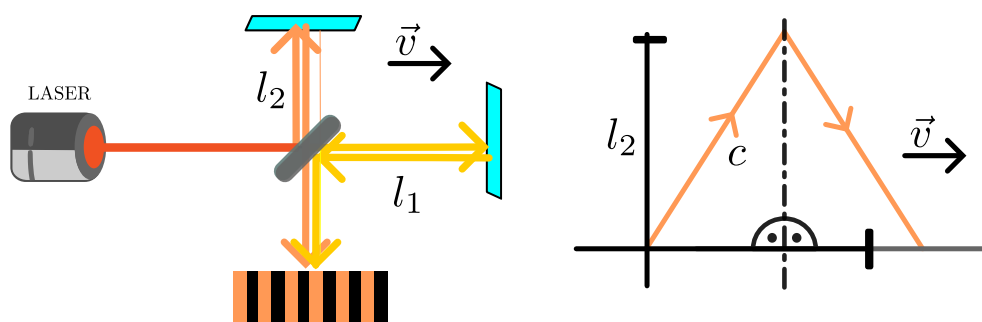
Šíří-li se světlo vůči éteru rychlostí c , pak jeho rychlost vůči laboratoři bude dána složením s rychlostí laboratoře. Klidovou soustavou éteru bude zřejmě ta, vůči níž se světlo šíří všemi směry stejně rychle.

- Princip Michelson-Morleyho experimentu

Monochromatický paprsek (např. laser) ze zdroje se rozdělí ve dva, ty se nechají v různých (nejlépe kolmých) směrech trochu cestovat a pak se zase svedou a nechají interferovat.

Obrazec, který vznikne, je dán rozdílem mezi dobami, za které paprsky urazily své dráhy. Nyní se „ramena interferometru“, podél nichž paprsky cestovaly, pootočí (avšak celé uspořádání se nijak nedeformuje — ramena zůstávají stejně dlouhá a navzájem kolmá).

V důsledku skládání rychlosti světla s rychlostí laboratoře (obě rychlosti vztahujeme k éteru) se tím obecně změní doby, za které paprsky projdou své dráhy, tedy změní se také interferenční obrazec. Ústředním prvkem experimentů tak bylo polopropustné zrcátko:



Předpokládejme pro jednoduchost uspořádání podle obrázku: laboratoř se vůči éteru pohybuje rychlostí \vec{v} v kladném směru ramena 1. Pro výsledek interference je podstatný rozdíl mezi dobami t_1 a t_2 , po které rozdělené paprsky cestují odděleně, tedy za které projdou v laboratoři vzdálenosti l_1 a l_2 . První z časů spočítáme v soustavě spojené s laboratoří. Tam se světlo pohybuje „doprava“ rychlostí $c - v$ a zpátky rychlostí $c + v$, takže celkově mu to trvá

$$t_1 = \frac{l_1}{c - v} + \frac{l_1}{c + v} = \frac{2cl_1}{c^2 - v^2} = \frac{2l_1}{c} \frac{1}{1 - \frac{v^2}{c^2}}.$$

Čas letu „kolmého“ paprsku se lépe počítá v soustavě éteru: z náčrtu jeho cesty (obr. vpravo) a Pythagorovy věty máme

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

Rozdíl dob příchodů je tedy

$$\Delta t \equiv t_2 - t_1 = \frac{2}{c} \left(\frac{l_2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - \frac{l_1}{1 - \frac{v^2}{c^2}} \right).$$

Nyní laboratoř otočíme o 90° . Paprsky si jednoduše vymění role, takže vzoreček prvního tvaru se teď bude týkat druhého paprsku a naopak. Rozdíl příchoďů je tedy tentokrát

$$\widetilde{\Delta t} \equiv \widetilde{t}_2 - \widetilde{t}_1 = \frac{2}{c} \left(\frac{l_2}{1 - \frac{v^2}{c^2}} - \frac{l_1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \right)$$

O změně interferenčního obrazce během otočení rozhoduje to, o kolik se změnil rozdíl příchoďů paprsků, tedy „rozdíl těch rozdílů“,

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

Při úpravě jsme využili toho, že očekávaná rychlost pohybu Země vůči éteru bude řádově zhruba rovna rychlosti jejího oběhu kolem Slunce, a ta je $30 \text{ km/s} = 10^{-4}c$, takže $v^2/c^2 \doteq 10^{-8}$; když členy ve velké závorce rozvedeme v této malé veličině do lineárního řádu, dostaneme

$$\frac{1}{1 - \frac{v^2}{c^2}} \doteq 1 + \frac{v^2}{c^2}, \quad \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \doteq \frac{1}{1 - \frac{v^2}{2c^2}} \doteq 1 + \frac{v^2}{2c^2}$$

Měli bychom ještě odhadnout, zda by posun daný výsledkem (1.3) vůbec byl prakticky pozorovatelný. Spočítejme, za jakých parametrů by se interferenční vzor při otočení experimentu posunul právě o jeden proužek. Posun o jeden proužek znamená vzájemný posun skládajících se vlnění o jednu vlnovou délku, tedy změnu časového rozdílu příchoďů paprsků o

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

Dosažením $\frac{v^2}{c^2} = 10^{-8}$ a $\lambda = 500 \text{ nm} = 50 \cdot 10^{-8} \text{ m}$ (zelené světlo) vychází podmínka na délku ramen: $l_1 + l_2 = 50 \text{ m}$. To ovšem není žádný problém, ramena mohou být zhruba takto dlouhá,

4.2 Výchozí principy teorie relativity, 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**.

ROVNOST FYSIKÁLNÍCH ZÁKONŮ V IS!

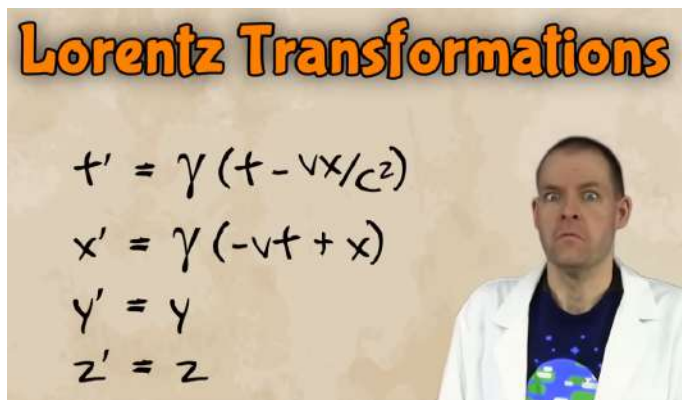
- **Princip invariance a konečné rychlosti světla** říká, že ve vakuu se světlo vůči všem IS pohybuje rovnoměrně přímočaře konečnou rychlostí c . Vyplývá z principu relativity, protože kdyby c nebyla ve všech IS stejná, nebyly by tyto systémy rovnocenné.

C

Lorentzova transformace

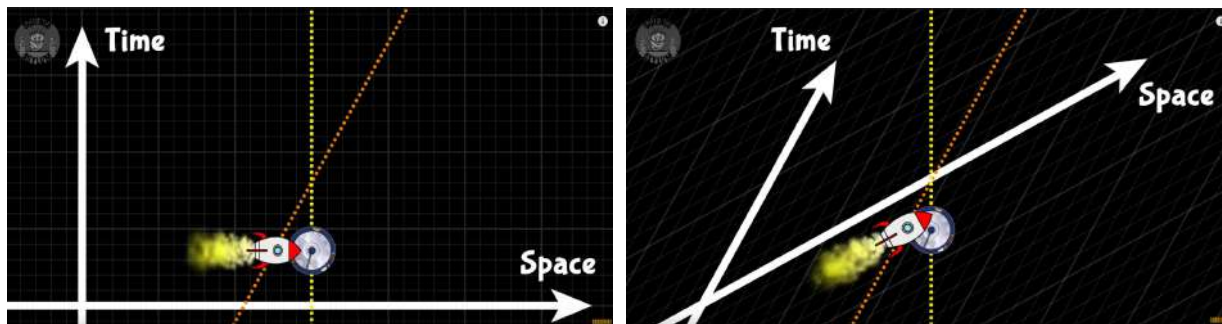
- je nutná vzhledem k požadované konečnosti c , Galileiho transformace by totiž bez problémů dávala nekonečné rychlosti.
- Speciální Lorentzova transformace:

Uvažujme shodně orientované IS (x, y, z) a $IS'(x_0, y_0, z_0)$, jejichž počátky jsou v čase $t = 0 = t_0$ totožné a IS' se vůči IS pohybuje rychlostí v v kladném směru osy x .



$$\begin{aligned} t' &= \gamma \left(t - v \frac{x}{c^2} \right) \\ x' &= \gamma (-vt + x) \\ y' &= y \\ z' &= z \end{aligned}$$

kde $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$... Lorentzův faktor
 $\gamma \in [1, \infty)$



Spacetime paths are invariant under coordinate transformations.

DŮSLEDKY LORENTZOVY TRANSFORMACE:

• Relativita 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

- 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 $\Delta t = 0$

• Kontrakce délek

Ideální tuhá tyč, v IS' je v klidu

$$l_0 \equiv \Delta x' = \gamma\Delta x \equiv \gamma l \quad (> l)$$

• Dilatace času

Ideální hodiny, v IS' jsou v klidu

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

• Skládání rychlostí

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

$$\begin{aligned} w'_x &= \frac{d[\gamma(x - vt)]}{d[\gamma(t - \frac{v}{c^2}x)]} = \frac{dx - v dt}{dt - \frac{v}{c^2} dx} = \frac{\frac{dx}{dt} - v}{1 - \frac{v}{c^2} \frac{dx}{dt}} = \frac{w_x - v}{1 - \frac{v}{c^2} w_x}, \\ w'_y &= \frac{dy}{d[\gamma(t - \frac{v}{c^2}x)]} = \frac{1}{\gamma} \frac{\frac{dy}{dt}}{1 - \frac{v}{c^2} \frac{dx}{dt}} = \frac{1}{\gamma} \frac{w_y}{1 - \frac{v}{c^2} w_x}, \\ w'_z &= \frac{dz}{d[\gamma(t - \frac{v}{c^2}x)]} = \frac{1}{\gamma} \frac{\frac{dz}{dt}}{1 - \frac{v}{c^2} \frac{dx}{dt}} = \frac{1}{\gamma} \frac{w_z}{1 - \frac{v}{c^2} w_x}, \end{aligned}$$

4.3 Minkowského prostoročas, světelný kužel.

Hyperbolická geometrie

Minkovského metrický tensor:

$$g_{\mu\nu} \stackrel{\text{kart.}}{=} \text{diag}(-1, 1, 1, 1) \equiv \eta_{\mu\nu}$$

Formalismus

- Časo-prostorové složky: 0,1,2,3
- Index nahoře vektor, dole kovektor.
- Einsteinova sumační konvence

Souřadnice

$$x^\mu \equiv (x^0, x^1, x^2, x^3), \quad \text{speciálně kartézské:} \quad x^\mu \equiv (ct, x, y, z)$$

Transformace souřadnic

Vektory a kovektory se ovšem poznají teprve podle toho, jak se transformují. Vektory, resp. kovektory mají čtyři složky, které se při přechodu mezi souřadnými soustavami $x^\nu \rightarrow x'^\mu (x^\nu)$ transformují stejně jako diferenciály souřadnic, resp. stejně jako gradient:

$$\begin{array}{l} dx'^\mu = \frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\nu} dx^\nu \quad \rightarrow \text{stejně všechny vektory : } V'^\mu(x') = \frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\nu} V^\nu(x), \\ \frac{\partial}{\partial x'^\alpha} = \frac{\partial x^\beta}{\partial x'^\alpha} \frac{\partial}{\partial x^\beta} \quad \rightarrow \text{stejně všechny kovektory : } C'_\alpha(x') = \frac{\partial x^\beta}{\partial x'^\alpha} C_\beta(x). \end{array}$$

Transformace obecného tensoru typu (r, s) ,

- s r indexy nahoře a s indexy dole (tj. tensor r -krát kontravariantní a s -krát kovariantní)
- veličina o 4^{r+s} složkách
- které se transformují přes r přímých a s inverzních Jacobiho matic,

$$T'^{\mu\dots}{}_{\alpha\dots}(x') = \frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\nu} \dots \frac{\partial x^\beta}{\partial x'^\alpha} \dots T^{\nu\dots}{}_{\beta\dots}(x).$$

Speciálním případem — „tenzorem bez indexů“ ($r = 0, s = 0$) — je **invariant**.
Veličina stejná ve \forall IS. $\Phi'(x') = \Phi(x)$

Operace na tensorech

- **kontrakce tenzorů** (kontrahovaný tenzor vzniká vysčítáním přes 2 indexy)
- **vnitřní (skalární) součin**, jehož invariance se ukáže jako

$$\eta_{\mu\nu} V'^\mu W'^\nu = \eta_{\mu\nu} \frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\rho} V^\rho \frac{\partial x'^\nu}{\partial x^\sigma} W^\sigma = \eta_{\mu\nu} \delta_\rho^\mu \delta_\sigma^\nu V^\rho W^\sigma$$

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:

$$\eta_{\alpha,\beta} T^{\dots\beta\dots} = T^{\dots\alpha\dots}$$

Speciální Lorentzova transformace

Při transformaci mezi IS budou samozřejmě čárkované a nečárkované souřadnice spojeny maticí Lorentzovy transformace $\Lambda^\mu{}_\nu$, 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

$$(x^0, x^1, x^2, x^3) \equiv (ct, x, y, z)$$

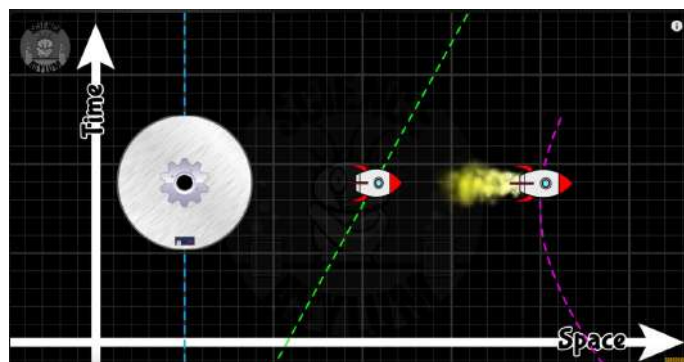
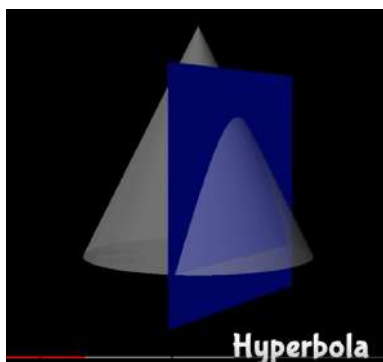
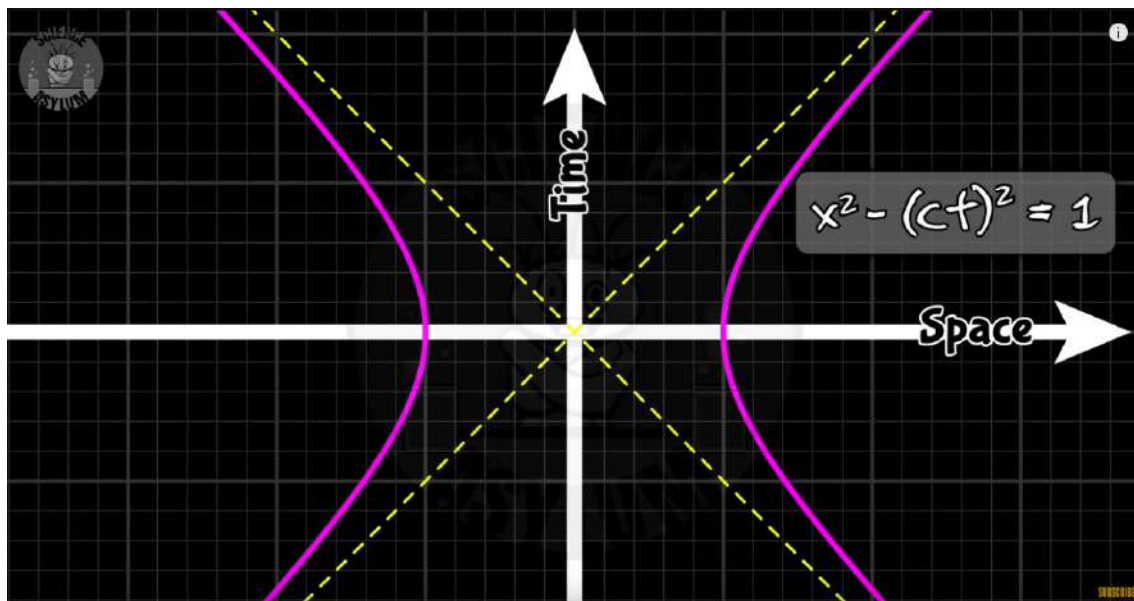
dostaneme srovnáním s předpisy speciální Lorentzovy transformace složky matice:

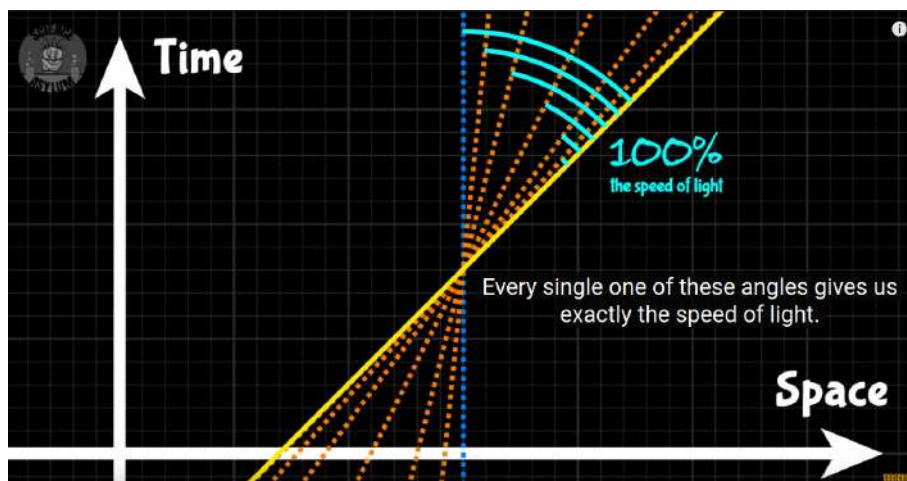
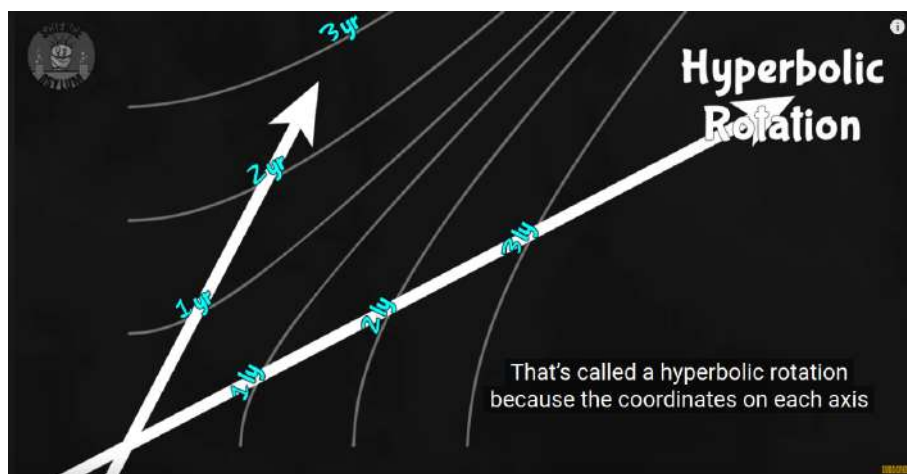
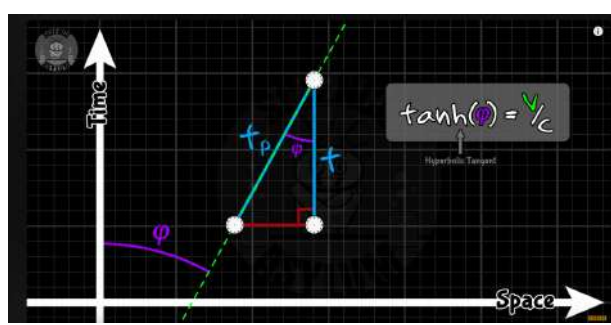
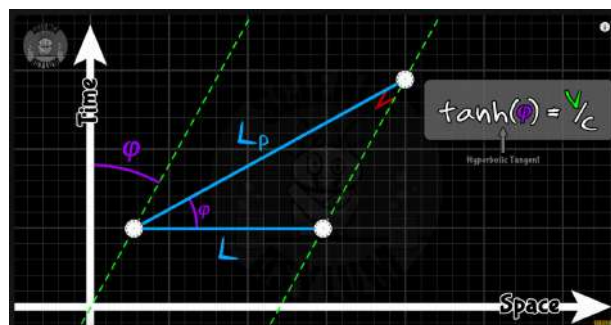
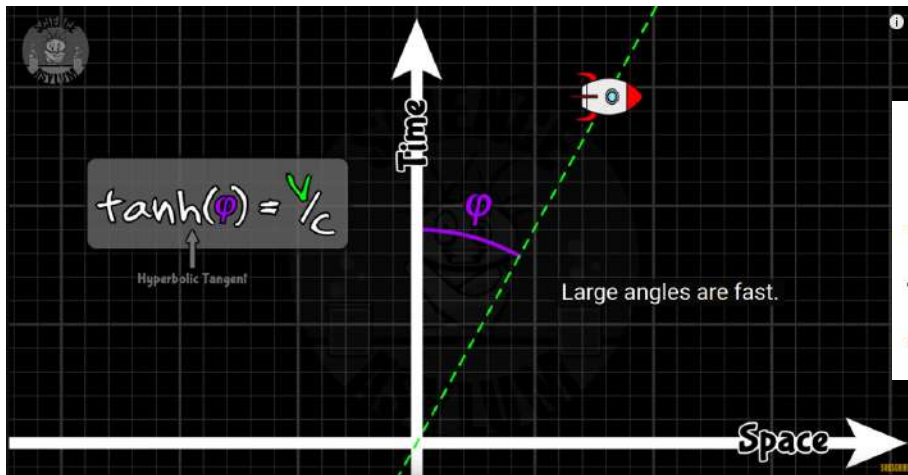
$$(\Lambda^\mu{}_\nu)_{\text{spec}} = \begin{pmatrix} \gamma & -\gamma \frac{v}{c} & 0 & 0 \\ -\gamma \frac{v}{c} & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Relace ortogonality jsou potom

$$\eta_{\mu\nu} \Lambda^\mu{}_\rho \Lambda^\nu{}_\sigma = \eta_{\rho\sigma}.$$

Světelný kužel a časoprostorové diagramy





4.4 Relativistická pohybová rovnice, ekvivalence hmotnosti a energie.

Rozpor v transformacích mezi IS v elektrodynamice a klasické mechanice \Rightarrow STR

Pojmy

- **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.

- **invariant klidové hmotnosti**

Poměr m/γ je tedy invariant a má význam klidové hmotnosti, neboť $\gamma = 1$ pro $v = 0$.

$$m = m_0 \gamma$$

- **4-hybnost** potom můžeme zavést

$$p^\mu \equiv m_0 u^\mu = m_0 \gamma(c, \vec{v}) = m(c, \vec{v}) = (mc, \vec{p})$$

Zobecnění Newtonova 2. zákona

$$F^\mu = \frac{dp^\mu}{d\tau} = \frac{dp^\mu}{dt} \frac{dt}{d\tau} = \gamma \frac{dp^\mu}{dt} = \gamma \frac{d(mc, \vec{p})}{dt} = \gamma \left(c \frac{dm}{dt}, \vec{f} \right)$$

kde \vec{f} je klasická síla.

Uvědomme si, že v „klasické“ hybnosti je zahrnuta hmotnost, která závisí na rychlosti!

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 $\vec{v} \cdot \vec{a} = 0$. Proved'me

- **4-rozměrná obdoba výkonu síly** $\delta_{ij} f^i v^j$ jako

$$\begin{aligned}\eta_{\mu\nu} F^{\mu\alpha} u^\nu &= \eta_{\mu\nu} \frac{dp^\mu}{d\tau} u^\nu = \eta_{\mu\nu} \frac{dm_0 u^\mu}{d\tau} u^\nu = \eta_{\mu\nu} \frac{dm_0}{d\tau} u^\mu u^\nu + \eta_{\mu\nu} m_0 \frac{du^\mu}{d\tau} u^\nu = \\ &= -c^2 \frac{dm_0}{d\tau} + \eta_{\mu\nu} m_0 a^\mu u^\nu = -c^2 \frac{dm_0}{d\tau}\end{aligned}$$

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-vektoru 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

$$c^2 dm = \frac{1}{\gamma} c^2 dm_0 + \vec{f} \cdot d\vec{r}$$

což je podobné jako 1. věta termodynamiky - členy nalevo mají roli dodané tepelné energie (která souvisí se změnou klidové hmotnosti) a vykonáním práce.

Pokud bude nyní působící síla \vec{f} jenom konat práci, bude změna kinetické energie

$$dT = \vec{f} \cdot d\vec{r} = dm c^2.$$

Kinetická energie se mění s rychlostí, integrujme tedy „přes rychlost“.

$$T - T_{in} = \int_{T_{in}}^T dT = \int_{v_{in}}^v dm c^2 = m c^2 - m_{in} c^2.$$

Při urychlování z klidu hraje m_{in} roli klidové hmotnosti a $T_{in} = 0$. A hle!

$$m c^2 = m_0 c^2 + T \Rightarrow E = E_0 + T$$

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).

4.5 Maxwellovy rovnice ve čtyřrozměrném formalismu.

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).

Pojmy

- čtyřrozměrná hustota proudu (čtyřproud)

$$J^\mu \equiv (\rho c, \vec{J}) = \rho(c, \vec{v}) = \frac{\rho}{\gamma} \gamma(c, \vec{v}) = \frac{\rho}{\gamma} u^\mu = \rho_0 u^\mu$$

- hustota 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 **prostorčasová 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.

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 rozšířovaného 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) Maxwellovy rovnice se zdroji:

$$F^{\alpha\beta}{}_{,\beta} = \mu J^\alpha$$

kde μ je permeabilita vakua.

2) Maxwellovy rovnice bez zdrojů:

V 2. serii, kde zdroje nevystupují, chceme použít opět první derivaci $F^{\alpha\beta}$ a na to nám zbývá gradient.

Ověříme

$$0 = F_{[12,3]cykl} = F_{12,3} + F_{31,2} + F_{23,1} = \epsilon_{12i}B^i{}_{,3} + \epsilon_{31i}B^i{}_{,2} + \epsilon_{23i}B^i{}_{,1} = B^3{}_{,3} + B^2{}_{,2} + B^1{}_{,1} = \text{div } \vec{B}$$

pro získání poslední Maxwellovy rovnice napíšeme nejprve

$$0 = F_{[0j,k]cykl} = F_{0j,k} + F_{k0,j} + F_{jk,0} = -\frac{1}{c}E_{j,k} + \frac{1}{c}E_{k,j} + \frac{1}{c}\epsilon_{jkl}B^l{}_{,t},$$

vynásobíme $c\epsilon^{ijk}$ a použijeme $-\epsilon^{ijk}E_{j,k} = \epsilon^{ikj}E_{j,k} = \epsilon^{ijk}E_{k,j}$ spolu s $\epsilon^{ijk}\epsilon_{jkl} = 2\delta_l^i$:

$$0 = \epsilon^{ijk}(E_{k,j} - E_{j,k}) + \epsilon^{ijk}\epsilon_{jkl}B^l{}_{,t} = 2\epsilon^{ijk}E_{k,j} + 2B^i{}_{,t} \Rightarrow \text{rot } \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

- Divergencí první sady snadno dostaneme **rovnici kontinuity**

$$J^\mu{}_{,\mu} = J^0{}_{,0} + J^i{}_{,i} = 0 \Leftrightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \vec{J} = 0$$

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 přičtemeli gradient skalární funkce. Často se volí Lorenzova kalibrační podmínka

$$A^\beta{}_{,\beta} = A^0{}_{,0} + A^i{}_{,i} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \frac{1}{c^2} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{A} = 0.$$

Pokud má transformovaný potenciál splňovat Lorenzovu podmínku ($\tilde{A}^\beta{}_{,\beta} = 0$), dosazením vypadne

$$\chi^\beta{}_{,\chi} = \square \chi = -A^\beta{}_{,\beta}.$$

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

$$\boxed{A^{\beta,\alpha}{}_{,\beta} - A^{\alpha,\beta}{}_{,\beta} = \mu J^\alpha}$$

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

$$\boxed{\square A^\alpha = -\mu J^\alpha}$$

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.

5 Termodynamika a statistická fyzika

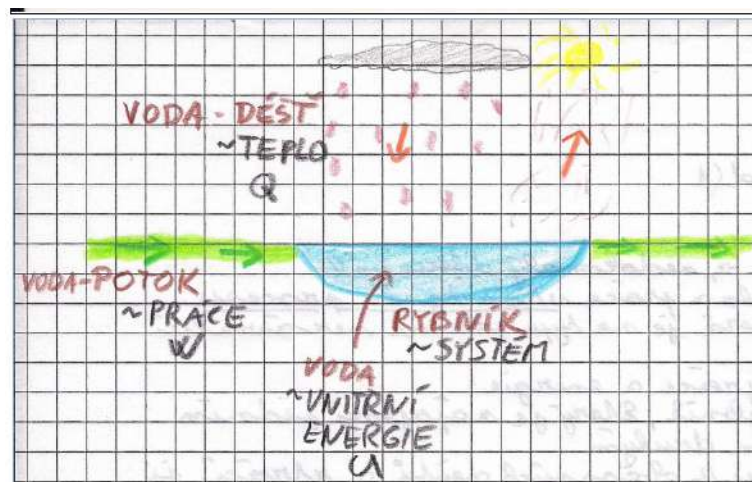
5.1 Teplo, teplota, tepelná kapacita, tlak.

Teplo

- Forma přenosu energie mezi systémem a okolím. Jedná se o energii neuspořádaného pohybu všech částic systému. Nelze jej bezprostředně měřit.
- Dějová veličina Q , nemá totální diferenciál, závisí tedy na integrační cestě
- Společně s vykonanou prací se podílí na přírůstku vnitřní energie ΔU

$$\Delta U = U_B - U_A = Q(A \rightarrow B, \Gamma) - W(A \rightarrow B, \Gamma)$$

- Odpar a dešť v analogii s rybníkem



Teplota

- Intenzivní stavová veličina T

Tlak

- Intenzivní stavová veličina P

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 .

Tepelná kapacita

Teplo potřebné k zvýšení teploty systému o jeden stupeň Kelvina za stálého objemu	$C_V = T \left(\frac{dS}{dT} \right)_V$	Tepelná kapacita při konstantním objemu
Teplo potřebné k zvýšení teploty systému o jeden stupeň Kelvina za stálého tlaku	$C_P = T \left(\frac{dS}{dT} \right)_P$	Tepelná kapacita při konstantním tlaku

V prvním sloupci je heslovitý popis experimentu. V druhém sloupci je definice **modifikovaných termodynamických koeficientů**, které kvantitativně popisují příslušné experimenty z prvního sloupce. Ve třetím sloupci je název veličin definovaných v druhém sloupci.

5.2 Vnitřní energie, termodynamické potenciály.

Termodynamické potenciály

U	...	vnitřní energie
F	...	volná energie
G	...	Gibbsův potenciál
H	...	entalpie
μ	...	chemický potenciál

Mistrovská funkce a její formulace

$U(S, V)$...	U -formulace, přirozené proměnné S, V
$F(T, V)$...	F -formulace, přirozené proměnné T, V
$G(T, p)$...	G -formulace, přirozené proměnné T, p
$H(S, p)$...	H -formulace, přirozené proměnné S, p

Mistrovská funkce

Existuje právě jedna stavová funkce umožňující odvození všech ostatních. Touto privilegovanou (charakteristickou) funkcí je funkce $U(S, V)$. Jinak řečeno, znalost funkcionální závislosti vnitřní energie na proměnných S a V pro daný termodynamický systém představuje úplnou termodynamickou informaci pro tento systém.

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.
- ADIABATICKÝ POTENCIÁL
- Jejimi přirozenými proměnnými jsou S, V .

Helmholtzova volná energie

- energie potřebná k vytvoření systému, který bude ve stálém kontaktu s tepelným reservoárem, dodávajícím mu teplo TS

$$F = U - TS$$

- Shora ohraničuje práci konanou při **isotermickém ději**. Jejimi přirozenými proměnnými jsou T, V .

Enthalpie

- energie potřebná k vytvoření systému a místa pro tento systém v prostředí o stálém tlaku P

$$H = U + PV$$

- Jejimi přirozenými proměnnými jsou S, P

Gibbsova volná energie

- kombinace dvou výše uvedených. Vytváříme systém ve stálém kontaktu s tepelným reservoárem a vymezujeme mu místo v prostředí o konstantním tlaku.

$$G = U - TS + PV$$

- Přirozenými proměnnými jsou tedy T, P .

Vztahy thermodynamických potenciálů

a) vnitřní energie $U(S, V, N)$

- základní formulace
- diferenciál

$$dU = T dS - p dV$$

$$dU = \left(\frac{\partial U}{\partial S}\right)_V dS + \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_S dV$$

- 1. derivace (mezikrok)

$$\left(\frac{\partial U}{\partial S}\right)_V = T; \quad \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_S = -p$$

- Ze záměnnosti 2. parciální derivací

$$\frac{\partial^2 U}{\partial S \partial V} = \frac{\partial^2 U}{\partial V \partial S}$$

- \Rightarrow Maxwellův vztah $\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S = -\left(\frac{\partial p}{\partial S}\right)_V$

b) volná energie $F(T, V, N)$

- nahrazeno $S \rightarrow T$
- vztah s vnitřní energií $F = U - TS$
- diferenciál

$$dF = \underbrace{dU}_{T dS - p dV} - S dT - T dS$$

$$dF = -S dT - p dV$$

- 1. derivace (mezikrok)

$$\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V = -S; \quad \left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T = -p$$

- Ze záměnnosti 2. parciální derivací

$$\frac{\partial^2 F}{\partial T \partial V} = \frac{\partial^2 F}{\partial V \partial T}$$

- \Rightarrow Maxwellův vztah $-\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T = -\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V$

c) entalpie $H(S, p, N)$

- nahrazeno $V \rightarrow p$
- vztah s vnitřní energií $H = U + Vp$
- diferenciál

$$dH = \underbrace{dU}_{T dS - p dV} + p dV + V dp$$

$$dH = T dS + V dp$$

- 1. derivace (mezikrok)

$$\left(\frac{\partial H}{\partial S}\right)_p = T; \quad \left(\frac{\partial H}{\partial p}\right)_S = V$$

- Ze záměnnosti 2. parciální derivací

$$\frac{\partial^2 H}{\partial S \partial p} = \frac{\partial^2 H}{\partial p \partial S}$$

- \Rightarrow Maxwellův vztah $\left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_S = \left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_p$

d) Gibbsův potenciál $G(T, p, N)$

- nahrazeno $S \rightarrow T; V \rightarrow p$
- vztah s vnitřní energií $G = U - ST + Vp$
- diferenciál

$$dG = \underbrace{dU}_{T dS - p dV} - S dT - T dS + p dV + V dp$$

$$dG = -S dT + V dp$$

- 1. derivace (mezikrok)

$$\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_p = -S; \quad \left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_T = V$$

- Ze záměnnosti 2. parciální derivací

$$\frac{\partial^2 G}{\partial T \partial p} = \frac{\partial^2 G}{\partial p \partial T}$$

- \Rightarrow Maxwellův vztah $-\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T = \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p$

5.3 Hlavní zákony termodynamiky, entropie.

Thermodynamické zákony

0. termodynamický zákon (zákon termodynamické teploty)

(Jsou-li dvě a více těles v termodynamické rovnováze s dalším tělesem, jsou všechna tato tělesa v rovnováze.)

1. termodynamický zákon (zákon zachování energie)

$$dU = \delta Q + \delta W$$

- **přírůstek vnitřní energie mezi body A a B:**

$$\Delta U = U_B - U_A = Q_\gamma + W_\gamma \quad \dots \quad \text{kde } Q \text{ i } W \text{ počítáme přes křivku } \gamma$$

Poznámka: Teplu Q ani práci W nemají totalní diferenciál, proto pro jejich diferenciály využíváme symbolu δ .

2. termodynamický zákon (zákon neklesání entropie)

$$\delta Q = \left(\frac{\partial U}{\partial S} \right)_V dS = T dS$$

$$\delta W = \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_S dV = -p dV$$

3. termodynamický zákon (zákon absolutní nuly)

$$\lim_{T \rightarrow 0} S = 0$$

Entropie

- neklesající **extenzivní stavová veličina**, která při vratném ději splňuje

$$dS = \frac{\delta Q}{T},$$

- Z mikroskopického hlediska je provázána s multiplicitou makrostavu Ω skrze známou **Boltzmannovu definici**

$$S(U, V, N) = k_b \ln(\Omega(U, V, N))$$

- Princip maximalisace entropie pak odpovídá hledání stavu s nejvyšší multiplicitou. System je v rovnováze, pokud se nachází v nejpravděpodobnějším uspořádání.
- $\Delta S = S_B - S_A$

Clausiova rovnost a nerovnost

$$S_B - S_A = \int_A^B \frac{\delta Q}{T_R} \quad \dots \text{rovnovážně}$$

||

$$S_B - S_A > \int_A^B \frac{\delta Q}{T_R} \quad \dots \text{nerovnovážně}$$

5.4 Ideální plyn, stavová rovnice, Carnotův cyklus.

Ideální plyn

Definice ideálního plynu:

- Ideální plyn je dokonale stlačitelný a postrádá vnitřní tření (dokonale tekutý)
- Rozměry částic ideálního plynu jsou zanedbatelné oproti vzdálenostem mezi nimi
- Všechny srážky částic v ideálním plynu jsou dokonale pružné

Thermická rovnice (ideální plyn)

$$p(T, V, N) = \frac{Nk_B T}{V}$$

$pV = Nk_B T \dots$ (reformulace)

Kalorická rovnice (ideální plyn)

$$U(T, V, N) = \frac{3}{2} Nk_B T$$

Stavové veličiny

U	...	vnitřní energie
S	...	entropie
V	...	objem
T	...	teplota
p	...	tlak

Stavová rovnice

Ve stavu **termodynamické rovnováhy** jsou pouze 2 stavové veličiny nezávislé

Stavová rovnice je potom jakákoliv funkce typu $A = A(B, C)$, kde B a C jsou zvolené stavové proměnné a A je některá ze tří zbývajících stavových veličin

Znalost explicitního tvaru těchto třiceti funkcí dvou proměnných pro daný termodynamický systém představuje **úplnou termodynamickou informaci** o tomto systému

Stavovové diagramy

Rovnovážný proces (děj)

- Je idealizací děje, u něhož je porušení rovnováhy ve všech intermediálních stavech „malé“. Prochází množinou stavů TR, v libovolném intermediálním stavu tedy platí stavové rovnice. Lze jej reprezentovat spojitou čarou v prostoru stavů TR. Čára je určena stavovými rovnicemi a dodatečnými podmínkami na děj.

Stavové rovnice umožňují zobrazit daný rovnovážný proces v libovolném **z deseti diagramů**

Top 3 nejčastější diagramy:

- **P-V diagram** - pracovní diagram, plocha pod křivkou odpovídá práci
- **T-S diagram** - tepelný diagram, plocha pod křivkou odpovídá teple
- **P-T diagram** - využívá se pro zkoumání fázových přechodů

Procesy

- **isotermický** ... probíhající v tepelném rezervoáru o teplotě T_R
- **adiabatický** ... probíhající bez tepelné výměny s okolím (termoska) $\delta Q = 0$
- **isobarický** ... probíhající při stálém tlaku (cihla na pístu)
- **isochorický** ... probíhající při stálém objemu (zavařený píst), nekoná se práce $\delta W = 0$

Carnotův cyklus

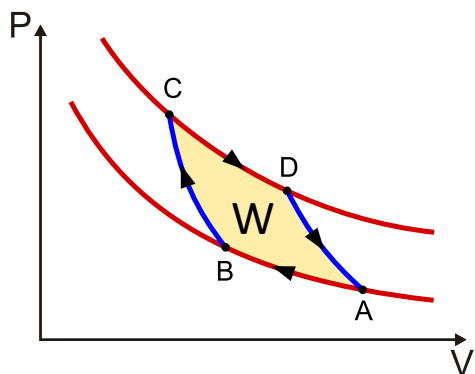
„Kdekoliv a kdykoliv existuje rozdíl teplot, lze jej využít ke konání práce.“ (Sadi Carnot)

Carnotův cyklus se skládá:

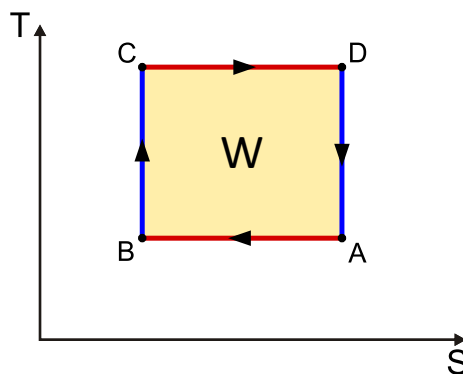
- ze 2 rovnovážných **isotermických** vratných procesů
- a ze 2 rovnovážných **adiabatických** (isentropických) vratných procesů.

Cyklus	Stlačení A → B	Zahřívání B → C	Expanse C → D	Ochlazení D → A
👑 Carnotův 👑	isotermicky	adiabaticky	isotermicky	adiabaticky

P-V diagram:



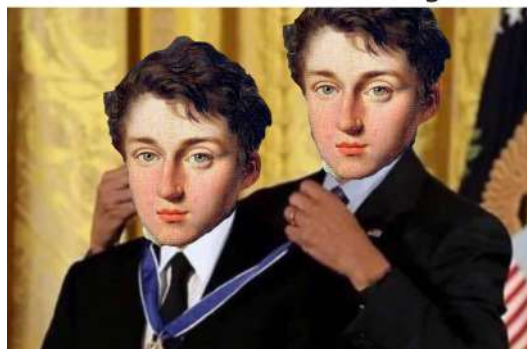
T-S diagram:



Carnot: No heat engine can be more efficient than a Carnot Engine

Tepelný stroj

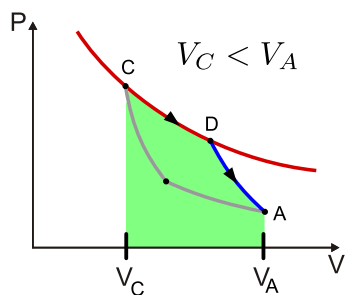
Zařízení převádějící teplo na práci (či naopak). Pracovní látka je přitom periodicky zahřívána a ochlazována kontaktem se dvěma tepelnými rezervoáry o různých teplotách.



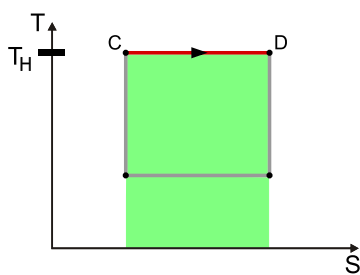
Poznámka: Nezahrnuje žádné tření ani tepelnou výměnu s okolím, pouze s rezervoáry

Účinnost tepelného stroje:

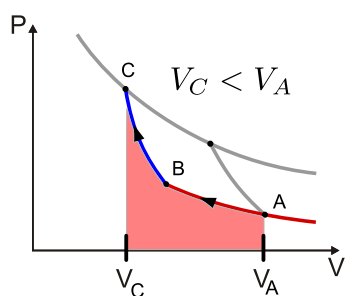
$$\eta = \frac{W}{Q_{in}} = \frac{Q_{in} - Q_{out}}{Q_{in}} = 1 - \frac{Q_{out}}{Q_{in}}$$



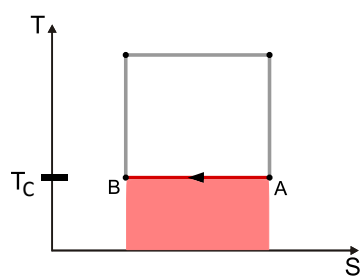
$W_{\Gamma(C \rightarrow A)}$
práce vykonaná
strojem na okolí



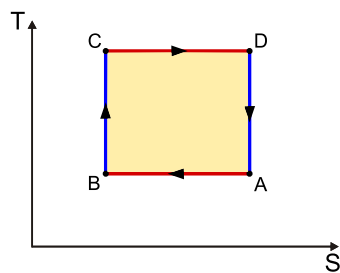
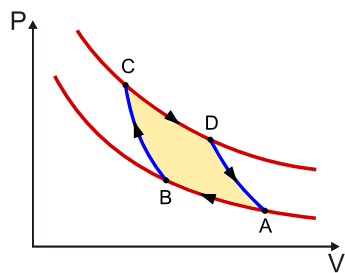
$Q_{\Gamma(C \rightarrow D)}$
dodané teplo
(Q_{in})



$W_{\Gamma(A \rightarrow C)}$
práce, jež jsme
vykonali na stroji



$Q_{\Gamma(A \rightarrow B)}$
odevzdané teplo
(Q_{out})



Celková práce:
 $W = |W_{\Gamma(C \rightarrow A)}| - |W_{\Gamma(A \rightarrow C)}|$
 $W = \int_{\Gamma} \delta W = \int_{\Gamma} -p dV$



Celková práce:
 $W = |Q_{in}| - |Q_{out}|$
 $W = |Q_{\Gamma(C \rightarrow D)}| - |Q_{\Gamma(A \rightarrow B)}|$

Oba diagramy vyobrazují stejné plochy, dá se mezi nimi přejít Legendreovou transformací, jejíž Jakobián je roven jedné. Representují ty samé fyzikální procesy jen z pohledu různých stavových rovnic.

Poznámka: Pro adiabatické děje $\delta Q = 0$ a též platí z 2. věty thermodynamiky $\delta Q = T dS$ a protože $T > 0 \Rightarrow dS = 0$

Účinnost Carnotova cyklu závisí pouze na teplotách reservoárů T_C a T_H

5.5 Fázový prostor, rozdělovací funkce, Liouvilleova rovnice.

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.)

Fázový prostor

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" význam množiny všech povolených mikrostavů.

Liouvilleova rovnice

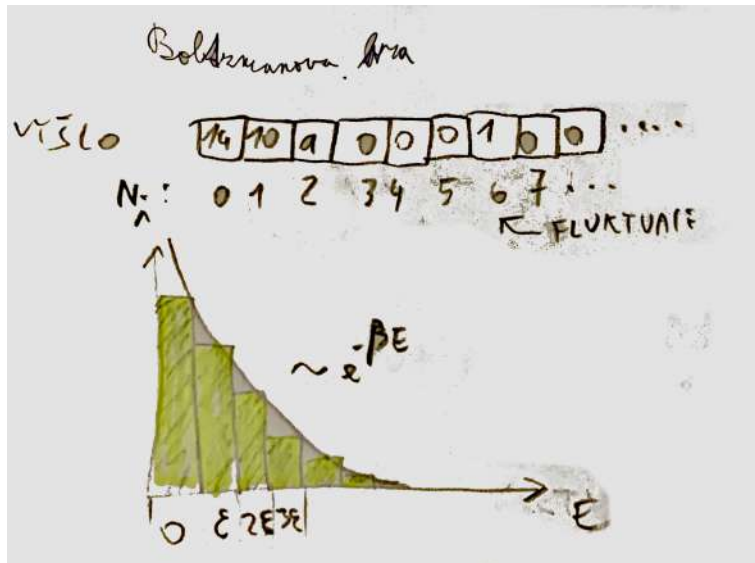
Všechny povolené mikrostavy systému částic lze znázornit jako množinu bodů ve fázovém prostoru. Počet bodů připadající na jednotkový objem fázového prostoru popisujeme **rozdělovací funkcí** $\rho(p, q, t)$. Liouvilleova věta říká, že „fázová kapalina“ je nestlačitelná a rozdělovací funkce zůstává konstantní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

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

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].

5.6 Maxwelllovo-Boltzmannovo rozdělení.

Boltzmanovo rozdělení



Mějme N neinteragujících rozlišitelných částic:

E_i ... Energie i -té energetické hladiny

$N_i = N \cdot \frac{\exp(-\beta E_i)}{Z}$... počet částic na i -té energetické hladině

E_0 ... Energie základního stavu

$N_0 = N \frac{\exp(-\beta E_0)}{Z}$... počet částic na základní energetické hladině

$$\text{Boltzmanův faktor: } \exp(-\beta(E_i - E_0)) = \frac{N_i}{N_0}$$

$$\text{Boltzmanovo rozdělení: } \frac{N_i}{g_i} \approx \exp(-\beta(E_i - \mu))$$

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

$$p_i = \frac{N_i}{N} = \frac{g_i e^{-\frac{\varepsilon_i}{k_B T}}}{Z(T)}$$

kde $Z(T) = \sum_i g_i e^{-\frac{\varepsilon_i}{k_B T}}$

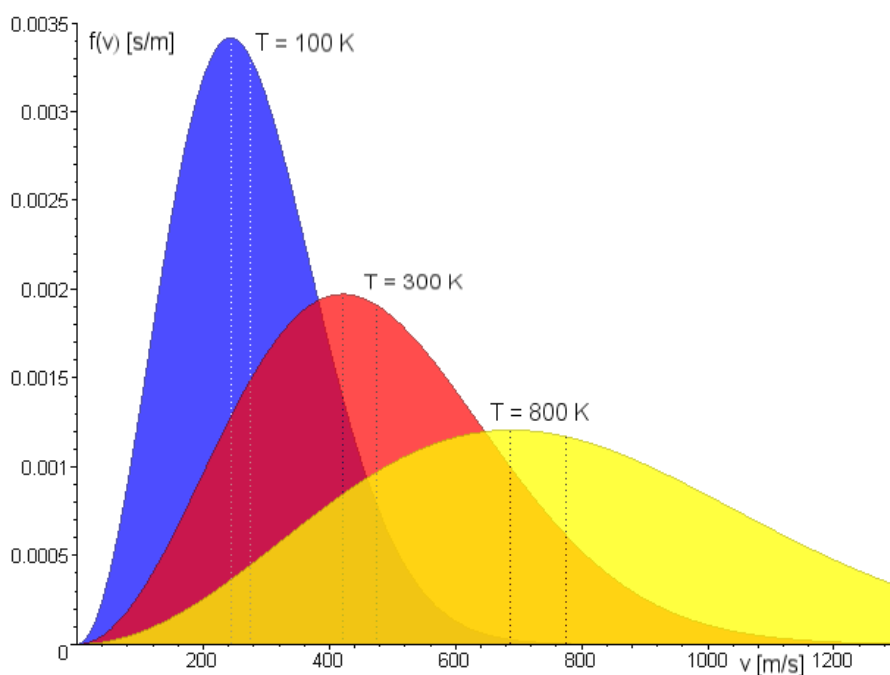
Zde g_i značí degeneraci stavu, N_i je počet částic na požadované energetické hladině a $Z(T)$ nazýváme stavovou sumou.

Maxwell-Boltzmannovo rozdělení

- Rozdělení rychlostí v atomů nebo molekul plynu, jejichž jedinou přijatelnou interakcí jsou pružné srážky. Vycházení z rozdělení Boltzmannova

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

- popisuje ve statistické fyzice systémy složené z klasických rozlišitelných částic, tedy systémy, u kterých není nutno uvažovat kvantování fázového prostoru a spinovou závislost statistiky. Maxwellovo-Boltzmannovým rozdělením se řídí například molekuly.
- Rozdělení je nazváno podle fyziků J. C. Maxwella a L. Boltzmann, kteří zavedli statistický popis plynů jako systémů mnoha molekul a vypočetli rozdělení jejich rychlostí a energií.



Rozdělovací funkce $f_{MB}(E)$ určuje střední počet částic ve stavu s energií E :

$$f_{MB}(E) = \frac{1}{\exp[(E - \mu)/(k_B T)]}$$

kde: E je energie k_B je Boltzmannova konstanta T je termodynamická teplota μ je chemický potenciál

Maxwellovo-Boltzmannovo rozdělení platí pro energie $E - \mu \gg k_B T$, kde se neprojevují kvantové efekty. Pro nízké energie je potřeba použít Boseho-Einsteinovo rozdělení pro bosony a Fermiho-Diracovo rozdělení pro fermiony.

5.7 Základní statistická rozdělení, statistická entropie.

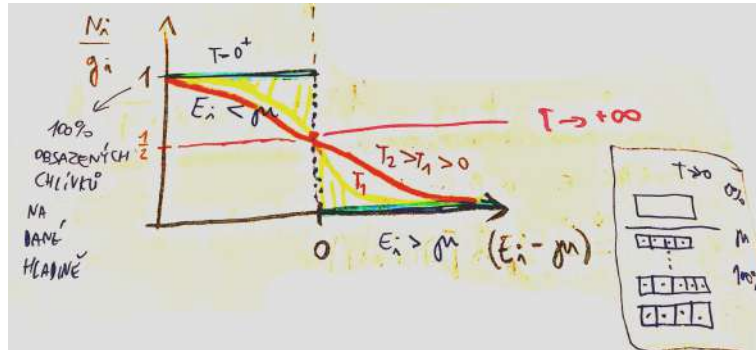
Fermi-Diracovo rozdělení

$$N_i^{FD}(T, \mu) = \frac{g_i}{\exp(\beta(E_i - \mu)) + 1}$$

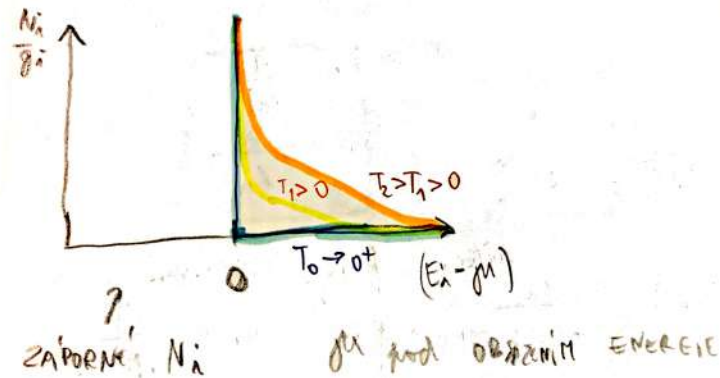
Bose-Einsteinovo rozdělení

$$N_i^{BE}(T, \mu) = \frac{g_i}{\exp(\beta(E_i - \mu)) - 1}$$

Fermi-Diracovo rozdělení



Bose-Einsteinovo rozdělení



pravdep. obradenia hladiny s energ. E_i :

$$n_i = \frac{g_i}{e^{\frac{E_i - \mu}{k_B T}} \mp 1}$$

- Bose-Einstein
- + Fermi-Dirac
- x Maxwell-Boltzmann

Metoda mikrokanonického souboru

Mikrokanonický soubor: adiabaticky izolovaný systém s konstantním U, V, N ;

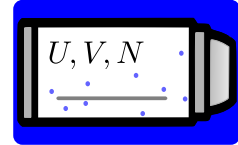
Příklad: termoska

Cíl Odvodit mistrovskou funkci ve tvaru $S(U, V, N)$

Postup:

1) Určím **mikrostavy** a jejich energie

Kvantové určení \Rightarrow Schrödingerova rovnice: $\hat{H}^{(N)}\psi_n = E_n\psi_n$



2) Vypočítám multiplicitu $\Omega(U, V, N)$

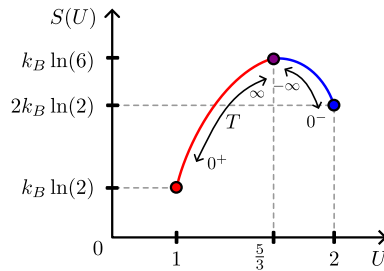
\rightarrow přechodem k thermodynamické limitě: $\left. \begin{matrix} N \rightarrow \infty \\ V \rightarrow \infty \end{matrix} \right\} \frac{N}{V} = \text{konst.}$

Poznámka: Multiplicita $\Omega(U, V, N)$ = počet mikrostavů realisujících makrostav se zadaným U, V, N

Poznámka 2: Boltzmanův vztah: $S(U, V, N) = k_B \cdot \ln(\Omega(U, V, N))$

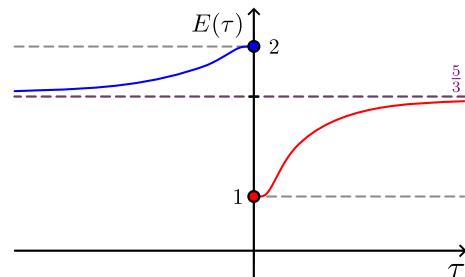
3) Výpočet stavových rovnic: $\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial U}\right)_{V, N}$; $\frac{p}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_{U, N}$; ...

Graf $S(U)$



Systém zdegenerovaný,
více stěn o dané energii \Rightarrow
 $\Omega > 1 \Rightarrow S > 0$

Graf $E(\tau)$



Entropie se maximalisuje! Pozor: S ... aditivní, zatímco Ω ... multiplikativní.

$$\Rightarrow S = k_B \ln(\Omega); \quad \Omega = \frac{N!}{N_1!(N - N_1)!} = \frac{(\text{Celkový počet stavů})!}{(\text{Počet v 1. stavu})!(\text{Počet ve 2. stavu})!}$$

Tato definice umožňuje odvodit mistrovskou funkci v S -representaci.

$$\Omega = \omega^N$$

Kanonický formalismus

Motivace: Mikrokanonický formalismus jest jednoduchý, ale hodně idealisovaný
 \hookrightarrow 3-hladinový systém už nelze takto spočítat

Rozšíření: Zrušíme limitaci daného množství energie (zrušíme adiabatickou izolaci)
 \hookrightarrow Systém dáme do kontaktu s teplotním reservoírem o teplotě T

Zavedení: Systém definujeme makrostavem s parametry T, V, N

- NEPLATÍ, že má každý stav stejnou pravděpodobnost
 - \hookrightarrow distribuci pravděpodobností se snažíme spočítat
 - \hookrightarrow předpoklad: systém + reservoir jsou uzavřený systém
 - \Rightarrow tam platí stejná pravděpodobnost obsazení různých stavů

Pravděpodobnost, že se systém nachází v konkrétním stavu j :
$$P_j = \frac{\Omega_{\text{res}}(E_{\text{tot}} - E_j)}{\Omega_{\text{tot}}(E_{\text{tot}})}$$

kde: $\Omega_{\text{res}}(E_{\text{tot}} - E_j)$... počet stavů ponechaných reservoírem, $\Omega_{\text{tot}}(E_{\text{tot}})$... celkový počet stavů, E_j ... energie zkoumaného stavu j , E_{tot} ... celková energie pro systém + reservoir, Ω_{tot} ... celkový počet stavů s uvedenou energií

\rightarrow Ω si vyjádříme jako entropii $S = k_B \ln \Omega \Rightarrow$ Vyjde
$$P_j = e^{\beta F} e^{-\beta E_j}$$

kde: $\beta = \frac{1}{k_B T}$... „inversní termální energie“ (rozměr: $[J]$), F ... volná energie

$e^{\beta F}$ nezávisí na konkrétním stavu \rightarrow normalizační faktor

$$Z = \sum_j e^{-\beta E_j} = e^{\beta F} \quad \dots \quad \text{stavová suma} \quad \Rightarrow \quad P_j = \frac{e^{-\beta E_j}}{Z}$$

Střední energie systému:

$$U = \sum_j E_j P_j = -\frac{d}{d\beta} \ln Z \quad \sim \quad dF = -p dV - S dT \quad \rightarrow \quad S = -\frac{\partial F}{\partial T}$$

\hookrightarrow toto ale není mistrovská funkce

Pokud každý z \bar{N} atomů značených indexem i obsadí nějakou energetickou hladinu j

$$\left. \begin{aligned} Z &= z_1 \cdot z_2 \cdot z_3 \dots \\ z_i &= \sum_j e^{-\beta \varepsilon_{ij}} \\ -\beta F &= \ln Z = \ln z_1 + \ln z_2 + \dots \end{aligned} \right\} \text{ platí pro jakýkoliv systém, kde energie jednotlivých částic se sčítá} \\ \text{a každá částice může obsadit jakýkoliv orbitální stav,} \\ \text{nezávisle na orbitálním stavu ostatních}$$

kde ε_{ij} energie i -tého atomu na hladině j

Metoda kanonického souboru

Kanonický soubor: uzavřený systém s konst. V, N v kontaktu s reservoírem o teplotě T

Příklad: uzavřená láhev na dně mořském

Cíl: Odvodit mistrovskou funkci ve tvaru $F(T, V, N)$

Postup:

1) Fixujeme T, V, N (zadáním makrostavu)

2) Platí

$$F(T, V, N) = -k_B T \ln(Z(T, V, N))$$

3) Sestavíme stavovou sumu

$$Z(T, V, N) = \sum_{\text{makrostav}} \exp\left(-\frac{E_{\text{makrostav}}}{k_B T}\right) = \sum_{\text{makrostav}} \exp(-\beta E_{\text{makrostav}})$$

4) Zavedeme značení i -tý makrostav = i , $\beta \stackrel{\text{def.}}{=} \frac{1}{k_B T}$

5) Pravděpodobnost, že se systém nalézá v makrostavu i :

$$P_i(T, V, N) = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z}$$

6) Vnitřní energie $U(T, V, N) = \langle E \rangle$ střední hodnota energie

$$U(T, V, N) = \langle E \rangle = \sum_i E_i P_i(T, V, N) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln[Z(T, V, N)] \quad \dots \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

7) Entropie

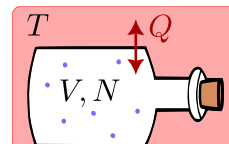
Informační entropie

$$S = -k_B \sum_i P_i(T, V, N) \ln[P_i(T, V, N)] = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V, N}$$

Poznámka: E je náhodná proměnná (hodnota energie · pravděpodobnost), reservoir energie fixuje pouze její střední hodnotu $\langle E \rangle$

Boltzmanovo rozdělení = rozdělení pro identické, neinteragující částice v TD rovnováze

Metoda Lagrangeových multiplikátorů slouží k nalezení vázaných extrémů funkce, tedy jejích minim nebo maxim při platnosti omezujících podmínek.

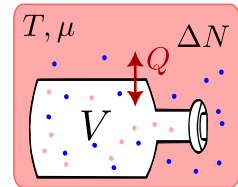


Metoda grandkanonického souboru

Grandkanonický soubor: systém s konstantním V , v kontaktu s reservoírem o teplotě T , dochází k výměně částic

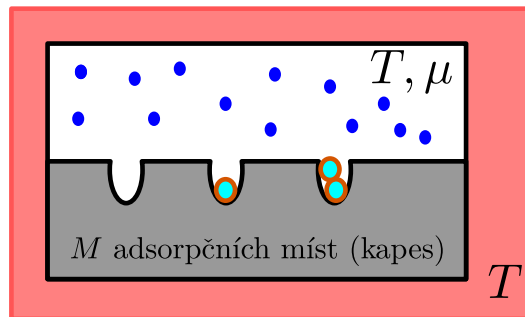
Příklad: děravá láhev na dně mořském

Cíl: Odvodit grandkanonický potenciál ve tvaru $\psi(T, V, \mu)$



MIKROkanonický sou.	Laplaceova trans. Ω	Kanonický sou.	Laplaceova trans. Z	GRANDkanonický sou.
	\longrightarrow		\longrightarrow	

Příklad na adsorpci



6 Elektrostatika, stacionární elektrické a magnetické pole

6.1 Elektrostatické pole ve vakuu (Gaussův a Coulombův zákon, elektrostatický potenciál).

- Definice elektrické intensity, elektrická síla:

$$\vec{F} = q\vec{E}(\vec{x})$$

q ... testovací náboj

- Vztah potenciálu a elektrické intensity:

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\Phi$$

- Coulombův zákon ve vakuu:

$$\vec{E}(\vec{x}) = \frac{\vec{F}}{q} = \frac{q'}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{x} - \vec{x}'}{|\vec{x} - \vec{x}'|^3}$$

q ... testovací náboj, q' ... reálný náboj

6.2 Elektrostatické pole v přítomnosti vodičů a v dielektrikách (polarizace, multipólový rozvoj, susceptibilita a permitivita).



6.3 Stacionární elektrické pole a elektrický proud.

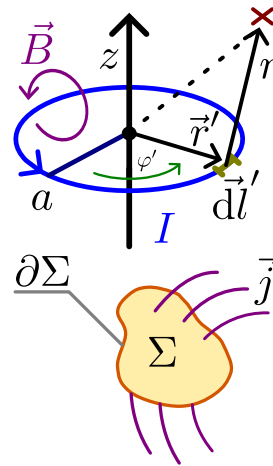
6.4 Stacionární magnetické pole (Biotův-Savartův a Ampérův zákon).

- Biot-Savartův zákon

$$\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{\overbrace{d\vec{J}}^{\equiv d\vec{J}'} \times (\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3}$$

- Ampérův zákon

$$\oint_{\partial\Sigma} \vec{B} \cdot d\vec{l} = \mu_0 \underbrace{\int_{\Sigma} \vec{j} \cdot d\vec{S}}_{I_{\Sigma}}$$



6.5 Magnetické pole v látkovém prostředí (magnetizace, typy magnetických látek, susceptibilita a permeabilita).

7 Elektrodynamika

7.1 Elektromagnetická indukce.



7.2 Kvazistacionární elektrické a magnetické pole.



7.3 Elektrické obvody (stacionární, střídavé, neustálený stav, metody řešení lineárních obvodů, Kirchhoffova pravidla).

7.4 Maxwellovy rovnice.

Úplný tvar Maxwellových rovnic:

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} - \partial_t \vec{D} = \vec{j}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} + \partial_t \vec{B} = \vec{0}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$$

Častější značení:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\partial_t \vec{B}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 (\vec{j} + \varepsilon_0 \partial_t \vec{E})$$

7.5 Elektromagnetické potenciály a jejich vlastnosti.

Polní rovnice pro elektromagnetické potenciály:

$$\left(-\Delta \vec{A} + \frac{1}{c^2} \partial_{tt} \vec{A} \right) + \vec{\nabla} \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{A} + \frac{1}{c^2} \partial_t \Phi \right) = \mu \vec{j}$$

$$\Delta \Phi + \partial_t \vec{\nabla} \cdot \vec{A} = -\frac{1}{\varepsilon} \rho$$

Kalibrační volnost (nemění elektrické ani magnetické pole):

$$\begin{aligned} \vec{a}' &= \vec{A} + \vec{\nabla} \chi \\ \Phi' &= \Phi - \partial_t \chi \end{aligned}$$

Coulombova kalibrace ($\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$)

$$\begin{aligned} \square \vec{A} &= -\mu \vec{j} + \frac{1}{c^2} \partial_t \vec{\nabla} \Phi \\ \Delta \Phi &= -\frac{1}{\varepsilon} \rho \end{aligned}$$

Lorenzova kalibrace ($\vec{\nabla} \cdot \vec{A} + \frac{1}{c^2} \partial_t \Phi = 0$), (Lorentzovsky invariantní :)

$$\begin{aligned} \square \vec{A} &= -\mu \vec{j} \\ \Delta \Phi &= -\frac{1}{\varepsilon} \rho \end{aligned}$$

7.6 Zákony zachování v teorii elektromagnetického pole.

ZZN

- Rovnice kontinuity pro elektrický náboj, souvislost s Lorenzovou kalibrací.

můžeme postupovat dvěma směry v odvozování:

$$\left. \begin{array}{l} \square \vec{A} = -\mu_0 \vec{j} \\ \square \Phi = -\frac{1}{\varepsilon_0} \rho \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{j} + \partial_t \rho = 0 \end{array} \right\} \Rightarrow \vec{\nabla} \cdot \vec{A} + \frac{1}{c^2} \partial_t \Phi = 0$$

$$\left. \begin{array}{l} \vec{\nabla} \cdot \vec{A} + \frac{1}{c^2} \partial_t \Phi = 0 \\ \square \vec{A} = -\mu_0 \vec{j} \\ \square \Phi = -\frac{1}{\varepsilon_0} \rho \end{array} \right\} \Rightarrow \vec{\nabla} \cdot \vec{j} + \partial_t \rho = 0$$

Souvisí s tím, jestli vycházíme ze zákona zachování náboje (1. případ), nebo jestli jej vyvodíme jako důsledek kalibrace (2. případ)

ZZE

- Rovnice elektrodynamiky musejí splňovat termodynamické postuláty (energie nevzniká/nezaniká).

Výkon mechanických sil = výkon potřebný ke změně el. a mag. polí + výkon odcházející povrchem

⇒ vyjádřeno matematicky

$$\int_{\Omega} -\vec{j} \cdot \vec{E} \, dV = \int_{\Omega} (\vec{E} \cdot \partial_t \vec{D} + \vec{H} \cdot \partial_t \vec{B}) \, dV + \oint_{\partial\Omega} (\vec{E} \times \vec{H}) \cdot d\vec{S}$$

8 Elektromagnetické vlny

8.1 Vlnová rovnice, rovinná elektromagnetická vlna.

$$\square = \Delta - \frac{1}{c^2} \partial_{tt} \quad \dots \text{ d'Alembertův operátor}$$

- **Homogenní vlnová rovnice**

$$\left(\Delta - \frac{1}{c^2} \partial_{tt} \right) u(\vec{x}, t) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \square u(\vec{x}, t) = 0$$

- **Nehomogenní vlnová rovnice** \rightarrow Lorentzova kalibrace ve vakuu 4 Maxwellky \rightarrow 2 Maxwellky:

$$\begin{cases} \left(\Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \Phi(r, t) = -\frac{\rho(r, t)}{\epsilon_0} \\ \left(\Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \vec{A}(r, t) = -\mu_0 \vec{j}(r, t) \end{cases}$$

- **Rovinná vlna** jest určena následujícími potenciály:

$$\begin{cases} \vec{A}(\vec{r}, t) = \vec{a}(\vec{n} \cdot \vec{r} - ct) \\ \Phi(\vec{r}, t) = 0 \end{cases}$$

Automaticky splňují vlnovou rovnici pro jednotkový vlnový vektor ($|\vec{n}| = 1$):

$$\Delta \vec{A} - \frac{1}{c^2} \partial_{tt} \vec{A} = |\vec{n}|^2 \vec{a}'' - \frac{(-c)^2}{c^2} \vec{a}'' = 0$$

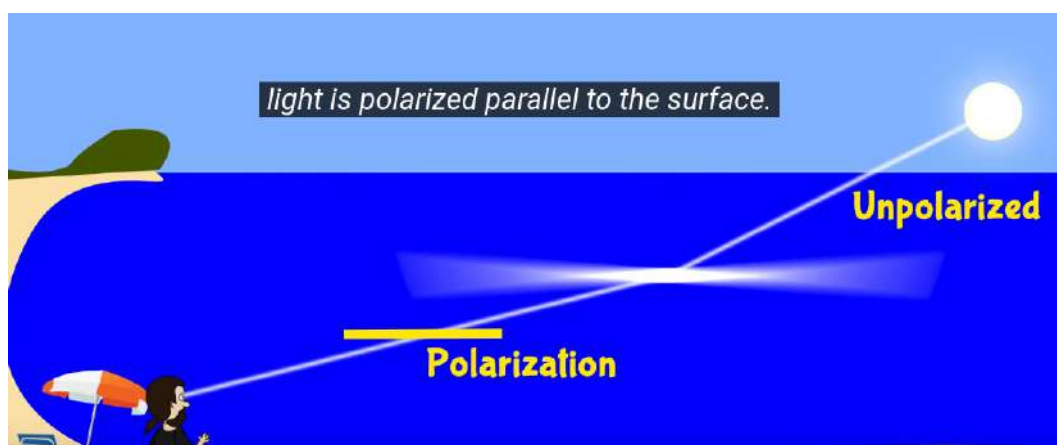
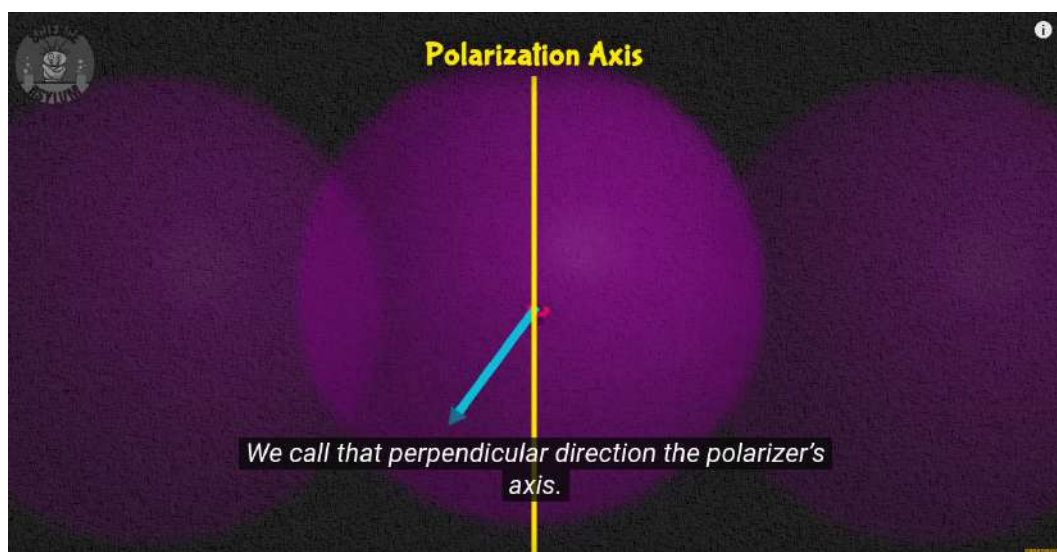
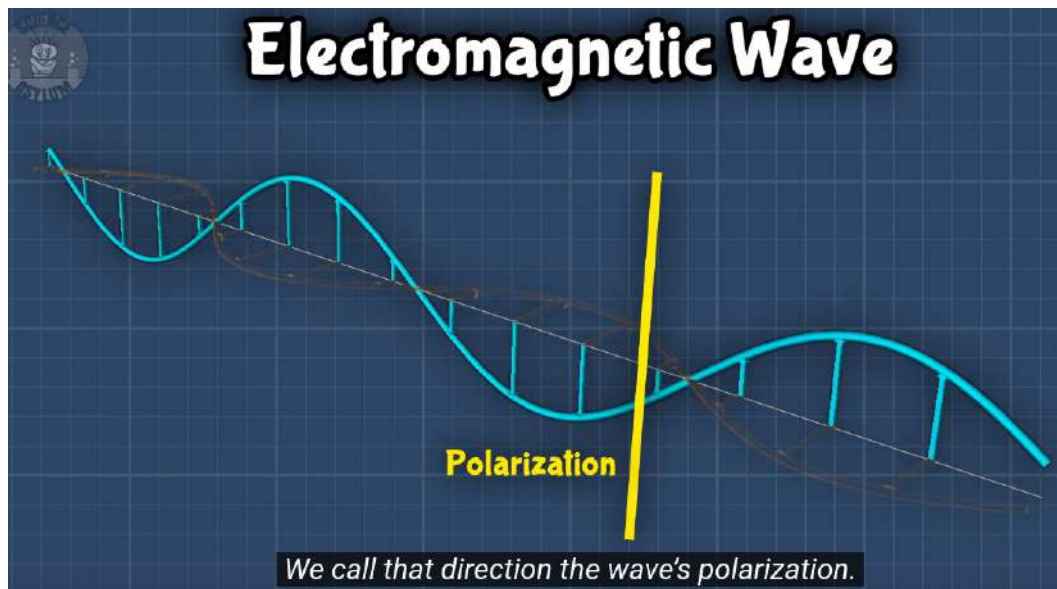
8.2 Polarizační vlastnosti elektromagnetické vlny.

Směr vektoru \vec{E} charakterisuje **polarisaci** vlny!

⇒ neměnný směr \vec{E} ⇒ lineární polarisace

⇒ harmonický průběh \vec{E} ⇒ kruhová či eliptická polarisace

Pravidlo 1/2



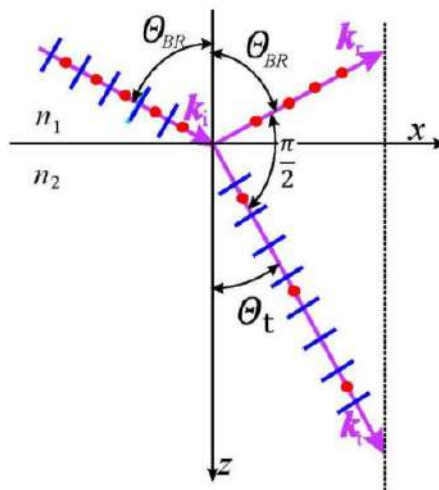
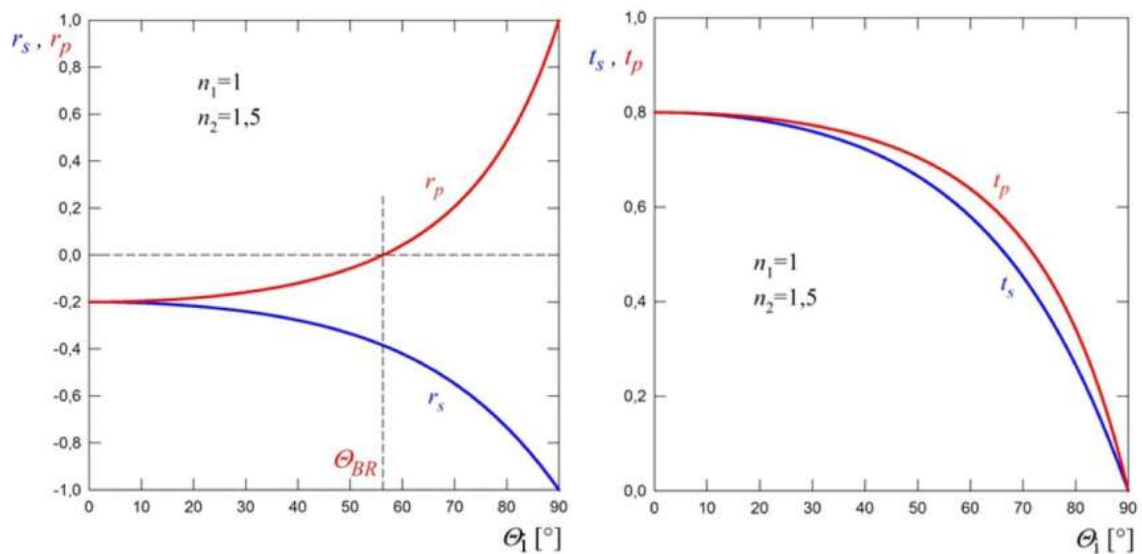
8.3 Šíření elektromagnetické vlny v látkovém prostředí (konstanta šíření, útlum, komplexní index lomu, disperze).



8.4 Odraz a lom elektromagnetických vln na rozhraní dvou prostředí (Fresnelovy vzorce).

3.2.3 Odraz a lom na opticky hustším prostředí ($n_1 < n_2$)

Závislosti amplitudových koeficientů odrazu a transmise na úhlu dopadu pro případ odrazu a lomu na opticky hustším prostředí $n_1 < n_2$ jsou zobrazeny pro obě polarizace na obr. 3.7. V případě odrazu na opticky hustším prostředí ze zákona lomu (3.13) plyne, že pro $\theta_i > \theta_t$, dochází k lomu ke kolmici v rovině rozhraní. Úhly dopadu, odrazu a lomu uvažujeme z intervalu $(0, \frac{\pi}{2})$, kdy je funkce sinus rostoucí a funkce kosinus klesající. Proto platí, že $\cos \theta_i < \cos \theta_t$, tedy i $n_1 \cos \theta_i < n_2 \cos \theta_t$. Čitatel vztahu (3.21) je pro všechny úhly dopadu záporný, jmenovatel je vždy kladný. Proto je $r_s < 0$ v celém rozsahu úhlů dopadu θ_i .



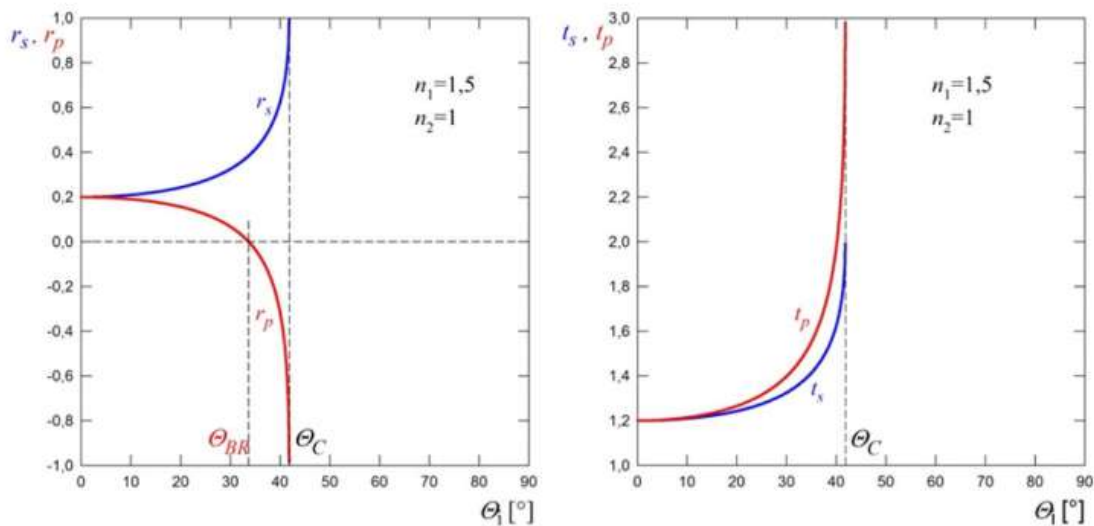
Obr. 3.8 Odraz a lom při dopadu pod Brewsterovým úhlem. Odražená vlna je lineárně polarizovaná kolmo k rovině dopadu.

3.2.4 Odraz a lom na opticky řidším prostředí ($n_1 > n_2$)

V případě odrazu na opticky řidším prostředí ze zákona lomu (3.13) plyne, že $\theta_i < \theta_t$ a dochází k lomu od kolmice k rovině rozhraní. Se zvětšujícím se úhlem dopadu nastane situace, kdy úhel lomu dosáhne 90° . Úhel dopadu pro tento případ θ_C nazýváme kritický nebo mezní. Ze zákona lomu plyne

$$n_1 \sin \theta_C = n_2 \sin \frac{\pi}{2} = n_2, \quad \sin \theta_C = \frac{n_2}{n_1}. \quad (3.31)$$

Průběhy amplitudových Fresnelových koeficientů odrazu a lomu pro $\theta_i < \theta_C$ jsou zobrazeny na obr. 3.9. V případě odrazu na opticky řidším prostředí nabývají Fresnelovy koeficienty reálných hodnot pouze pro úhly dopadu menší než kritický úhel θ_C . Pro $\theta_i \geq \theta_C$ nastává totální odraz spojený s obecným fázovým posuvem mezi dopadající a odraženou vlnou popsatelný komplexními amplitudovými koeficienty odrazu, jejichž absolutní hodnoty jsou $|\tilde{r}_s| = |\tilde{r}_p| = 1$.



Obr. 3.9 Závislosti amplitudových Fresnelových koeficientů odrazu a transmise na úhlu dopadu pro případ rozhraní sklo (index lomu $n_i = n_1 = 1.5$) a vzduch (index lomu $n_t = n_2 = 1$)

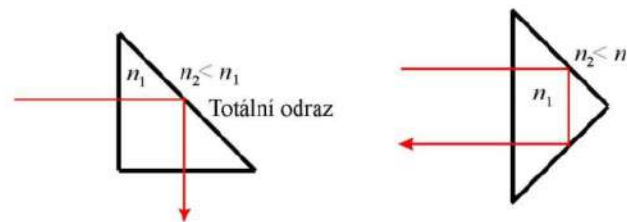
8.5 Elektromagnetické vlny ve vlnovodech.

Totální odraz

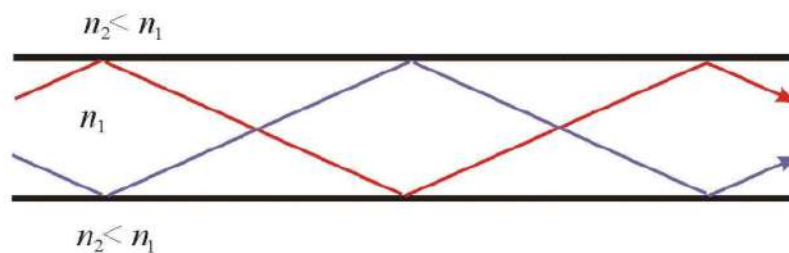
Je-li úhel dopadu z opticky hustšího (dále prostředí 1) do opticky řidšího prostředí (dále prostředí 2) větší než kritický úhel ($\Theta_i > \Theta_C$), dochází k úplnému odrazu světla od rozhraní. Název úplný (totální) odraz vystihuje skutečnost, že výkon nesený odraženou vlnou je ve stacionárním případě roven výkonu nesenému dopadající vlnou.

Odražená vlna má některé zajímavé vlastnosti, které jsou i prakticky využívány:

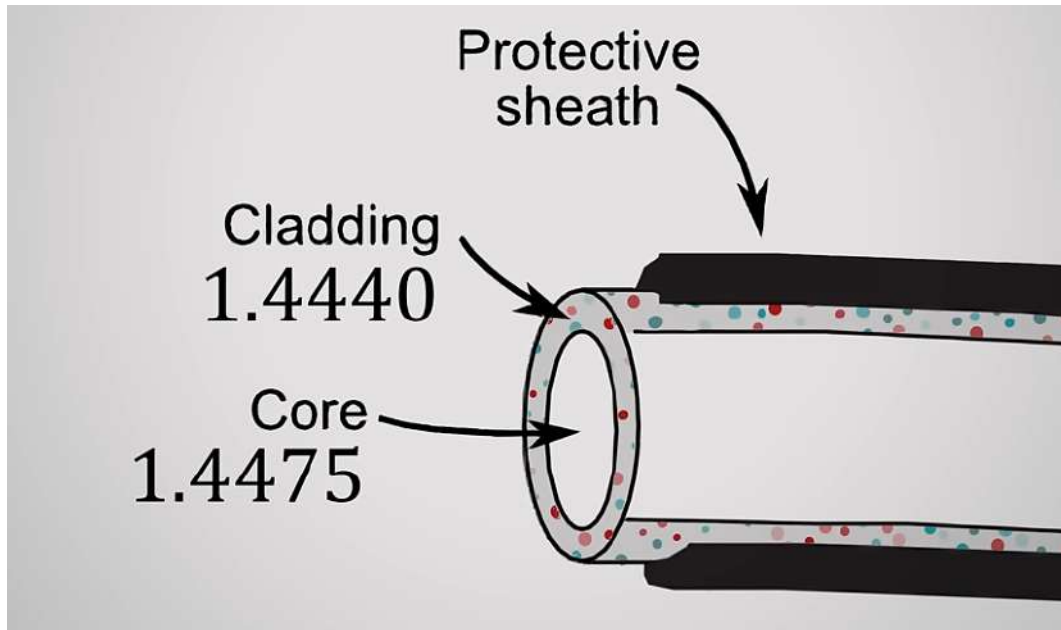
- využití jako zrcátok; oproti kovovým zrcadlovým plochám má větší odrazivost a je odolnější vůči působení vnějšího prostředí;
- totální odraz od stěn je základním principem světlovodů, které hrají v dnešní technické praxi obrovskou úlohu;
- měření kritického úhlu Θ_C je základem několika prakticky užívaných typů refraktometrů - přístrojů na měření indexu lomu;
- totálně odražená vlna získává při odrazu fázový posuv, který závisí na polarizaci, úhlu dopadu a indexech lomu. Právě rozdíl fázového posuvu mezi vlnami polarizace s a polarizace p lze využít ke změně polarizačního stavu dopadající vlny, např. z dopadající lineárně polarizované vlny lze odrazem získat vlnu polarizovanou elipticky, při dvojnásobném odrazu i vlnu polarizovanou kruhově (prvek zvaný Fresnelův hranol).



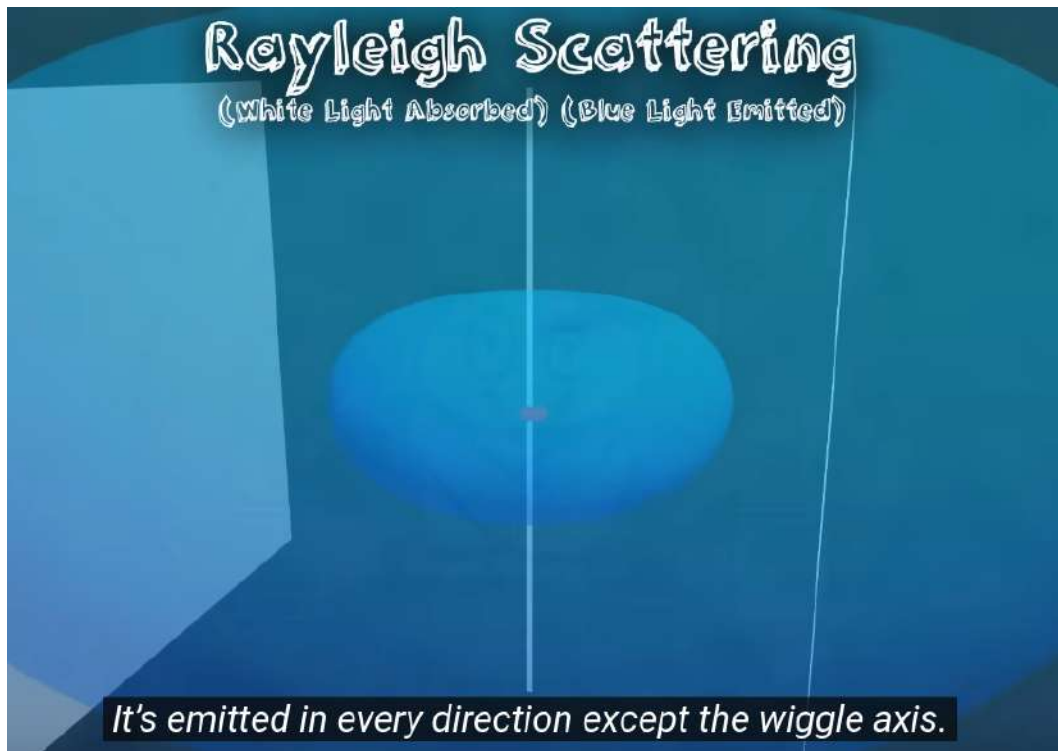
Obr. 3.10 Pravoúhlý hranol fungující jako zrcátko



Obr. 3.11 Paprskový model vlnovodu



8.6 Dipólové elektromagnetické záření.



9 Optika

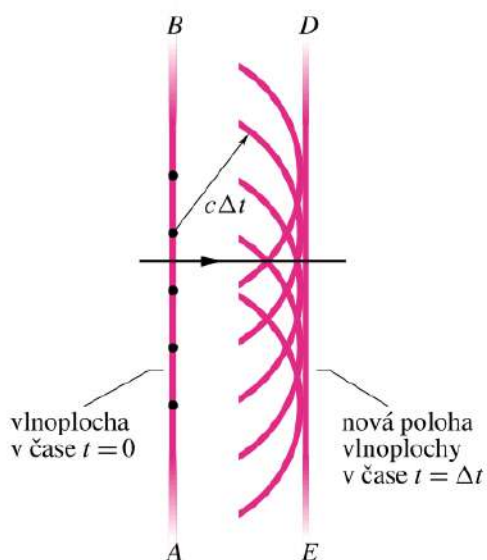
9.1 Interference světla, optické interferometry.

Interference světla

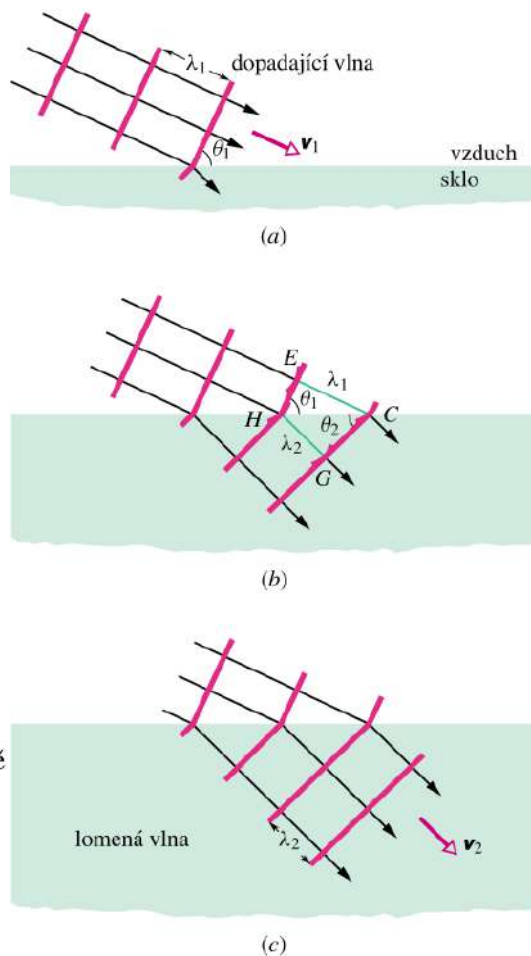
Pojmy

- Huyghensův princip šíření světla:

Všechny body na vlnoploše slouží jako bodové zdroje sekundárních kulových vlnoploch. Po nějakém čase Δt bude novou polohou vlnoplochy tečná plocha k těmto sekundárním vlnoplochám.



Obr. 36.1 Konstrukce šíření rovinné vlny ve vakuu na základě Huygensova principu.



- Index lomu:

$$n = \frac{c}{v}$$

⇒ Fázový rozdíl mezi dvěma světelnými vlnami se může změnit, jestliže se vlny šíří různými látkami, které mají různé indexy lomu.

- Snellův zákon lomu:

$$\frac{\sin \alpha}{\sin \beta} = \frac{v_1}{v_2} \Leftrightarrow m_1 \sin \alpha = m_2 \sin \beta$$

Interference = skládání 2 vln stejné frekvence f , fázové rychlosti v (a směru)

⇒ nejpřesvědčivější důkaz, že světlo je vlnění.

$$\left. \begin{aligned} y_1 &= r_1 \sin \left[\omega \left(t - \frac{x_1}{v} \right) \right] \\ y_2 &= r_2 \sin \left[\omega \left(t - \frac{x_2}{v} \right) \right] \end{aligned} \right\} \Rightarrow y = y_1 + y_2 = \mathbf{R} \sin \left[\omega \left(t - \frac{\mathbf{x}}{v} \right) \right]$$

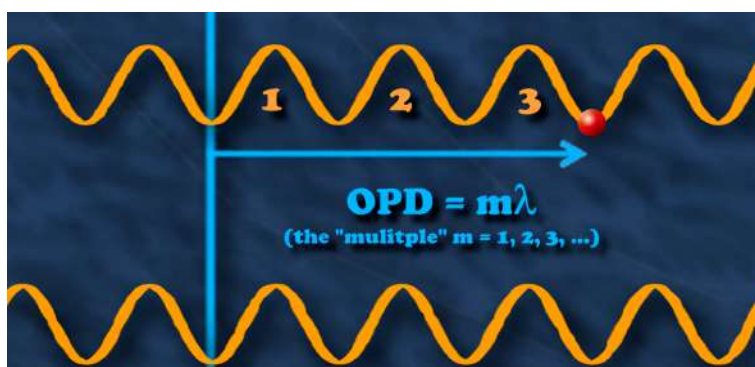
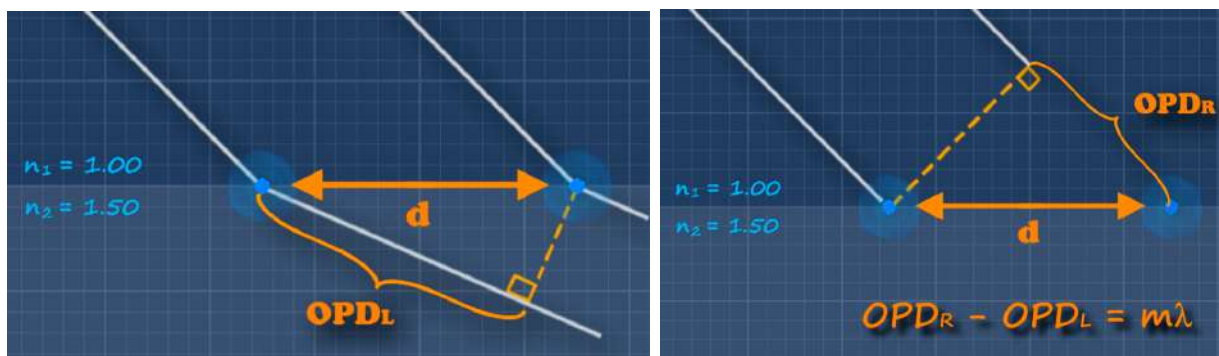
kde $\mathbf{R} = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 + 2r_1r_2 \cos \left(\frac{2\pi d}{\lambda} \right)}$
 ... amplituda výsledného vlnění
 $d = |x_2 - x_1|$... dráhový rozdíl
 $\mathbf{x} = \frac{x_1 + x_2}{2}$... aritmetický průměr

Vlnová rovnice:

$$y = y(x, t) = r \sin \left[\omega \left(t - \frac{x}{v} \right) \right] = r \sin \left[2\pi \left(\frac{t}{T} - \frac{x}{\lambda} \right) \right]$$

kde x ... vzdálenost od zdroje vlnění

⇒ Jestliže se dvě vlny šíří dráhami o různých délkách, jejich fázový rozdíl se může změnit.



Interference v Youngově dvojštěrbinovém experimentu

Dráhový rozdíl:

$$\Delta L = d \sin \theta \quad (\text{dráhový rozdíl})$$

Konstruktivní interference:

Pro světlý proužek musí být ΔL nula nebo celočíselný násobek vlnové délky.

$$\Delta L = d \sin \theta = (\text{celé číslo}) (\lambda)$$

neboli

$$d \sin \theta = m\lambda, \quad \text{kde } m = 0, 1, 2, \dots$$

(maxima - světlé proužky).

Destruktivní interference:

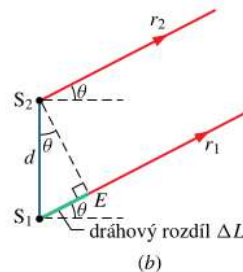
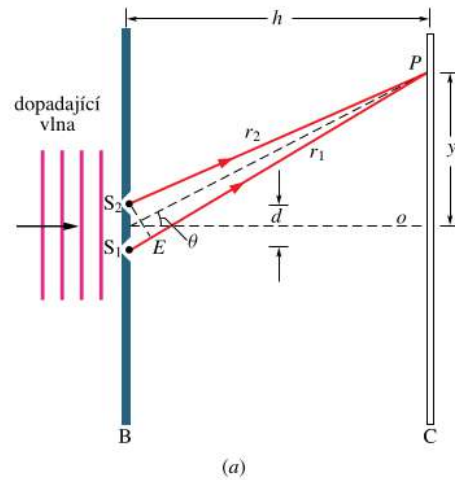
Pro tmavé proužky musí být ΔL lichým násobkem poloviny vlnové délky.

$$\Delta L = d \sin \theta = (\text{liché číslo}) \left(\frac{1}{2} \lambda \right)$$

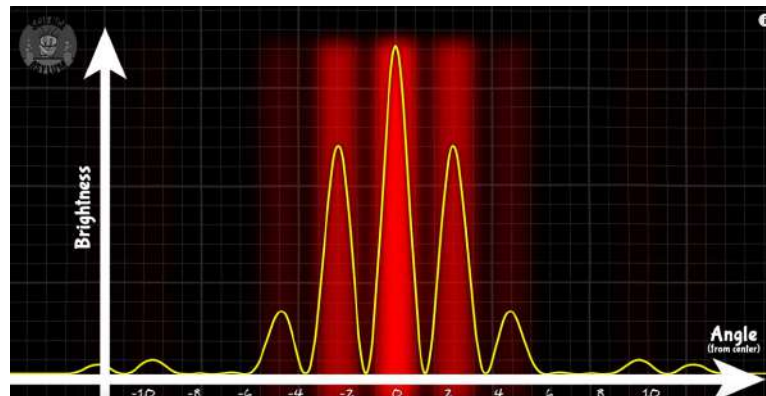
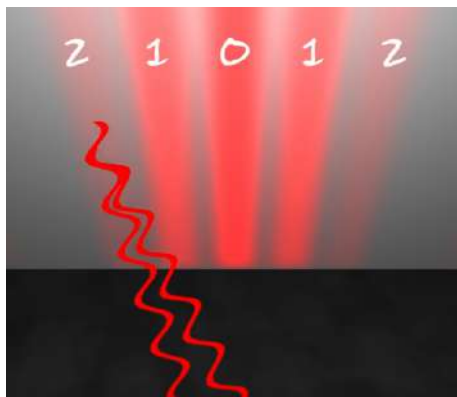
neboli

$$d \sin \theta = \left(m + \frac{1}{2} \right) \lambda, \quad \text{kde } m = 0, 1, 2, \dots$$

(minima - tmavé proužky).



Obr. 36.8 (a) Vlny ze štěrbin S_1 a S_2 (nad a pod náčrtnou) se skládají v libovolném bodě P na stínítku C ve vzdálenosti y od středové osy. Úhel θ je vhodnou veličinou ke stanovení polohy P . (b) Pro $h \gg d$ můžeme r_1 a r_2 považovat přibližně za rovnoběžné paprsky, šířící se pod úhlem θ vzhledem ke středové ose o .

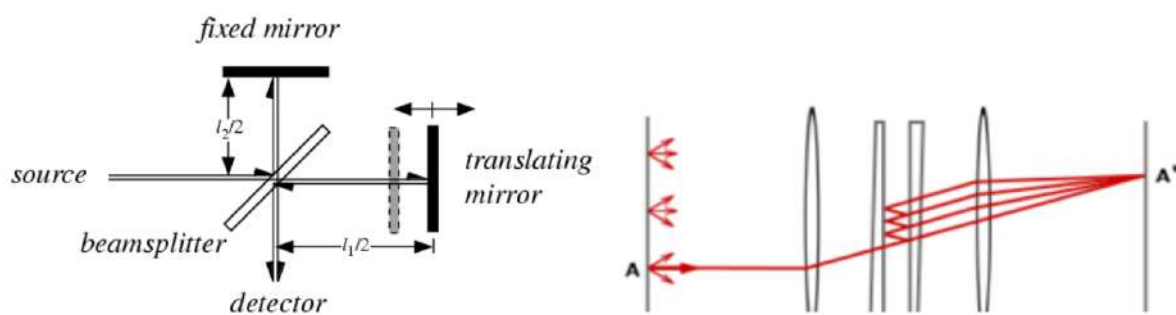


Optické interferometry

Interferometr jsou zařízení, u nichž můžeme definovaným způsobem měnit fázové posuvy mezi vlnovými komponentami, na které se rozdělí vstupující záření.

Kritéria dělení:

- **Dle počtu svazků**
 - dvousvazkové (Michelsonův, Jaminův, Machův–Zehnderův)
 - vícesvazkové (Fabryův–Pérotův interferometr a Lummerova–Gehrckova deska)
- **Dle způsobu získávání interferujících vln**
 - dělením vlnoplochy (Michelsonův)
 - dělením amplitudy (Jaminův)



(a) Schéma Michelsonova interferometru (b) Schéma Fabry-Perotova interferometru

- **Michelsonův interferometr**

- ⇒ **Dvousvazkový interferometr**
- ⇒ Využit k vyvrácení existence ætheru. Stejná rychlost světla nezávisle na směru šíření zdroje.
- ⇒ Princip fungování:

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**

- ⇒ **Vícesvazkový interferometr**
- ⇒ Je tvořen dvojicí planoparalelních zrcadel.
- ⇒ Princip fungování:

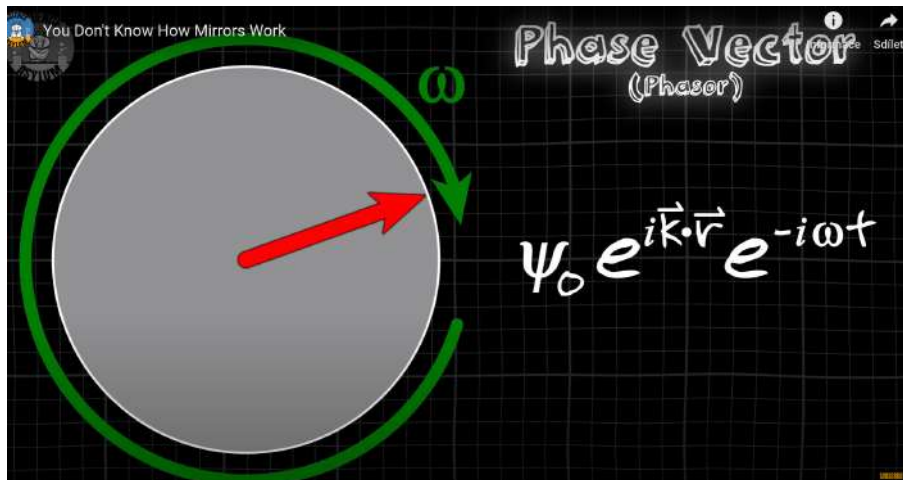
Světlo dopadá mezi dvě zrcadla, vzniká mnohosvazková interference, na stínítku dostaneme interferenční kruhy odpovídající Airyho funkci (obr. 12.3). Pro světlo obsahující dvě vlnové délky dostáváme dvě soustavy interferenčních kruhů, které se při přibližování vlnových délek slijí dohromady. Rozlišení je dáno tím, pro jak blízké vlnové délky je ještě možné rozlišit dvě soustavy interferenčních kruhů.

9.2 Koherence světla.

Nutnou podmínkou, aby se interferenční obrazec objevil na stínítku C je, aby se fázový rozdíl světelných vln, dopadajících do libovolného bodu P stínítka, **neměnil s časem**.

Protože fázový rozdíl zůstává konstantní, je světlo ze štěrbin S1 a S2 **dokonale koherentní**.

Přímé sluneční světlo je částečně koherentní; vlny slunečního světla dopadajícího do dvou bodů mají konstantní fázový rozdíl pouze tehdy, jestliže jsou tyto body blízko u sebe. Jestliže se podíváte zblízka na svůj nehet v jasném slunečním světle, můžete vidět interferenční obrazec, nazývaný anglicky speckle: nehet je jakoby pokryt barevnými skvrnkami (speckle = skvrnka). Tento jev pozorujete proto, že světelné vlny, vzniklé rozptylem ve velmi blízkých bodech nehtu, jsou dostatečně koherentní k tomu, aby ve vašem oku spolu interferovaly.



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:

$$l_c = c\tau_0 \approx \frac{c}{\Delta\nu},$$

kde $\Delta\nu$ je spektrální šířka. Tato délka je důležitá například v **holografii** - chceme-li vytvořit hologram předmětu velikého 1 cm, pak potřebujeme světlo s koherenční délkou alespoň 1 cm, 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

$$E(t) = E_1(t - \tau_1) + E_2(t - \tau_2) \rightarrow E_1(t) + E_2(t + \tau).$$

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

$$I = I_1 + I_2 + 2 \operatorname{Re} \langle E_1(t) E_2^*(t + \tau) \rangle.$$

Špičatá závorka značí středování přes čas. Pomocí posledního členu se definuje časová korelační funkce Γ .

$$\Gamma_{12}(\tau) = \langle E_1(t) E_2^*(t + \tau) \rangle.$$

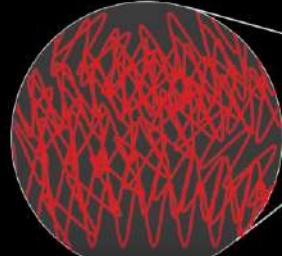
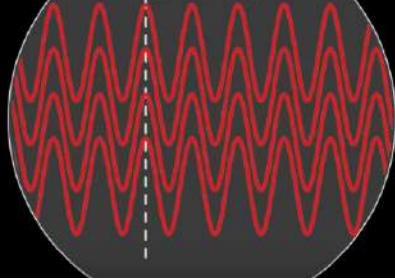
Dále se definuje také komplexní stupeň koherence

$$\gamma_{12}(\tau) = \frac{\Gamma_{12}(\tau)}{\sqrt{I_1 I_2}},$$

Coherence

Laser

Coherence:
In Phase +
Same Direction



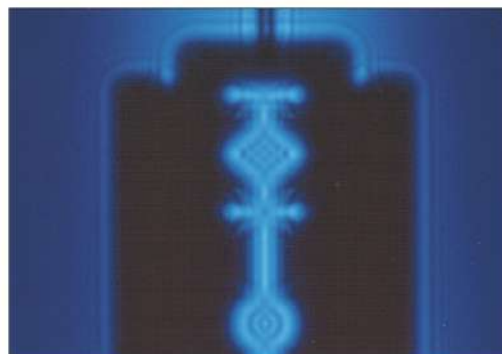
9.3 Ohyb světla (Fraunhoferova a Fresnelova aproximace, optická ohybová mřížka, Braggova rovnice).

Difrakce

- „ohyb světla na překážce“
- vychází z Huygensůva principu, Fresnel (19. stol.) dodává, že sekundární vlnky interferují a skládají se tedy s příslušným fázovým rozdílem.



Obr. 37.1 Difrakční obrazec, který se objeví na pozorovacím stínítku, na něž dopadá světlo prošlé úzkou vodorovnou štěrbinou. Difrakce způsobuje, že se světlo rozšíří kolmo k dlouhým stranám štěrbin. Vzniká tak interferenční obrazec tvořený širokým centrálním maximem a méně intenzivními a užšími sekundárními (neboli vedlejšími) maximy, která jsou oddělena minimy.



Obr. 37.2 Difrakce monochromatického světla na žiletce. Všímejte si maxim a minim intenzity.

Rayleighovo „rozlišovací kritérium“

$$\theta_R = \frac{1,22\lambda}{d}$$

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.

Na stínítku musíme počítat příspěvky od všech paprsků, které ze štěrbin vychází. Suma tedy přejde v integrál. Musíme taky uvážit rozdílný pokles amplitudy od různých zdrojů. Pro názornost, dostaneme něco na způsob:

$$E_P = \int_{-a/2}^{a/2} \frac{E_0}{r_0 + \Delta(s)} e^{-i(\omega t - k(r_0 + \Delta(s)))} ds,$$

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

$$a \sin \Theta = \lambda m \quad \dots \text{mřížková rovnice}$$

kde Θ je uhel mezi kolmicí na stínítku 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 $\Theta = 0$)

Fresnelova difrakce

- interferenční obrazec pozorujeme v malé vzdálenosti za překážkou
- 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.

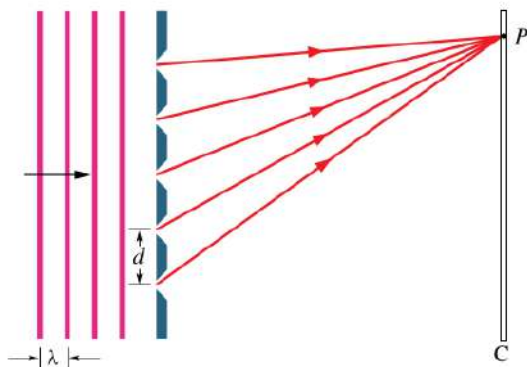
Opět pro názornost

$$E_P = \int_{\text{apertura}} \frac{1}{r r'} e^{ik(\mathbf{r}+\mathbf{r}')} dS,$$

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.

Ohybová mřížka

V porovnání s dvojštěrbínou má toto zařízení mnohem větší počet N štěrbin, jimž se často říká vryp; někdy je jich dokonce několik tisíc na milimetru.



Obr. 37.17 Idealizovaná difrakční mřížka tvořená pouze pěti štěrbinami. Na vzdáleném stínítku C vzniká interferenční obrazec.

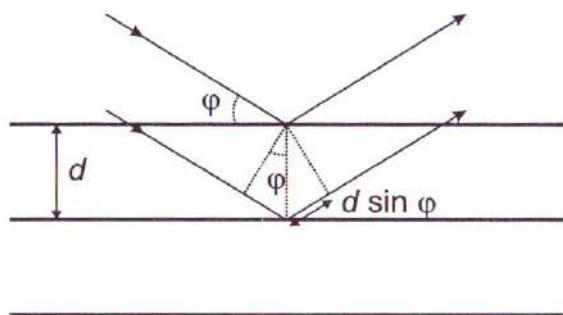


Jemné vrypů o šířce $0,5 \mu\text{m}$ na kompaktním disku dělají z disku difrakční mřížku. Svítí-li na disk malý zdroj bílého světla, tvoří difraktované světlo barevné pruhy, které jsou směsicí difrakčních obrazců od vrypů.

Rozlišovací schopnost mřížky:

$$R = Nm$$

Braggova rovnice



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.

9.4 Šíření světla v anizotropních látkách (použití dvojlomných látek).

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). Přímka, 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).

Tensor permitivity

Tensor 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 $\epsilon_x = \epsilon_y = \epsilon_z$ (tedy stejné vlastnosti pro všechny směry).

Řešení Maxwellových rovnic s různou permitivitou vede k Fresnelově rovnici³, která spojuje index lomu n s nímž se šíří rovinná vlna, jejíž vlnový vektor má směr 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 $\epsilon_x = \epsilon_y \neq \epsilon_z$, koule pro izotropní materiál) daný rovnicí

$$\frac{X^2}{\epsilon_1} + \frac{Y^2}{\epsilon_2} + \frac{Z^2}{\epsilon_3} = 1$$

Nakresleme si elipsoid a směr šíření vlny s . Dále sestrojme rovinu kolmou ke směru 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).

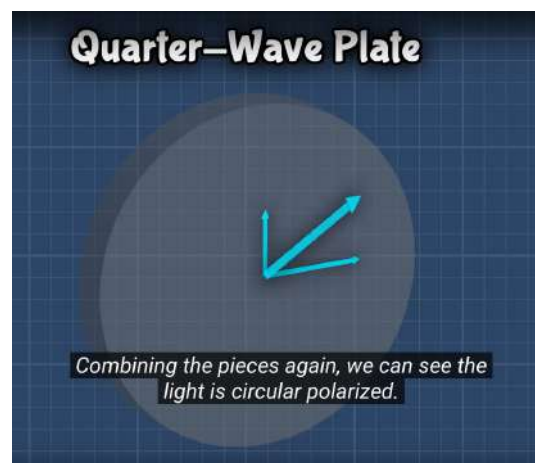
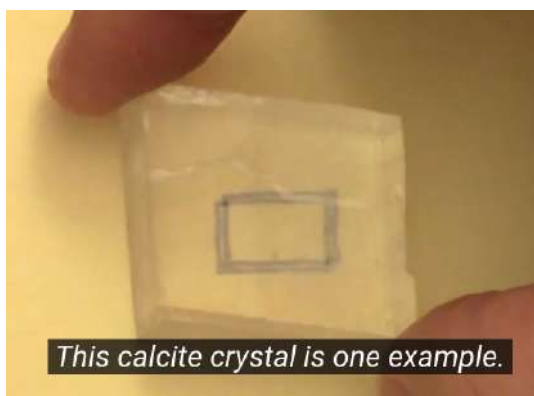
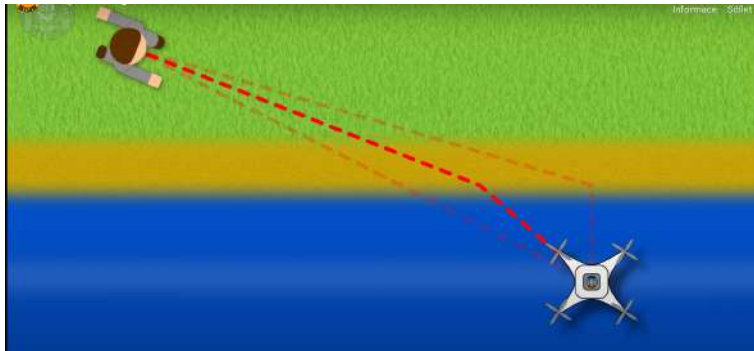
Tedy, v anizotropní látce se světlo šíří tak, že v každém směru mohou postupovat dvě vlny s různými fázovými rychlostmi (různé indexy lomu), které jsou lineárně polarizované v navzájem kolmých rovinách. Dvojlom nastává, dopadá-li vlna na povrch anizotropního materiálu a dále se šíří jako řádná a mimořádná. Platí samozřejmě zákon lomu

$$n_i \sin \Theta_i = n_t \sin \Theta_t.$$

Přičemž 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

Fermatův princip:

- Světlo se v prostoru šíří z jednoho bodu do druhého po takové dráze, aby doba potřebná k proběhnutí této dráhy nabývala minima.



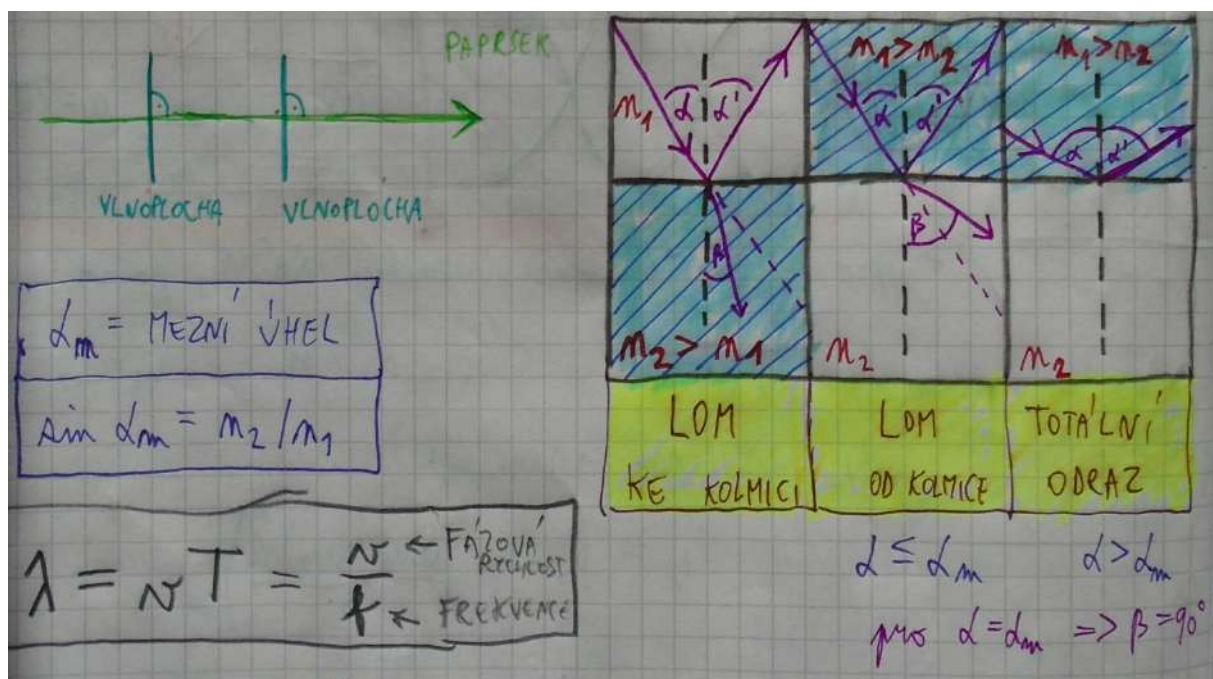
9.5 Geometrická optika (eikonálová rovnice, geometrická optika sférických ploch, zobrazovací rovnice).

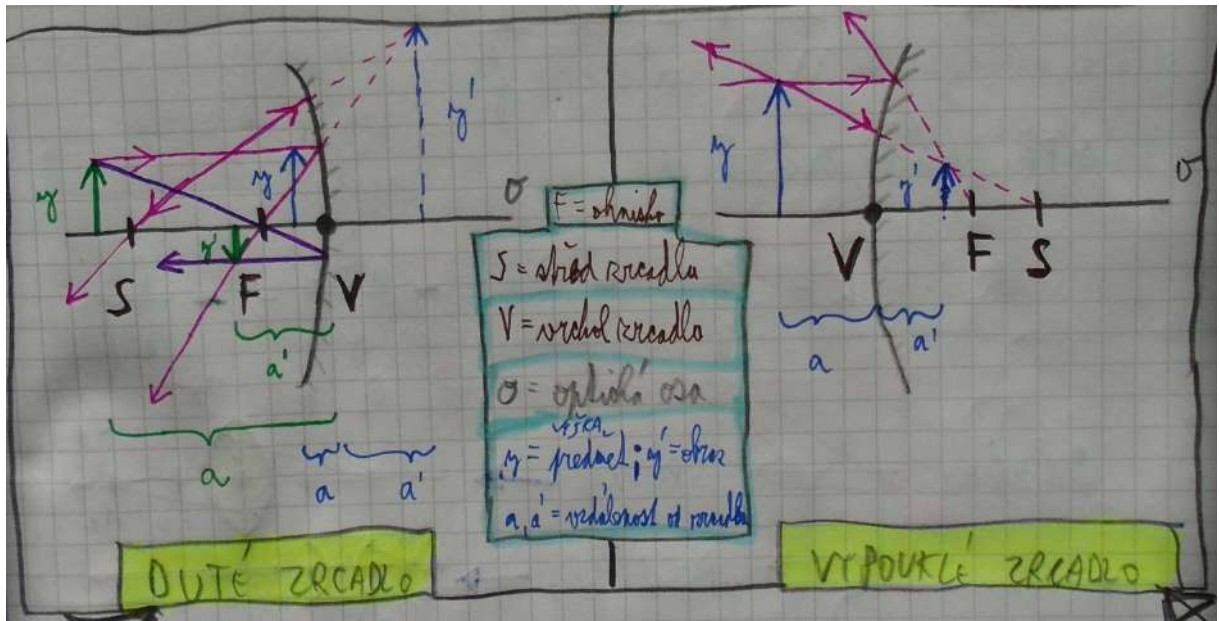
Geometrická optika

- založena na pojmu paprsek
- paprsková optika popisuje zjednodušeným způsobem interakci zářivého pole s předměty řádově většími než je vlnová délka záření
- Pracuje s pojmy, které jsou známy z „matematické geometrie“
 - svítící bod je chápán jako **matematický bod**
 - světelný paprsek v homogenním prostředí (ve všech místech stejný index lomu) jako **matematická přímka**
 - v nehomogenním prostředí jako (nekonečně tenká) **křivka** v trojrozměrném prostoru.

Snellův zákon lomu:

$$\frac{\sin \alpha}{\sin \beta} = \frac{v_1}{v_2} \Leftrightarrow m_1 \sin \alpha = m_2 \sin \beta$$





9.6 Optické zobrazovací přístroje.

Parametry optických soustav

Za velmi významné praktické parametry zobrazujících soustav můžeme považovat:

1. **zorné pole** definované pro konjugované plochy (roviny) v předmětovém a v obrazovém prostoru; v soustavě je zorné pole definované **clonou zorného pole**;
2. **rozlišení** při zobrazení blízkých bodů v rovině kolmé na optickou osu, a to nejen bodů na optické ose, ale i bodů na okraji zobrazované scény;
3. **hloubka ostrosti**, tj. jak se změní ostrost obrazu (rozlišení) při posunu předmětové plochy ve směru podél optické osy; její určení je spojeno s tím, jak velkým obrazem svítícího bodu (světlou skvrnou) se spokojíme (tolerance neostrosti, přijatelné rozostření);
4. **světelnost**, tj. kolik zářivého výkonu emitovaného předmětem je soustava schopna využít a soustředit do vykresleného obrazu.

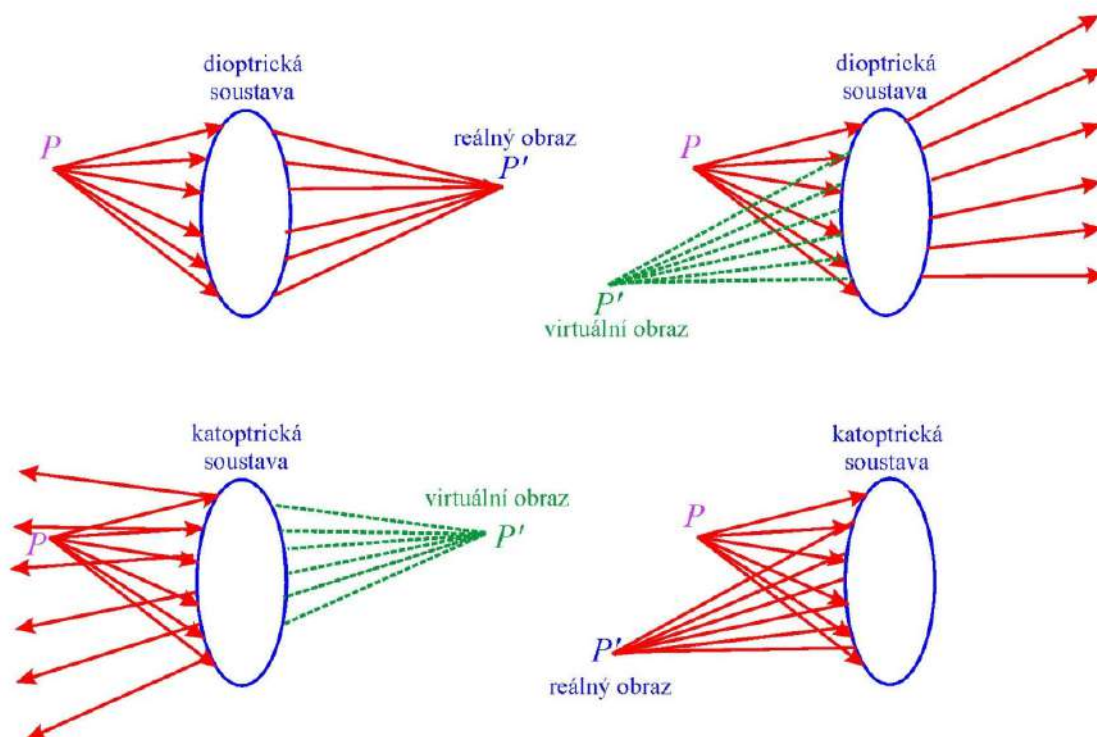
Dioptrická vs. katoptrická soustava

Dioptrická soustava

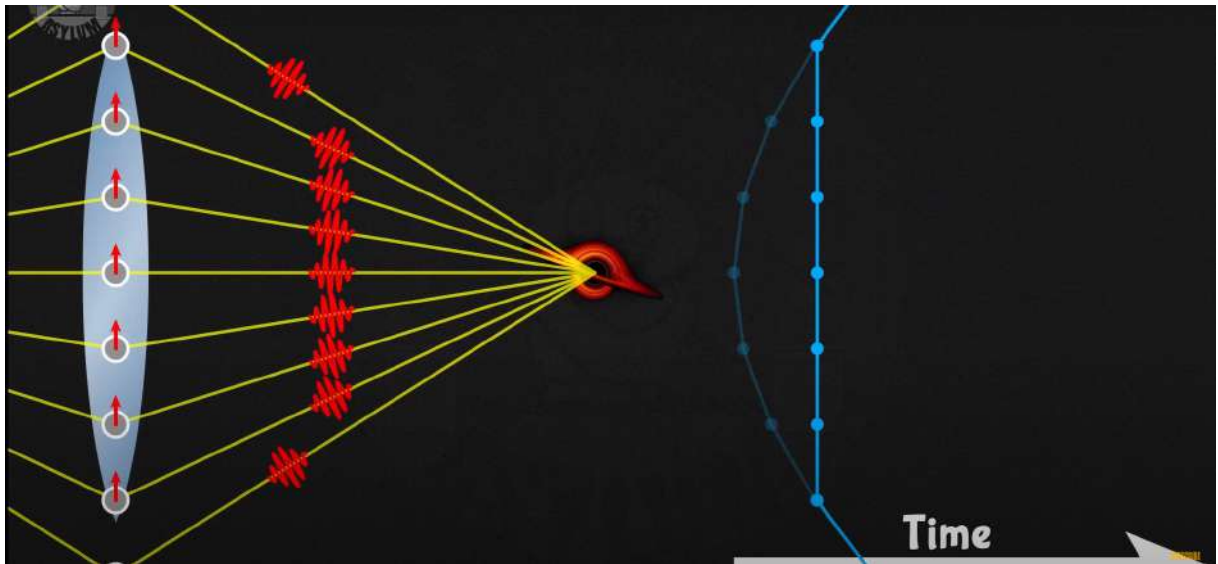
- paprsky od předmětu vstupují do soustavy a vystupují na opačné straně soustavy
- realizována lomnými plochami nebo sudým počtem odrazových ploch, případně jejich vhodnou kombinací.

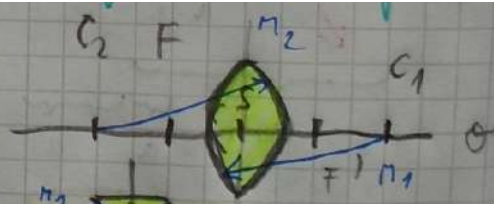
Katoptrická (zrcadlová) soustava


- paprsky vstupují i vystupují na stejné straně soustavy
- realizována např. lichým počtem odrazných ploch.



Obr. 8.11 Schématické znázornění reálného a virtuálního obrazu P' předmětového bodu P při zobrazení dioptrickou a katoptrickou soustavou s vyznačením homocentrických svazků

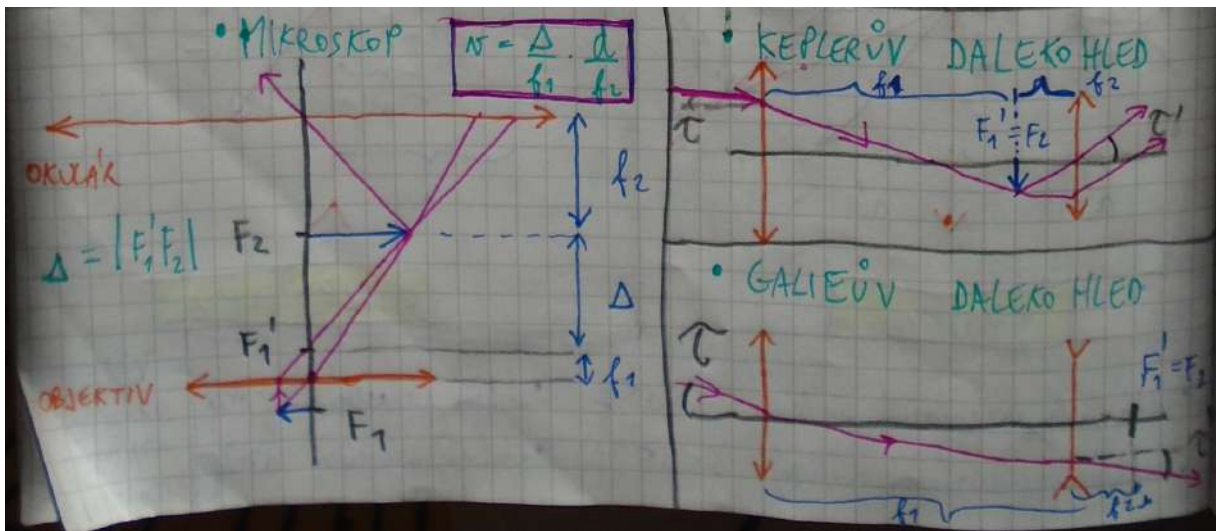
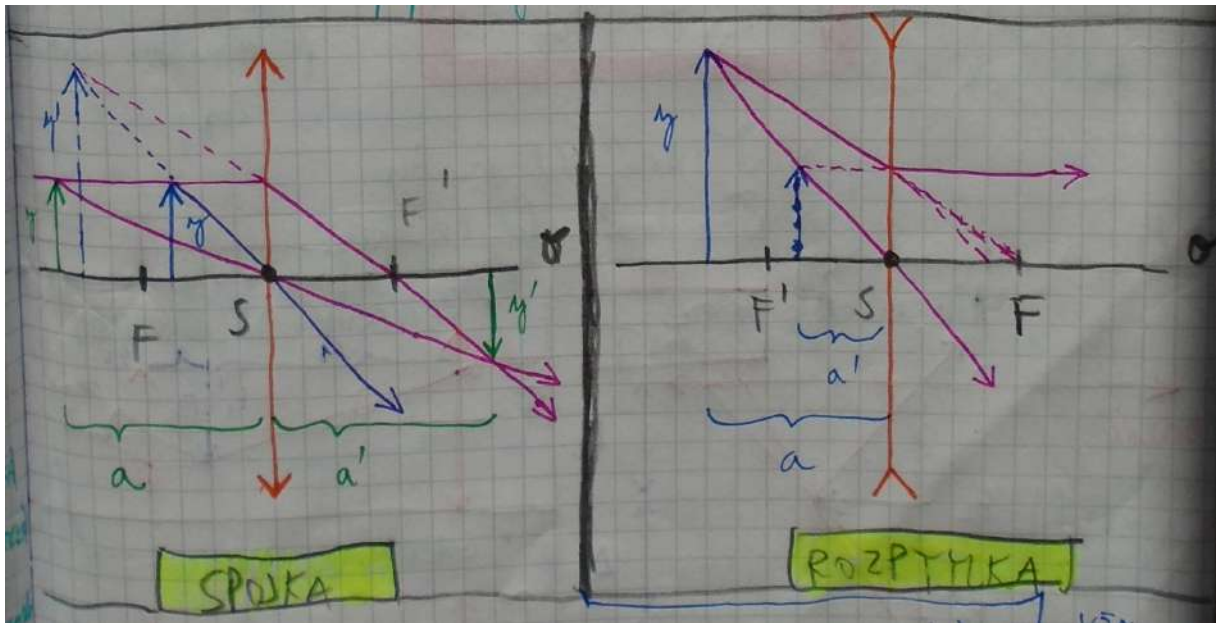


• ČOČKY → SPOJKY → 

 • ČOČKY → ROZPTYČKY → 

ZNAMÉNKOVÁ KONVENCE:

polomer křivosti	$R > 0$	<u>VTOPKĚ</u> (spojka)
	$R < 0$	<u>VÝDUTĚ</u> (rozptyčka)
předmětová vzdálenost	$a > 0$	obrazový prostor
	$a < 0$	vzdálenost virtuálního předmětu
obrazová vzdálenost	$b > 0$	obrazový prostor
	$b < 0$	vzdálenost virtuálního obrazu



9.7 Spektrální přístroje a základní metody optické spektroskopie.

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 až 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.

9.8 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 interferenceční 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).

9.9 Princip laseru.

LASER = Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation

Základem je pochopení spontánní a stimulované emise a charakteru vyzářeného světla.

- **spontánní emise** ... foton je vyzářen do libovolného směru s náhodnou fází
- **stimulovaná emise** ... emitovaná vlna má stejný směr i stejnou fázi, jako vlna dopadající a generované světlo je tudíž koherentní se světlem, které stimulovanou emisí vyvolává

Vlastnosti laseru

- **monochromaticnost** ... velice úzký pás frekvencí ν vyzářovaného světla
- **koherentnost** ... shodná polarizace světelné vlny a stejná fáze vlnění
- **výkon** ... možnost koncentrovat vysoké množství světelné energie do malého prostoru

Lasery se dělí podle typu **aktivního prostředí**

- plynové
- kapalinové
- pevnolátkové

Intenzita závislá na šíření v látce

$$I(z) = I(0)e^{B_{21}(N_2 - N_1)\frac{h\nu}{c\Delta\nu}z},$$

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 planparalelních 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 převyšit ztráty. Pokud jsou ztráty přesně vyrovnány, mluvíme zde o prahové podmínce laseru.

Nejznámější je helium-neonový laser.

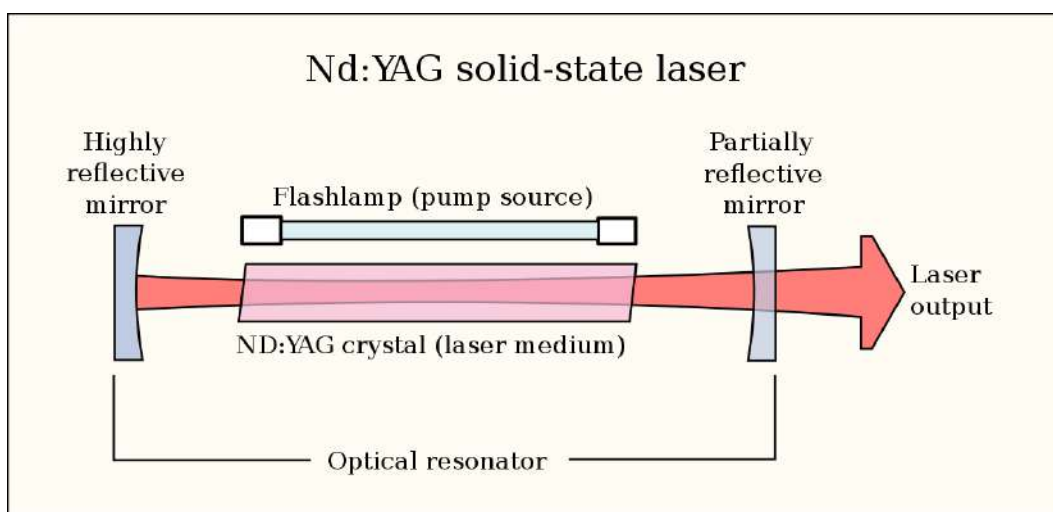
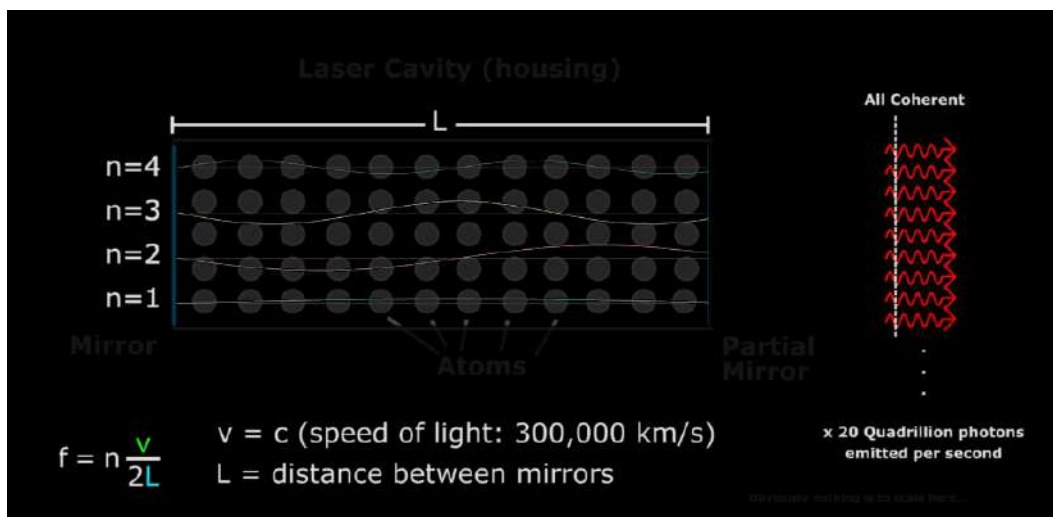
V něm dochází k stimulované emisí mezi atomárními hladinami Ne. Čerpání je zajištěno elektrickým výbojem v plynové směsi. Tento laser má koherenční délku 300 m a $\Delta\nu_c = 10^6$ Hz při $\lambda = 633$ nm. Díky mnohonásobným odrazům světla v rezonátoru je světlo dobře fokusováno a například na Měsíci je možné udělat stopu o průměru ≈ 10 m. Díky stavbě rezonátoru může laser generovat jen světlo vyhovující okrajovým podmínkám. Pro ten nejjednodušší s planparalelními zrcadly (Fabry-Perot \rightarrow Airyho funkce (obr. 12.3)) musí být splněna rezonanční podmínka pro vlnovou délku světla

$$n\frac{\lambda_n}{2} = L,$$

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.

Děje probíhající v laseru:

- simulovaná absorpce
- spontánní emise
- simulovaná emise



9.10 Tepelné záření, zákony záření absolutně černého tělesa.

Tepelné záření

Jedna z forem přenosu tepelné energie.

První pokusy o popsání vlnové délky vyzařovaného světla v závislosti na jeho teplotě:

Wienův zákon

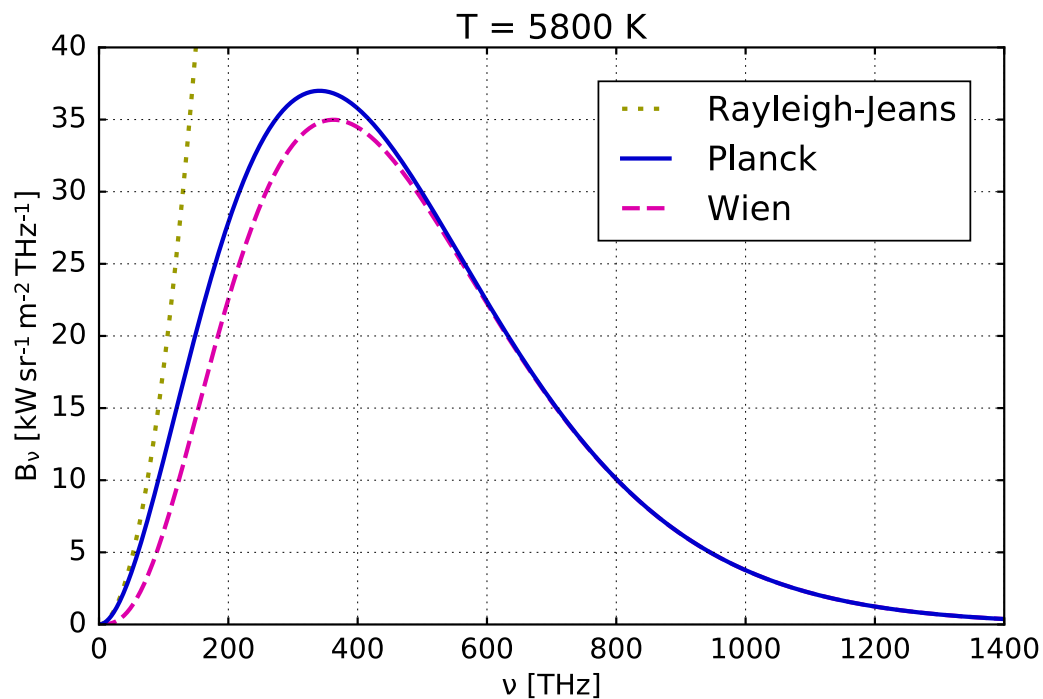
$$u_\nu(\nu, T) = A\nu^3 e^{-\frac{B\nu}{T}} \rightarrow \text{platí jen pro velké } \nu$$

→ IR katastrofa

Rayleigh-Jeansův zákon

$$u_\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} k_B T \rightarrow \text{platí jen pro malé } \nu$$

→ UV katastrofa



Planckův vyzařovací zákon

Příklad: Planckův vyzařovací zákon

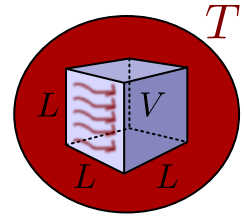
Zadání: Odvoďte Planckův vyzařovací zákon

Úkoly: A) Odvoďte $u(T, \omega) d\omega = \langle E \rangle$ v intervalu frekvencí $(\omega, \omega + \Delta\omega)$ na jednotku V
B) Odvoďte $U(T, V)$

✓ Řešení:

Mějme absolutně černé těleso o teplotě T .

Uvnitř něho jest krychlová dutina se stranou délky L (tedy $V = L^3$), do níž těleso vyzařuje.



Energetické spektrum QLHO (Kvantový lineární harmonický oscilátor)

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

Stavová suma pro QLHO

$$\begin{aligned} Z_1 &= \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta E_n) = \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\beta\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)\right) = e^{-\frac{\beta\hbar\omega}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega n} = e^{-\frac{\beta\hbar\omega}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} (e^{-\beta\hbar\omega})^n = \\ &= \left| \text{součet geometrické řady} \right|_{s = \frac{a_0}{1-q}} = e^{-\frac{\beta\hbar\omega}{2}} \frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} = \boxed{\frac{e^{-\frac{\beta\hbar\omega}{2}}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}} \end{aligned}$$

Střední energie pro QLHO

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln(Z_1) = -\frac{\partial}{\partial\beta} \left(-\beta\frac{\hbar\omega}{2} - \ln(1 - e^{-\beta\hbar\omega}) \right) = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\partial}{\partial\beta} \ln(1 - e^{-\beta\hbar\omega}) \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} (-e^{-\beta\hbar\omega}) (-\hbar\omega) = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega e^{-\beta\hbar\omega}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} = \hbar\omega \left(\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} + \frac{1}{2} \right) = \boxed{\hbar\omega \left(\frac{1}{2} + \langle n \rangle \right)} \end{aligned}$$

\downarrow
 střední počet kvant
 \uparrow
 nulové kmity

Střední počet kvant

$$\boxed{\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}}$$

Dutinu chápeme jako *pravoúhloú nekonečnou potenciálovou jámu* délky L , nechť má vlnění vlnové číslo k , ze Schrödingerovy rovnice plyne pro stojaté vlnění:

$$2L = \lambda n, \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

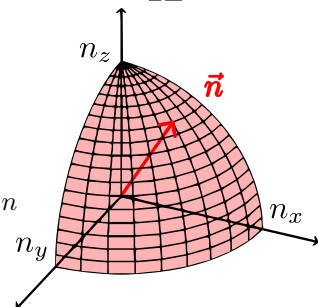
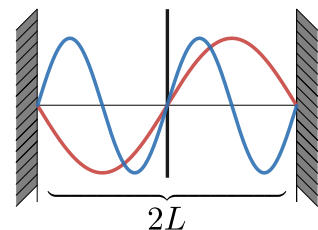
Délka dutiny L musí být celočíselným násobkem vlnové délky pro stojaté vlnění.

Budeme počítat v prostoru frekvencí ω , tedy chceme si vyjádřit závislost $\lambda = \lambda(\omega)$

$$\text{Dále víme, že: } \omega = 2\pi f \Rightarrow f = \frac{\omega}{2\pi} \Rightarrow \frac{1}{f} = \frac{2\pi}{\omega}$$

$$\lambda = \frac{c}{f} = \frac{2\pi c}{\omega} \Rightarrow \text{dosadíme do } 2L = \lambda n \Rightarrow 2L = \frac{2\pi c}{\omega} n \Rightarrow \omega = \frac{\pi c}{L} n$$

$$\omega = \frac{\pi c}{L} \vec{n} = \frac{\pi c}{L} \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$$



Platí, že ve 3D \vec{n} se dá rozložit do složek $n_x, n_y, n_z \in \mathbb{N}$, tedy jsme omezeni pouze na 1. oktant.

Kombinace n_x, n_y, n_z a polarisace nám dává mód \mathcal{N} , v závislosti na ω máme $\mathcal{N}(\omega)$

$$\mathcal{N}(\omega) = (\text{způsoby polarisace}) \cdot (1. \text{ oktant}) \cdot (\text{objem koule}) = 2 \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{4}{3} \pi n^3 = \frac{\pi}{3} n^3$$

Dosadíme za n ze inverzí vztahu pro ω : $n = \frac{\omega L}{\pi c}$

$$\mathcal{N}(\omega) = \frac{\pi}{3} \left(\frac{\omega L}{\pi c} \right)^3 = [L^3 = V] = \frac{\pi \omega^3 V}{3\pi^3 c^3} = \frac{\omega^3 V}{3\pi^2 c^3}$$

Počet módů \mathcal{N} pro interval $(\omega, \omega + \Delta\omega)$ značíme \mathcal{D} a definujeme

$$\mathcal{D}(\omega) d\omega \equiv d\mathcal{N}(\omega) \Rightarrow \mathcal{D}(\omega) = \frac{d\mathcal{N}}{d\omega} = \frac{3\omega^2 V}{3\pi^2 c^3} = \frac{\omega^2 V}{\pi^2 c^3}$$

$$\mathcal{D}(\omega) d\omega = \frac{\omega^2 V}{\pi^2 c^3} d\omega$$

A) Spektrální hustota vyzařování $u(T, \omega)$

Intensita záření v celé dutině V

$$\begin{aligned} E(\omega) d\omega &= \langle E \rangle(\omega) \cdot \mathcal{D}(\omega) d\omega = \hbar\omega \left(\frac{1}{2} + \langle n \rangle \right) \cdot \frac{\omega^2 V}{\pi^2 c^3} d\omega = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} V d\omega \\ &= \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1} \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} V d\omega \end{aligned}$$

kde neuvažujeme příspěvek nulových kmitů ke střední energii QLHO

A pokud chceme odvodit spektrální hustotu vyzařování na jednotku objemu:

$$u(T, \omega) = \frac{E(\omega) d\omega}{V} = \frac{\omega^3}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1} \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} d\omega$$

B) Vyzářená energie $U(T, V)$

$$\begin{aligned} U(T, V) &= \int_0^\infty \langle E \rangle(\omega) \cdot \mathcal{D}(\omega) d\omega = \int_0^\infty \frac{\omega^3}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} V d\omega = \frac{V}{\pi^2 c^3} \int_0^\infty \frac{\hbar\omega^3}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} d\omega = \\ &= \left| \begin{array}{l} \beta\hbar\omega = x \\ \beta\hbar d\omega = dx \end{array} \right| \rightarrow \left| \begin{array}{l} \omega^3 = \frac{x^3}{\beta^3 \hbar^3} \\ d\omega = \frac{dx}{\beta\hbar} \end{array} \right| = \frac{\hbar V}{\pi^2 c^3} \left(\frac{1}{\beta\hbar} \right)^4 \underbrace{\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx}_{=\frac{\pi^4}{15}} = \frac{k_B^4}{\pi^2 c^3 \hbar^3} \frac{\pi^4}{15} V T^4 \end{aligned}$$

$$U(T, V) = \frac{\pi^2 k_B^4}{15 c^3 \hbar^3} V T^4 = a V T^4 \quad \dots \text{Stefan-Boltzmannův zákon}$$

Dodatky k předešlému příkladu

- Planckův vyzařovací zákon v prostoru vlnových délek λ , vycházíme ze vztahů:

$$\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}, \quad \frac{d\omega}{d\lambda} = -\frac{2\pi c}{\lambda^2} \Rightarrow d\omega = -\frac{2\pi c}{\lambda^2} d\lambda, \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

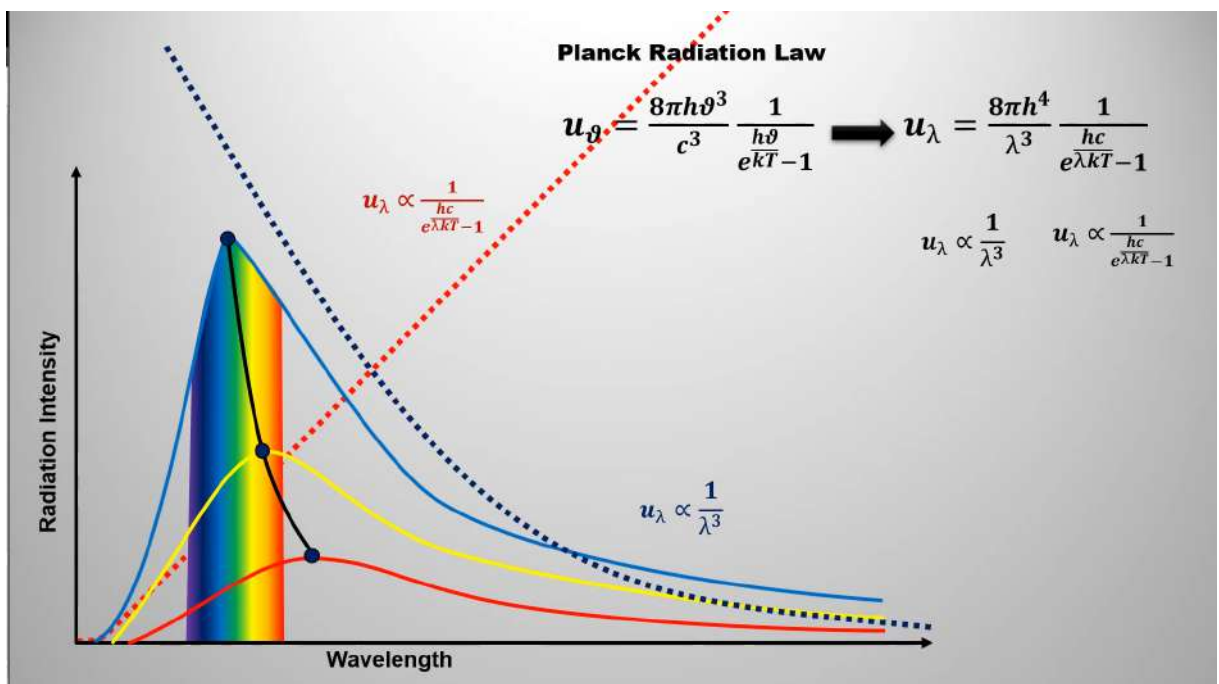
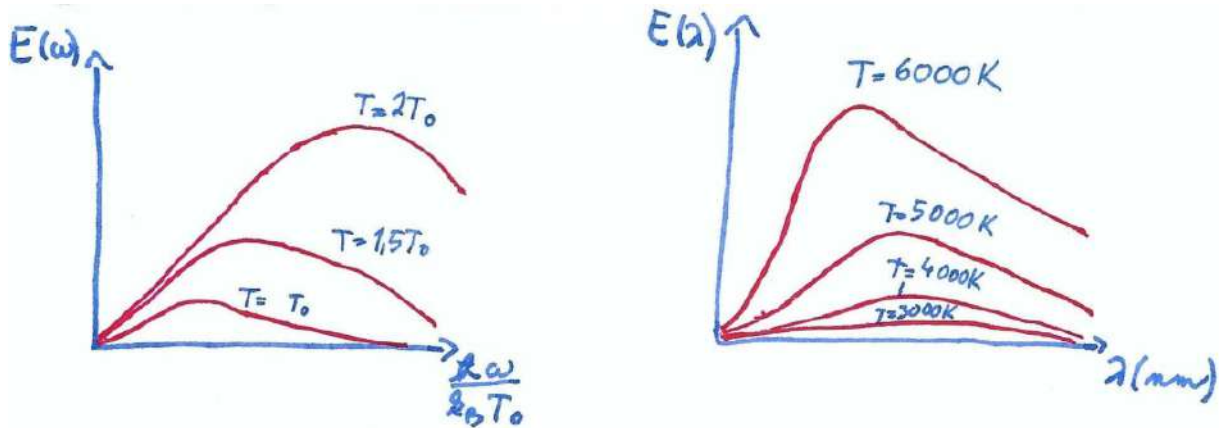
A dosadíme do vzorce pro $E(\omega) d\omega$. **POZOR**, dosazujeme v absolutních hodnotách (ignorujeme mínusy):

$$E(\lambda) d\lambda = \frac{1}{\exp\left(\frac{h}{2\pi\beta} \left[\frac{2\pi c}{\lambda}\right]\right) - 1} \frac{h \left[\frac{2\pi c}{\lambda}\right]^3}{2\pi^3 c^3} V \left[\frac{2\pi c}{\lambda^2} d\lambda\right] = \frac{8\pi V h c}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda}\right) - 1} \frac{1}{\lambda^5} d\lambda$$

$$= \frac{8\pi V h c}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda k_B T}\right) - 1} \frac{1}{\lambda^5} d\lambda$$

- Spektrální hustota vyzařování $u(T, \lambda)$

$$u(T, \lambda) = \frac{E(\lambda) d\lambda}{V} = \frac{8\pi h c}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda k_B T}\right) - 1} \frac{1}{\lambda^5} d\lambda$$



10 Struktura atomů, molekul a kondenzovaných látek

10.1 Dualismus vlna-částice, fotoefekt, Comptonův rozptyl.

Dualita vlna-částice

17.-18. století: spor o podstatu světla, 2 tábory:

- **Částicová hypotéza:** světlo je proud částic
zastánci: Isaac Newton
- **Vlnová hypotéza:** světlo je příčné vlnění
zastánci: Christian Huyghens

Do počátku 19. století rasismus vůči Huyghensovi, přijímán obecně názor, že světlo je proud částic.

- 1803 Youngův experiment prokázal, že světlo interferuje a je tedy vlněním

V 19. století pak rasismus vůči Newtonovi, přijímán obecně názor, že světlo je vlnění.

- Thompson 1897, objeven elektron
- Lenardův experiment (1902) - fotoelektrický jev → světlo se chová i jako proud částic

Sjednocení 2 táborů pod vlnově-částicovou dualitu světla. Světlo se tak dle typu experimentu chová jako **vlnění (interference, difrakce)** nebo **korpuskulárně (fotoefekt, Comptonův rozptyl)**

de Broglieho hypotéza = „duální chování hmotných částic“

$$\text{Energie fotonu: } E = mc^2 = h\nu \quad \rightarrow \quad \text{Pro hmotné částice: } mv^2 = h\nu = h \frac{v}{\lambda}$$

de Broglieův vztah:
$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

Elektrony vykazují dle de Broglieova vztahu vlnové vlastnosti, odpovídající vlnové délce, kterážto je nepřímo úměrná jeho hybnosti.

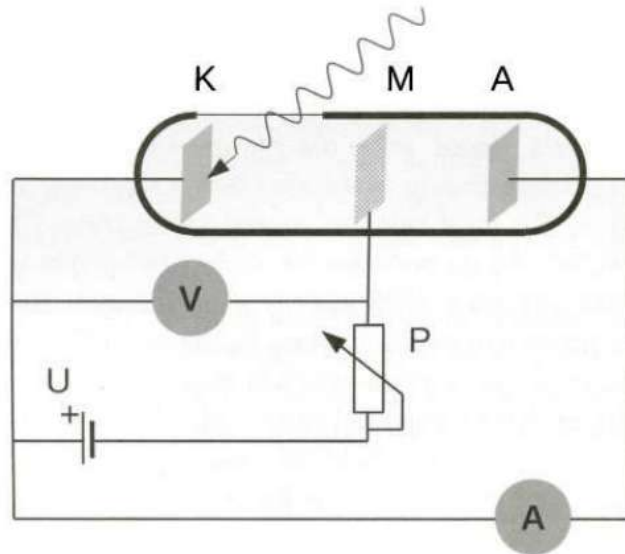
Fotoefekt

Lenard zjistil, že po osvětlení kovů viditelným světlem nebo UV zářením dochází k uvolnění částic (elektronů), které jsou vlastnostmi identické s částicemi katodového záření.

Světlo je schopno uvolnit elektrony z kovu. Pro světlo - vlnění se předpokládala platnost následujících jevů:

1. **Vyšší intenzita světla = vyšší kinetická energie uvolněných elektronů** †
2. **Nižší intenzita světla = delší čas potřebný k uvolnění elektronů** †
3. **Světlo jakékoliv délky bude schopno uvolnit elektrony z kovu** †

Experiment však prokázal, že tyto předpoklady **NEPLATÍ!**



Obrázek 4.1: Schéma zapojení použité Lenardem v [53].

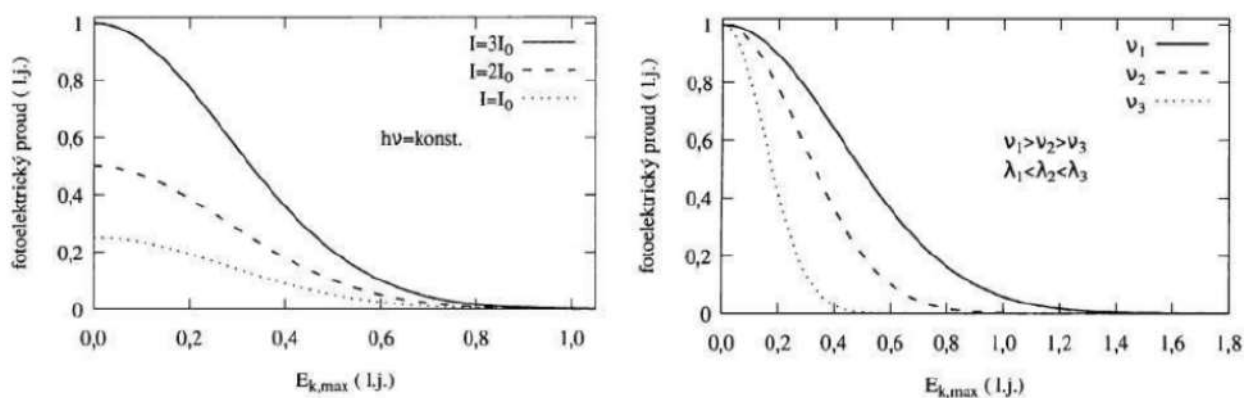
Místo toho **PLATÍ** následující:

1. Energie uvolněných elektronů **NEZÁVISLÁ** na intenzitě světla (liší se pouze jejich počet - elektrický proud) ✓
 2. Elektrony jsou uvolněny okamžitě po dopadu světla ✓
 3. Elektrony se uvolňují až od určité prahové frekvence - energie dopadajícího světla ✓
- Fotoefekt vysvětlil Albert Einstein, 1905

Maximální energie fotoelektronů $E_{e,\max}$ závisí na energii dopadajícího záření vztahem:

$$h\nu = E_{e,\max} + W$$

kde W je tzv. výstupní práce a závisí na materiálu katody.

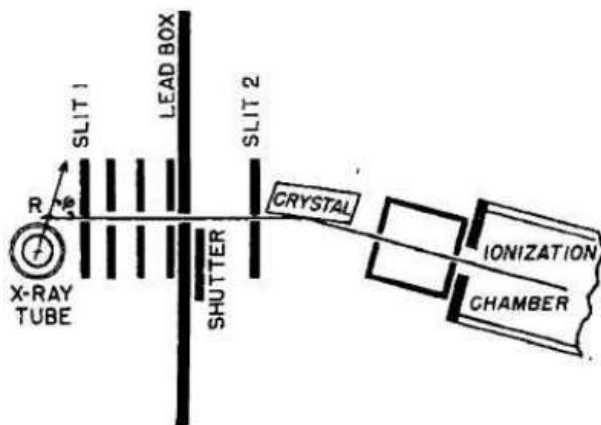


Obrázek 4.3: Závislost fotoelektrického proudu na brzdém potenciálu U pro různé intenzity dopadajícího monochromatického světla (nahore). Dole závislost fotoelektrického proudu na brzdém potenciálu U pro různé vlnové délky, frekvence, záření.

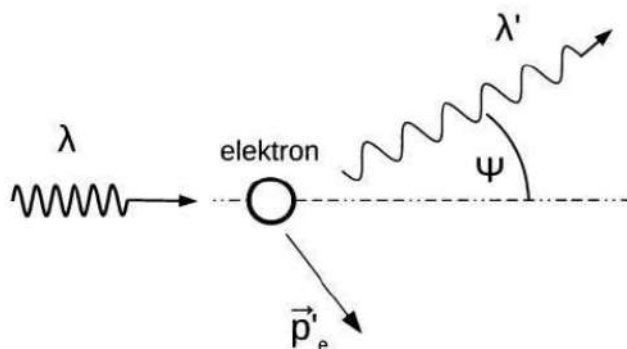
Comptonův rozptyl

Comptonův rozptyl = „neelastický rozptyl fotonů na nabitě částici (nejčastěji elektronu)” Compton studoval rozptyl rtg. záření na různých prvcích. **Nezávisle** na atomovém čísle prvku, na kterém dochází k rozptylu, má část rozptýleného záření **menší** energii.

Změna energie (vlnové délky) záření závisí pouze **na úhlu rozptylu**.



- rozptyl fotonu na volném elektronu (nejjednodušší příklad)
Volný elektron = je v klidu, nebo se pohybuje rovnoměrně přímočaře.



Obrázek 4.5: Schéma Comptonova rozptylu – neelastického rozptylu fotonu na *volném* elektronu. Foton je rozptýlen pod úhlem Ψ , část hybnosti odnáší i elektron.

Foton má před srážkou energii a hybnost: $E = cp$, $\vec{p} = (p, 0, 0)$

Foton má po srážce energii a hybnost: $E' = cp'$, $\vec{p}' \neq (p, 0, 0)$

Elektron má před srážkou energii a hybnost: $E_e = m_e c^2$, $\vec{p}_e = (0, 0, 0)$

Elektron má po srážce energii a hybnost: $E'_e = c\sqrt{p_e'^2 + m_e^2 c^2}$, $\vec{p}_e' \neq (0, 0, 0)$

Při rozptylu platí zákony zachování energie a hybnosti (v relativistickém tvaru):

$$\begin{aligned} E + E_e &= E' + E'_e, & \vec{p} &= \vec{p}' + \vec{p}'_e \\ \Rightarrow E'_e &= E + E_e - E', & \vec{p}'_e &= \vec{p}' - \vec{p} \end{aligned}$$

Obě rovnice upravíme, přenásobíme c^2 a odečteme od sebe, abychom se zbavili neznámé energie elektronu E'_e

$$m_e^2 c^4 = m_e^2 c^4 + 2 \left(EE_e - EE' - E_e E' + c^2 \vec{p} \vec{p}' \right)$$

Označíme-li ψ úhel mezi vektory \vec{p} a \vec{p}' , můžeme upravit na:

$$EE_e = EE' + E_e E' - c^2 p p' \cos \psi$$

Po dosazení za E_e, E a E' získáme výraz pro energii fotonu po srážce

$$E' = \frac{E}{1 + \frac{E}{m_e c^2} (1 - \cos \psi)}$$

Rozdíl energií fotonů před a po srážce je tedy

$$E - E' = \frac{EE'}{m_e c^2} (1 - \cos \psi)$$

Za energie fotonu dosadíme $E = hc/\lambda$ a $E' = hc/\lambda'$, a vyjádříme rozdíl vlnových délek fotonu před a po srážce

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \psi)$$

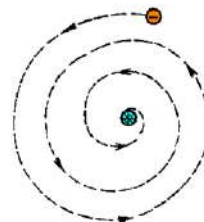
kde člen $h/m_e c$ se označuje jako Comptonova vlnová délka λ_C

10.2 Bohrův model atomu.

Rutherfordův planetární model

nedostatky modelu:

- elektrodynamicky nestabilní



—————▶ spojité záření vs. experiment (čarová spektra)

Bohrův model atomu = první pokus o „kvantování atomu“

Niels bohr postuloval následující 4 podmínky:

1. elektron krouží kolem jádra po kruhových drahách
2. přípustné jsou jen vybrané stacionární orbity (na nich elektron obíhá a nezáří)
3. stacionární orbity jsou dány kvantováním momentu hybnosti

$$L = n\hbar$$

kde \hbar je redukovaná Planckova konstanta

4. elektrony mohou přeskakovat mezi jednotlivými orbity - přeskoky jsou spojeny s vyzářením nebo s pohlcením fotonu

$$\hbar\omega = E_n - E_m$$

kde E_n a E_m jsou energie elektronu na orbitách s indexy n a m

Pozn.: Kvantování orbitálního momentu hybnosti vede i na kvantování energie elektronů v atomu.

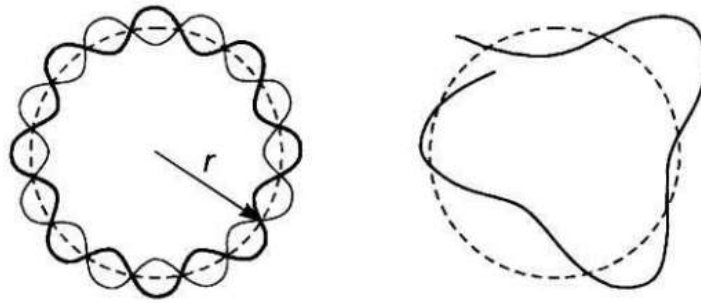
Rozdíl mezi orbitou a orbitalem:

- orbita = myšlená kruhová oběžná dráha elektronu kolem jádra atomu

Značíme $n=1,2,3,4,\dots$ nebo K,L,M,N, \dots orbity

- orbital = funkce popisující prostorovou pravděpodobnost nalezení elektronu na dané slupce

Značíme S,P,D,F, (G, H, I, ...)



Obrázek 1.21: V Bohrově modelu atomu vodíku jsou povoleny jen takové orbity, jejichž délka odpovídá celočíselnému násobku de Broglieovy vlnové délky elektronu.

$$2\pi r_n = n\lambda = n \frac{h}{mv} \Rightarrow pr = n\hbar$$

kde $pr = |\vec{r} \times \vec{p}| = |\vec{L}| = L$ alias pr je rovna velikosti momentu hybnosti elektronu Energie elektronu na dráze n je dána součtem kinetické a potenciální energie,

$$E_n = \frac{1}{2}m_e v_n^2 - \frac{e'^2}{r_n} = -\frac{e'^2}{2r_n} = -\frac{e'^4 m_e}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -Ry \frac{1}{n^2},$$

kde jsme použili $v_n = \frac{p_n}{m_e} = \frac{n\hbar}{m_e r_n}$. Konstanta $Ry = \frac{e'^4 m_e}{2\hbar^2} = 13,6\text{eV}$ se nazývá Rydbergova.

Poznámka: Správně bychom měli použít ve vztahu redukovanou hmotnost $m^* = \frac{M_J m_e}{M_J + m_e}$

kde M_J je hmotnost jádra, protože elektron obíhá okolo těžiště atomu, nikoliv okolo jádra samotného.

Což můžeme využít pro přepis 4. Bohrovy kvantovací podmínky

$$\hbar\omega = E_n - E_m = Ry \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

10.3 Základní typy vazeb mezi atomy, meziatomový potenciál.

Chemická vazba

„energeticky stabilisující silová interakce poutající navzájem sloučené atomy do podoby molekuly“

- chemická vazba z pohledu stability

stabilní vazba: energie molekuly < energie jednotlivých atomů

Energetická bilance lze zapsat pomocí rovnice:

$$E_s = E(R_\alpha) - \sum_{\alpha} E_{\alpha}^{\text{atom}}$$

kde α indexuje jednotlivé atomy a R_α udává polohu atomu α

O stabilitě molekuly rozhoduje znaménko E_s $\begin{cases} E_s < 0 & \text{molekula je stabilní} \\ E_s > 0 & \text{molekula je nestabilní} \end{cases}$

- typy chemické vazby

1. žádná vazba: vazba mezi atomy nevznikne, je energeticky nevýhodná
2. vazba iontová
3. vazba kovalentní
4. vazba van der Waalsova
5. kovová vazba (vodivostní elektrony)

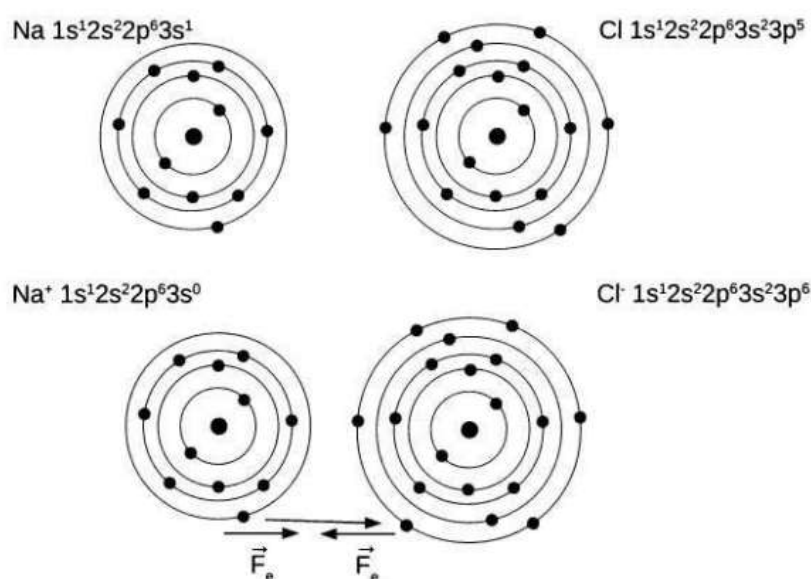
- iontová vazba

Iontovou vazbu tvoří ionty, které jsou vzájemně přitahovány elektrostatickými silami.

Typický typ pro dvouatomové molekuly obsahující atomy z prvního (*prvky alkalických zemin*) a sedmého (resp. sedmnáctého) sloupce (*halogeny*) periodické tabulky, např.: HCl, HF, NaCl, KI, ...

Prvky alkalických zemin mají o jeden elektron navíc (a ještě k tomu tlustej), proto se ho rády zbaví.

Halogeny mají o jeden elektron naniž (a ještě k tomu hubenej), proto jej rády přijmou.



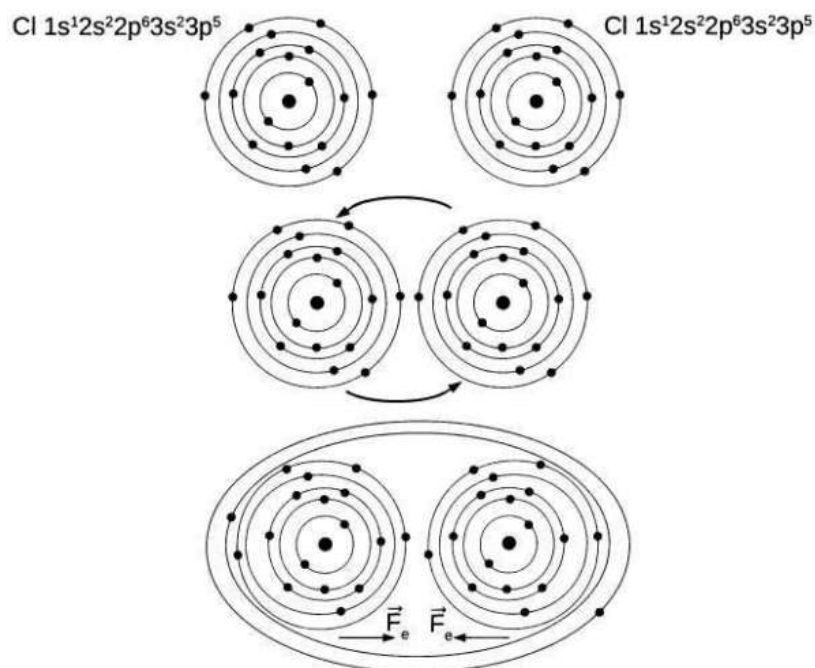
Obrázek 6.2: Vznik molekuly NaCl vytvořením iontové vazby mezi ionty Na⁺ a Cl⁻.

Poznámka: Iontové sloučeniny se rozpouštějí ve vodě (polární rozpouštědlo) ale nerozpouštějí se v organických (nepolárních) rozpouštědlech, např. benzínu.

- **kovalentní vazba**

Kovalentní vazba je sdílením valenčních elektronů mezi atomy molekuly (tzv. elektronový komunismus)

Vlivem sdílení elektronů dojde k deformaci elektronových orbitalů a tím i k vytvoření elektrostatických sil, které zajišťují stabilitu nově vzniklé molekuly.



Obrázek 6.3: Vznik kovalentní vazby mezi atomy chlóru.

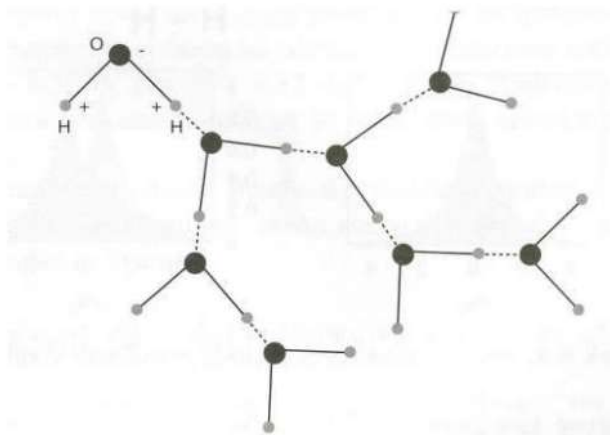
Poznámka: Sloučeniny s kovalentní vazbou se rozpouštějí v organických (nepolárních) rozpouštědlech, např. benzínu, ale nerozpouštějí se ve vodě - třeba jód I_2 .

- **van der Waalsova vazba**

Není chemickou vazbou v pravém slova smyslu

Vzniká z elektrostatického přitahování mezi naindukovanými dipóly mezi atomy/molekulami





Obrázek 6.4: Shluk molekul vody vázaných dipólovými interakcemi (čárkované linie).

U vody zvyšuje teplotu tání a varu. Gekon ji využívá pro šplhání po kluzkých površích.

- **kovová vazba**

Speciální typ kovalentní vazby, kdy jsou valenční elektrony sdíleny celým krystalem, nikoliv pouze atomy, které tvoří vazbu. Umožňuje kovům vést elektrický proud.

Více vizte v bodu **10.9 Blochův teorém a pásová struktura**

Meziatomový potenciál

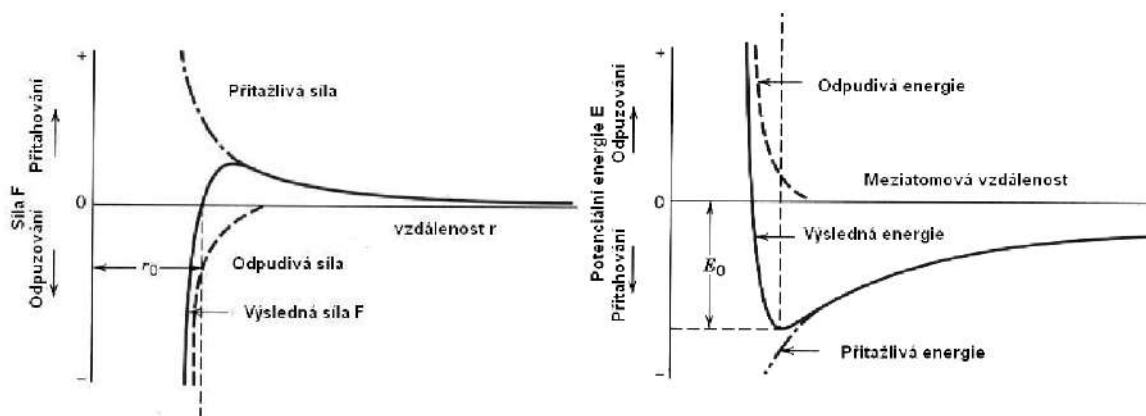
- **Lenard-Jonesův potenciál**

Jedním z nejčastěji používaných jednoduchých meziatomových potenciálů jsou potenciály Lennard-Jonesovy, nejčastěji ve tvaru:

$$U(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

kde ε je hloubka energetického minima potenciálu. σ označuje vzdálenost, na které je meziatomový potenciál nulový a r je vzdálenost mezi atomy.

- První člen ($\sim 1/r^{12}$) popisuje elektrostatische odpuzování krátkého dosahu vlivem překryvu elektronových obalů.
- Druhý člen ($\sim 1/r^6$) je zodpovědný za přitažlivé působení dlouhého dosahu (například van der Waalovy síly).



Jaké vzdálenosti mezi atomy odpovídá minimum potenciálu r_0 ? Určíme ji jednoduše z nulovosti první derivace průběhu potenciálu:

$$\left. \frac{dU(r)}{dr} \right|_{r_0} = 4\epsilon \left[-\frac{12}{r_0} \left(\frac{\sigma}{r_0} \right)^{12} + \frac{6}{r_0} \left(\frac{\sigma}{r_0} \right)^6 \right] = 0$$

Snadnými úpravami dostaneme pro vzdálenost atomů ve stabilní konfiguraci

$$r_0 = \sqrt[6]{2}\sigma \approx 1,123\sigma.$$

Lennard-Jonesovy potenciály jsou vhodnou aproximací pro řadu aplikací, ale mají jednu nevýhodu. Pokud budeme řešit systém dvou atomů kvantově mechanicky, tj. řešit Schrödingerovu rovnici, nedostaneme analytické řešení, a problém je nutné řešit numericky.

- **Morseův potenciál**

$$U(r) = D \left(1 - e^{-a(r-r_0)} \right)^2$$

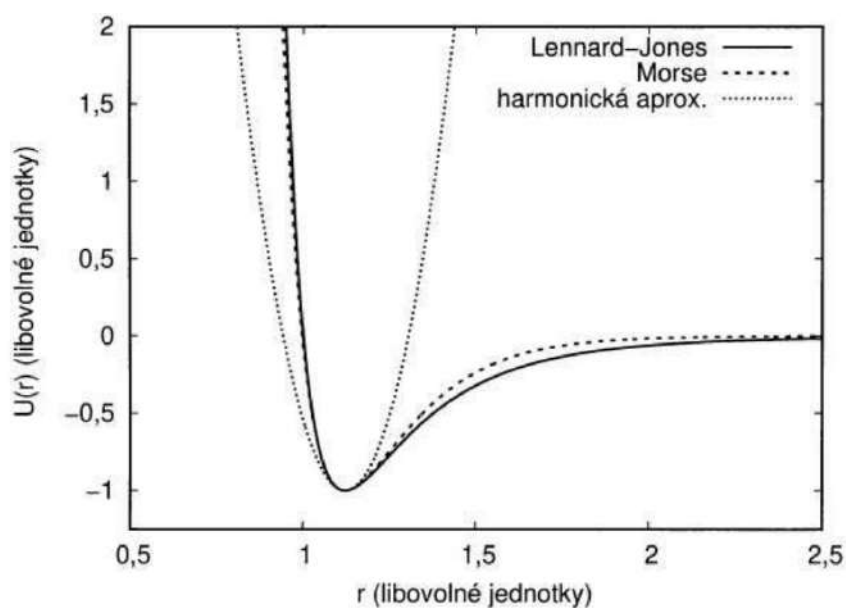
D označuje hloubku energetického minima, r je vzdálenost atomů, r_0 odpovídá vzdálenosti atomů v energetickém minimu a a určuje „šířku“ potenciálové jámy. Její hodnota je dána vztahem $a = \sqrt{k/2D}$, kde k je silová konstanta vazby v okolí minima potenciálu.

- **Harmonická aproximace**

Pokud se budeme zabývat potenciálem mezi atomy pouze v blízkosti minima ($r \sim r_0$), můžeme použít tzv. harmonickou aproximaci. Potenciál v okolí jeho minima popíšeme pomocí kvadratické funkce

$$U(r) = U_0 + \frac{1}{2}k(r - r_0)^2$$

kde k je silová konstanta vazby mezi atomy. Pro velké odchylky od r_0 je tato aproximace velmi nepřesná, pro svou jednoduchost se přesto používá ke studiu základního stavu molekul.



Obrázek 2.15: Grafické srovnání Lennard-Jonesova a Morseova potenciálu a harmonické (parabolické) aproximace.

10.4 Popis symetrie molekul a krystalů pomocí grup, kvazi-krystaly.

- *SYMETRIE* = „soulměrnost“,
symetrický objekt je invariantní vůči speciálním geometrickým transformacím - operacím symetrie

- *PRVEK A OPERACE SYMETRIE*

PRVEK SYMETRIE	Symbol	OPERACE SYMETRIE	Symbol
rovina zrcadlení	σ	zrcadlení, reflexe	Σ
střed inverse	i	inverse	I
(vlastní) osa rotace	c_n	rotace kolem c_n	C_n
nevlastní osa rotace	s_n	rotace kolem s_n s následnou reflexí na rovině kolmé k s_n	S_n
		identita	E

Indexy v rovinách zrcadlení $\sigma_v, \sigma_h, \sigma_d$ určují jejich orientaci (vertikální, horizontální, dihedrální)

- *BODOVÁ A PROSTOROVÁ GRUPA*

– grupa = „svazek množiny a binární operace na ní“

Kde binární operace musí splňovat:

- 1) pro $a, b \in G$, ab taky $\in G$... je definováno násobení prvků (uzavřenost grupy)
- 2) $(ab)c = a(bc)$... asociativita násobení prvků
- 3) $ea = a$ pro $\forall a \in G$... existence jednotkového prvku (E)
- 4) $a^{-1}a = e$ pro $\forall a \in G$... existence inverzního prvku (a^{-1})

– **bodová grupa:** nechává alespoň jeden bod v prostoru nehybný

BODOVÁ GRUPA	Prvky symetrie	Prvky symetrie (název)
C_1	E	identita
C_i	i	střed inverse
C_s	σ	rovina zrcadlení
C_n	C_n	rotace kolem n -četné osy c_n
$C_n \sigma_v$	$C_n + n\sigma_v$	C_n složená s n -násobným vertikálním zrcadlením
$C_n \sigma_h$	$C_n + \sigma_h$	C_n složená s n -násobným horizontálním zrcadlením
D_n	$C_n + nC_2$	C_n složená s n -násobnou rotací podle C_2 kolmé na C_n
$D_n \sigma_h$	$D_n + n\sigma_v + \sigma_h$	D_n složená s n -násobným vertikálním zrc. a s horizontálním zrc.
$D_n \sigma_d$	$D_n + n\sigma_d$	D_n složená s n -násobným dihedrálním zrcadlením
T_d		molekula má symetrii tetraedru
O_h		molekula má symetrii krychle nebo oktaedru
I_h		molekula má symetrii koule

– **prostorová grupa:** popisuje symetrii krystalů

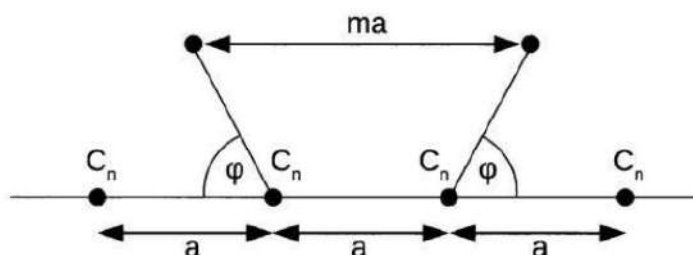
Prvky a operace symetrie obohaceny o translaci (opakování elementárního motivu přesunováním + operacemi symetrie)

Quasikrystaly

„pevná látka, jejíž strukturní jednotky jsou uspořádané, nikoliv však periodicky”

- „normální krystaly”

U „normálních periodických” krystalů jsou povoleny pouze jisté vybrané četnosti rotačních os plynoucí ze vztahu pro translační symetrii:



Obrázek 3.2: Přítomnost prvku symetrie translace omezí četnosti možných rotačních os. Pokud je splněna translační symetrie, musí vzdálenost atomů podrobených rotaci o úhel φ (rotační osa C_n) být celočíselným násobkem translační periody a .

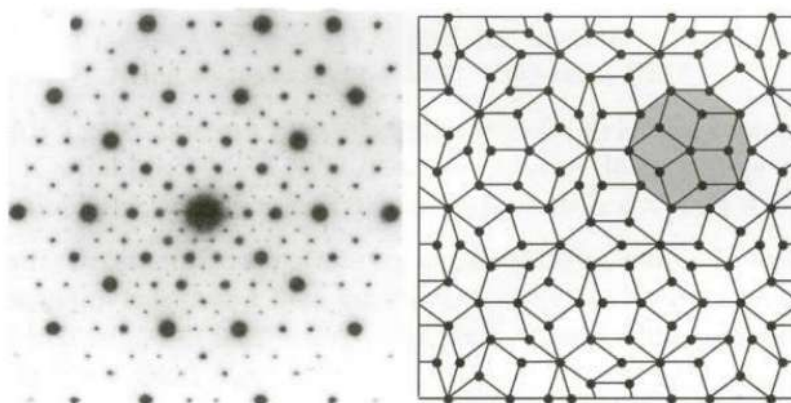
$$\cos(\varphi) = \frac{m-1}{2}, \quad \left| \frac{m-1}{2} \right| \leq 1$$

Tabulka 3.1: Povolené četnosti os v základní buňce (s translací)

m	četnost	symbol	φ
-1	2	C_2	180°
0	3	C_3	120°
1	4	C_4	90°
2	6	C_6	60°
3	1	C_1	$0; 360^\circ$

- quasikrystaly

U quasikrystalů jsou povoleny i další osy symetrie, např. desetičetná či pětičetná (vizte obrázek):



Obrázek 3.58: Difrakční záznam kvazikrystalu (vlevo) s desetičetnou symetrií. Rozložení atomů v přímém prostoru je zobrazeno vpravo.

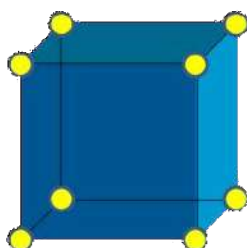
10.5 Krystalová struktura látek, základní typy mříží, prostorové grupy.

Elementární buňka

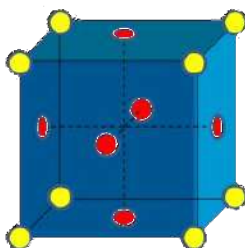
Nejmenší jednotka krystalické struktury.

Podle obsazení krystalické mříže se dělí na:

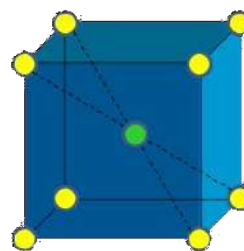
- prosté (primitivní) buňky SC
- mřížové body jsou jen v rozích hran (minimální objem)
- centrované buňky
 - plošně centrované buňky FC - mřížové body jsou v rozích hran a ve středech stěn
 - prostorově centrované buňky BC - mřížové body jsou jen v rozích hran a jeden je v průsečíku tělesových úhlopříček



SCC - primitivní kubická mříž



FCC - plošně centrovaná



BCC - prostorově centrovaná

krystalová mříž = „lešení atomu“

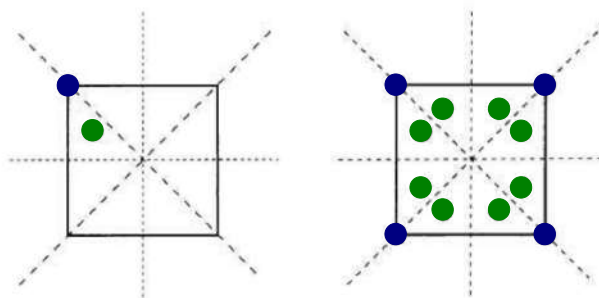
Množina abstraktních bodů, pomocí nichž se popisuje struktura krystalu. Vystihuje translační periodicitu krystalické struktury.

- struktura krystalu = prostorové uspořádání atomů v krystalu (mříž+hmotná báze)
- elementární mříž = základní geometrický motiv, jehož opakováním získáme krystalovou mříž

hmotná báze

= způsob, jakým jsou v krystalické mříži rozmístěny atomy

Pozor! Atomy nelze z důvodů symetrie elementární mříže umístit do mříže libovolně!

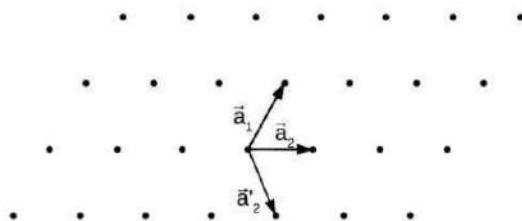


Obrázek 3.10: Symetrické polohy ve čtvercové mřížce. Operace symetrie zobrazí atomy umístěné do poloh na levém obrázku do všech symetricky ekvivalentních poloh – obrázek vpravo.

Bravaisova mříž

Nekonečná řada diskrétních (mřížových) bodů generovaná pomocí celočíselných lineárních kombinací vektorů elementární mříže

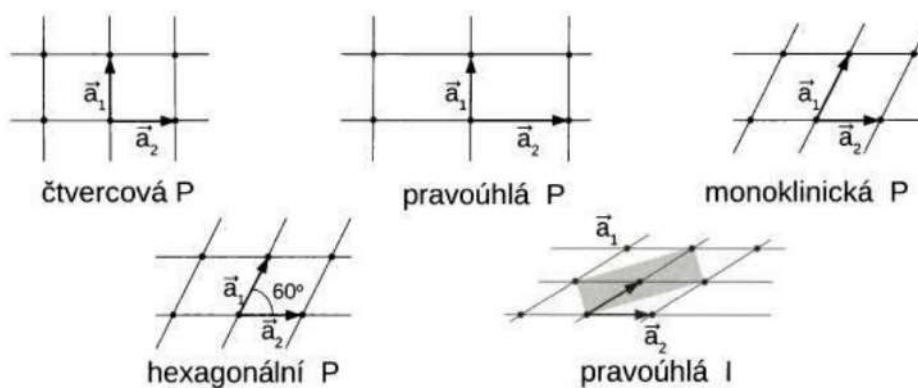
Ve 2D:



Obrázek 3.3: Volba elementární mříže pomocí vektorů \vec{a}_1 , \vec{a}_2 a \vec{a}'_2 .

Souřadnice každého z bodů na obrázku 3.3 lze zapsat pomocí lineární kombinace vektorů elementární mříže,

$$\vec{R} = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \quad \text{nebo} \quad \vec{R} = n\vec{a}_1 + m\vec{a}'_2, \quad n, m \in \mathbb{Z}. \quad (3.2)$$



Obrázek 3.4: Pět Bravaisových mříží ve 2D.

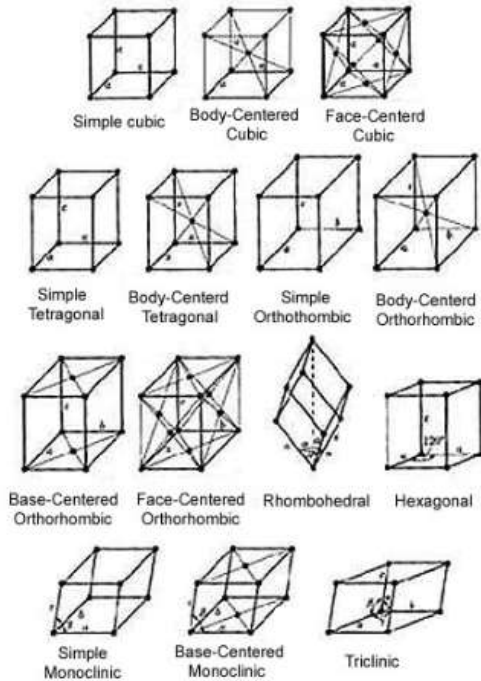
	2D	3D
krystalografické třídy	4	7
Bravaisovy mříže	5	14
bodové grupy mříží	10	32
prostorové grupy	17	230

Ve 3D:

$$\vec{R} = m\vec{a}_1 + n\vec{a}_2 + p\vec{a}_3 \quad m, n, p \in \mathbb{Z}$$

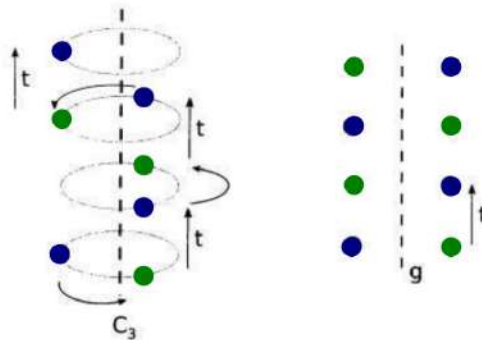
popis symetrie

Bravaisovy mřížky ve 3D



$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma$
triklinická	$P \quad C_1$
$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$
monoklinická	$P, A \quad C_{2h}$
$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
ortorombická	$P, A, I, F \quad D_{2h}$
$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
hexagonální	$P \quad D_{6h}$
$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ \neq 90^\circ$
trigonální	$R \quad D_{3d}$
$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
tetragonální	$P, I \quad D_{4h}$
$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
kubická	$P, I, F \quad O_h$

Platí: Každá prázdná mřížka různého typu příslušející dané soustavě, je Bravaisova mřížka



Obrázek 3.11: Složené prvky symetrie s translací. Vlevo – šroubová trojčetná osa. Otočení o 120° je následováno translací t . Vpravo – skluzová rovina. Po operaci zrcadlení je provedena operace translace t . Skluzová rovina se označuje písmenem g .

- **prostorová grupa:** popisuje symetrii krystalů

Prvky a operace symetrie obohaceny o translaci (opakování elementárního motivu přesunováním + operacemi symetrie)

- **translační symetrie** = invariance fyzikálních vlastností a struktury krystalu při periodickém posouvání elementární buňky

10.6 Experimentální studium struktury látek pomocí rtg. záření, difrakční podmínky, strukturní faktor.

Difrakce rentgenového záření

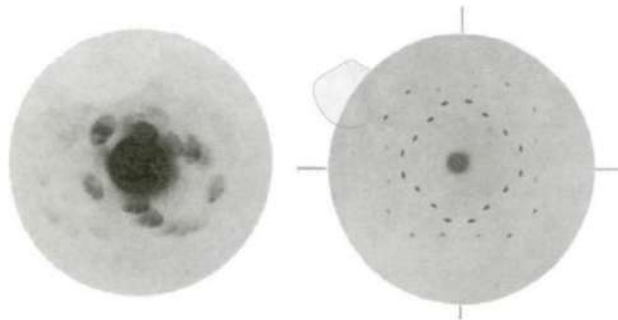
Pravidelné uspořádání atomů v krystalických látkách můžeme studovat nepřímo, pomocí ohybu vlnění. Potřebujeme, podobně jako v mikroskopu, vlnění/záření s vhodnou vlnovou délkou. Víme, že vzdálenosti atomů v látce jsou v řádu desetin nanometru, a pokud chceme pozorovat difrakční obraz, musíme mít záření o podobné vlnové délce - **rentgenové**.

Difrakce

difrakce = „ohyb vlnění/záření“

Využívá se pro nepřímé zkoumání periodicity uspořádání atomů v krystalických látkách

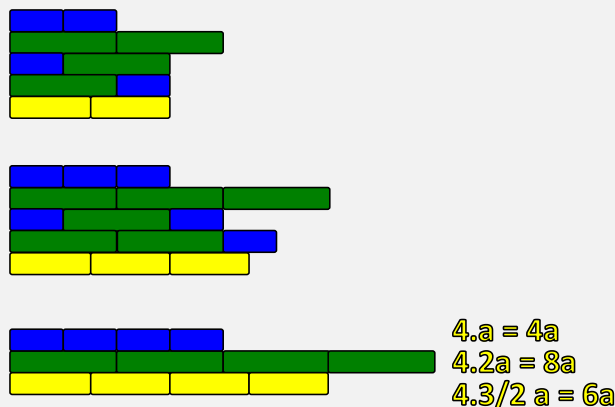
Pro pozorování difrakce potřebujeme použít vlnovou délku záření srovnatelnou s rozměry atomů, což jsou $\sim \text{\AA}$, tedy potřebujeme rentgenové záření



Obrázek 3.25: První záznam ohybu rtg. paprsků na krystalu (vlevo), vpravo záznam ohybu rtg. paprsků na krystalu ZnS. Převzato z [48].

Difrakční podmínky

- Laueho difrakční podmínky



Záření dopadá na řetízek atomů s periodou \vec{a} pod úhlem α_i a vychází pod úhlem α_f

Směr záření je popsán vlnovými vektory \vec{k}_i (dopadající), \vec{k}_f (odražený) paprsek

Velikost vlnových vektorů: $|\vec{k}_{i,f}| = \frac{2\pi}{\lambda}$

Klíčová myšlenka:

Abychom pozorovali nenulovou intenzitu záření ve směru \vec{k}_f , potřebujeme splnit podmínku konstruktivní interference

\Rightarrow dráhový rozdíl paprsků $d_f - d_i =$ celočíselný násobek vlnové délky λ

$$d_f - d_i = h\lambda$$

$$\frac{\vec{a} \cdot (\vec{k}_f - \vec{k}_i)}{\underbrace{|\vec{k}_f|}_{2\pi/\lambda}} = h\lambda$$

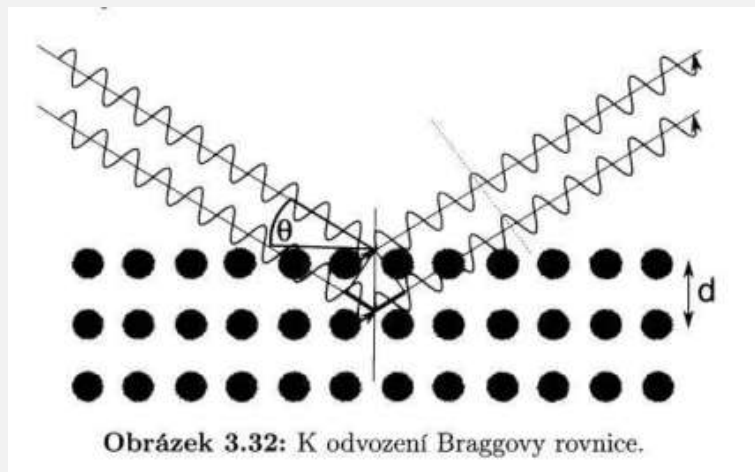
$$\vec{a} \cdot \vec{q} = 2\pi h \quad \text{kde } \vec{q} \text{ je tzv. rozptylový vektor, } h \in \mathbb{Z}$$

VE 3D máme krystalickou mřížku definovanou třemi vektory: $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ a pro každý z nich musí být splněna podmínka konstruktivní interference, tedy dostaneme:

$$\left. \begin{array}{l} \vec{a}_1 \cdot \vec{q} = 2\pi h \\ \vec{a}_2 \cdot \vec{q} = 2\pi k \\ \vec{a}_3 \cdot \vec{q} = 2\pi l \end{array} \right\} h, k, l \in \mathbb{Z}$$

Laueovy rovnice však řeší pouze směr difraktovaného záření, **neřeší intenzitu difraktovaných paprsků!!**

- Braggovy difrakční podmínky



Rentgenové záření dopadá na roviny atomů s mezirovinnou vzdáleností d pod úhlem θ a vychází **pod stejným úhlem** (tzv. symetrická difrakce na odraz)

Klíčová myšlenka:

Spodní paprsek musí oproti hornímu urazit delší vzdálenost (tlustá čára je vzdálenost navíc):

$$l = 2d \sin(\theta)$$

Opět musí platit podmínka konstruktivní interference, která má nyní tvar:

$$2d \sin(\theta) = n\lambda \quad \lambda \text{ vlnová délka použitého záření, } n \in \mathbb{Z}$$

Číslo n je řád difrakčního maxima. Tato rovnice umožňuje určit periodu d difrakční mřížky (tzv. mřížkovou konstantu).

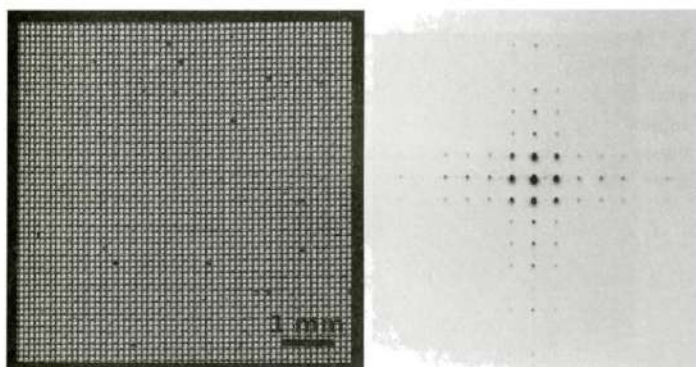
Braggova rovnice má pak tvar

$$2d_{h,k,l} \sin(\theta) = \lambda$$

kde $d_{h,k,l}$ značí mezivinnou vzdálenost rovin s indexy hkl (v přímém prostoru)

Opět však řeší pouze směr difraktovaného záření, **neřeší intenzitu difraktovaných paprsků!!**

- **Reciproký prostor** = „převrácený prostor“



Obrázek 3.27: Difrakce na mřížce – kovovém sítku (vlevo), difrakční obrazec po osvětlení laserovým ukazovátkem (vpravo).

Z matematického hlediska odpovídá difrakční obrazec Fourierově transformaci objektu, na kterém dochází k ohybu.

Symetrie původního objektu je v difrakčním obraze zachována.

Difrakční obrazec zobrazuje pouze to, co se v přímém obraze pravidelně opakuje, **souřadnice** bodů na difrakčním snímku tak odpovídají **frekvenci** opakování nějakého motivu.

Platí:

- Délky stran elementární buňky v přímém a v difrakčním obraze jsou **nepřímo úměrné**
- Poloha bodu v difrakčním obraze je dána vlnovým vektorem (rozměr m^{-1})
- Rozměr vlnového vektoru je reciproký (převrácený) a celočíselný lineární obal básových lineárních vektorů nazýváme **reciprokým prostorem**

- **Millerovy a difrakční indexy**

Jak již bylo uvedeno, jsou difrakční podmínky splněny v případě, že vektor \vec{q} je **vektorem reciproké mříže**, tj. můžeme jej vyjádřit ve tvaru

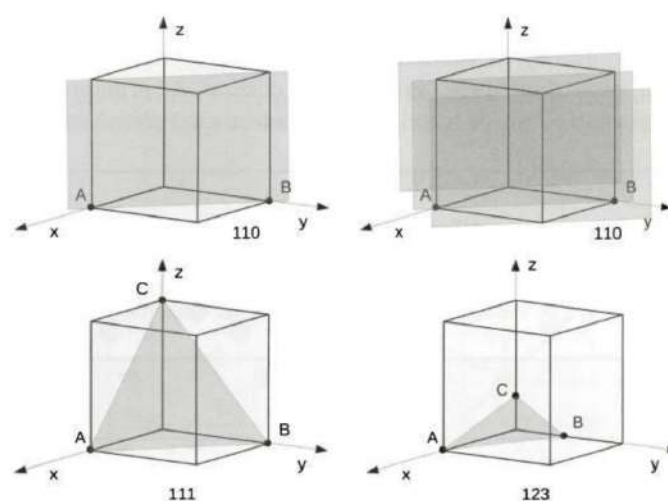
$$\vec{q} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 \equiv \vec{B}_{hkl}$$

V tomto případě označujeme vektor \vec{q} přívlástkem difrakční.

Jeden bod v reciprokém prostoru odpovídá v přímém prostoru osnově rovin vzdálených od sebe d_{hkl}

Indexy h, k, l se označují:

- **Millerovy indexy**, pokud jsou nesoudělnými čísly
- **difrakční indexy**, pokud jsou soudělnými čísly



Obrázek 3.31: Krystalové roviny pro indexy 110, 111 a 123 v kubické mříži

- **Laueho difrakční podmínky v reciprokém prostoru**

Pro vektory reciprokého prostoru \vec{b} musí platit podmínka ortogonality s vektory přímého prostoru \vec{a}

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$$

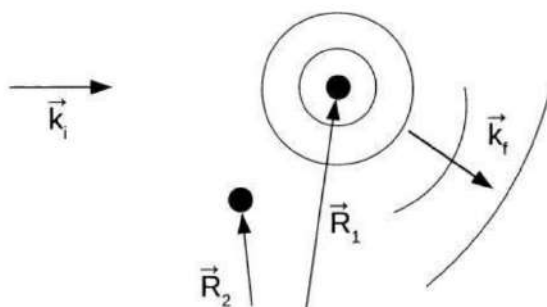
Vektory si můžeme rozepsat do složek:

$$\begin{aligned} \vec{a}_1 &= (x_1, y_1, z_1) & \vec{b}_1 &= (X_1, Y_1, Z_1) \\ \vec{a}_2 &= (x_2, y_2, z_2) & \vec{b}_2 &= (X_2, Y_2, Z_2) \\ \vec{a}_3 &= (x_3, y_3, z_3) & \vec{b}_3 &= (X_3, Y_3, Z_3) \end{aligned}$$

Celkem po odvozování z 9 rovnic 9 neznámých:

$$\begin{aligned} \vec{b}_1 &= 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \\ \vec{b}_2 &= 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \\ \vec{b}_3 &= 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \end{aligned}$$

Strukturní (rozptylový) faktor



Obrázek 3.46: Rozptyl záření na atomech v polohách \vec{R}_1 a \vec{R}_2 .

Amplituda rozptýlené vlny od n atomů je součtem příspěvků od jednotlivých atomů (rozptylových center).

$$F(\vec{q}) = \sum_n f_n(q) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}_n}$$

kde f_n je atomový rozptylový faktor od n atomů (závisející na velikosti rozptylového vektoru q)
Difrakce bude pozorována pouze při splnění difrakční podmínky:

$$\text{rozptylový vektor } \vec{q} = \vec{B}_{hkl} \quad \text{difrakční vektor}$$

Tedy po dosazení dostaneme:

$$F(\vec{B}_{hkl}) \equiv F_{hkl} = \sum_n f_n(q) e^{-i\vec{B}_{hkl} \cdot \vec{R}_n}$$

A pokud vyjádříme souřadnice atomů v tzv. zlomkových souřadnicích (x_n, y_n, z_n) , pak poloha mřížového bodu je popsána vektorem $\vec{R}_n = (x_n a, y_n a, z_n a)$ a platí $\vec{B}_{hkl} = \frac{2\pi}{a}(hkl)$

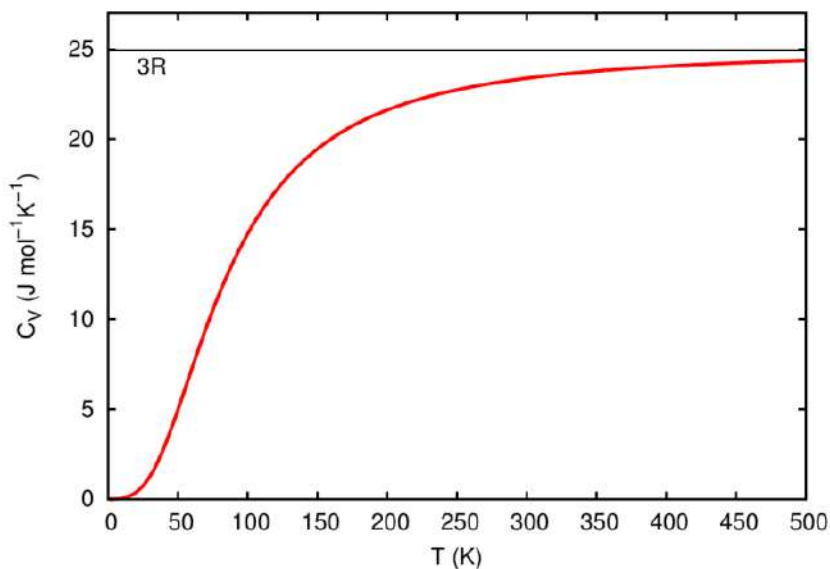
$$F_{hkl} = \sum_n f_n(hkl) e^{-i2\pi(hx_n + ky_n + lz_n)}$$

10.7 Einsteinův a Debyeův model vibrací atomů v kondenzovaných látkách.

Teroretická omáčka

Na přelomu 19. a 20. století byl experimentálně prokázán pokles měrné tepelné kapacity pevných látek pro nízké teploty. Představa atomů jako kvantových oscilátorů umožnila vysvětlit pozorovanou odchylku teplotních závislostí měrných tepel od Dulong-Petitova zákona.

Dulong-Petitův zákon



Einsteinův model

Einstein se zde inspiroval Planckovou kvantovou hypotézou podobně jako v případě objasnění fotoefektu.

Vibrující atomy jsou v Einsteinově představě kvantové lineární harmonické oscilátory s energií

$$E_n = \hbar\omega_E \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

kde ω_E je (Einsteinova) frekvence, na které atomy vibrují, a n je kvantové číslo. Einstein předpokládá, že atomy - oscilátory - **kmitají všechny na jedné jediné frekvenci** ω_E .

Pravděpodobnost, že vibrující atom je při teplotě T ve stavu s energií E_n je úměrná

$$p_n \sim e^{-\frac{E_n}{k_B T}}$$

Součet těchto pravděpodobností musí být roven jedné,

$$\frac{1}{Z} \sum_n p_n = \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\frac{E_n}{k_B T}} = 1$$

Z je tzv. stavová, partiční suma

Pokud za E_n dosadíme energie kvantového harmonického oscilátoru a sumaci provedeme od 0 do ∞ , dostaneme Z ve tvaru součtu nekonečné geometrické řady

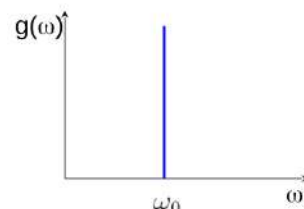
$$Z = e^{-\frac{\hbar\omega_E}{2k_B T}} \frac{1}{1 - e^{-\frac{\hbar\omega_E}{k_B T}}}.$$

Ze stavové sumy Z můžeme určit střední energii vibrujících atomů derivováním logaritmu stavové sumy podle $\beta = 1/k_B T$. Střední energie vibrací v pevné látce dle Einsteinova modelu je rovna

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial Z}{\partial \beta} = \hbar \omega_E \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega_E \beta T}{k^2}} + 1} \right),$$

kde první člen v závorce odpovídá nulovým kmitům a druhý člen je faktor Bose-Einsteinova rozdělení. Měrná tepelná kapacita je definována derivací střední energie podle teploty,

$$C_V = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = 3N_A k_B \left(\frac{\hbar \omega_E}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\frac{\hbar \omega_E}{k_B T}}}{\left(e^{\frac{\hbar \omega_E}{k_B T}} - 1 \right)^2}$$



kde jsme určili měrné teplo na jeden mol.

Pro vysoké teploty ($T \rightarrow \infty$, tj. $\frac{1}{k_B T} \rightarrow 0$) je měrné teplo jednoho molu rovno $C_V = N_A k_B = R$, což je v souladu s Dulong-Petitovým zákonem. V limitě nízkých teplot ($T \rightarrow 0$, tj. $\frac{1}{k_B T} \rightarrow \infty$) je měrné teplo úměrné exponenciále $e^{-\frac{\hbar \omega_E}{k_B T}}$

$$C_V = N_A k_B \frac{\left(\frac{\hbar \omega_E}{k_B T} \right)^2}{e^{\frac{\hbar \omega_E}{k_B T}}}.$$

Einsteinův model selhává pro teploty blízké absolutní nule, kde experimentální závislost měrné tepelné kapacity je úměrná T^3

Debyeův model

$$C_V = 9N_A \frac{\hbar^5}{\theta_D^3 k_B^4 T^2} \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^4 e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T}}}{\left(e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T}} - 1 \right)^2} d\omega$$

Nyní použijeme substituci $x = \frac{\hbar \omega}{k_B T}$ a po úpravách dostaneme integrál pro výpočet měrného tepla C_V jednoho molu atomů dle Debyeova přiblížení,

$$C_V = 9N_A k_B \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\frac{\theta_D}{T}} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx$$

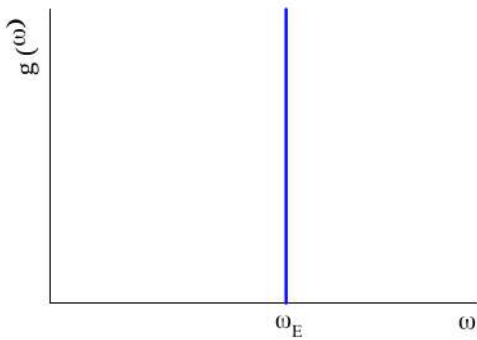
Podívejme se na limitní případy Debyeova modelu pro vysoké a nízké teploty. V limitě vysokých teplot ($T \rightarrow \infty$) bude horní integrační mez malá (Debyeova teplota θ_D dosahuje hodnot stovek Kelvinů), proto můžeme nahradit exponenciály v integrandu 5.2.4 Taylorovým rozvojem,

$$C_V(T \rightarrow \infty) = 9N_A k_B \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\frac{\theta_D}{T}} \frac{x^4(1+x)}{x^2} dx \doteq 3N_A k_B \quad \dots \text{odpovídá Dulong-Petitovu zákonu}$$

V limitě nízkých teplot ($T \rightarrow 0$) lze nahradit horní mez integrace nekonečnem.

$$C_V(T \rightarrow 0) = 9N_A k_B \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\infty} \frac{x^4(1+x)}{x^2} dx = 9N_A k_B \frac{4\pi^4}{15} \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \dots \text{odpovídá úměrnosti } T^3$$

Vibrace jader atomů v krystalové mříži – fonony – měrné teplo

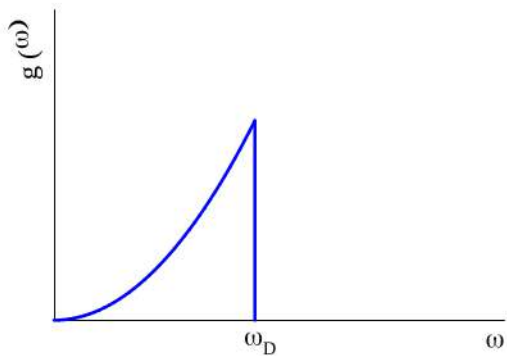


Einsteinův model

$$\omega_b(\vec{k}) = \omega_E \text{ pro } \forall bk$$

$$\theta_E \equiv \frac{\hbar\omega_E}{k_B} \quad \text{Einsteinova teplota}$$

dobré přiblížení např. pro optické fonony



Debyeův model

$$\omega_b(\vec{k}) = c|k| \quad \forall bk$$

$$\theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B} \quad \text{Debyeova teplota}$$

dobré přiblížení např. pro akustické fonony

10.8 Molekulové orbitály, metoda LCAO, hybridizace orbitalů.

Molekulové orbitály

Už víme, že molekulové orbitály vznikají z atomových orbitalů. Lze je charakterizovat následujícími vlastnostmi:

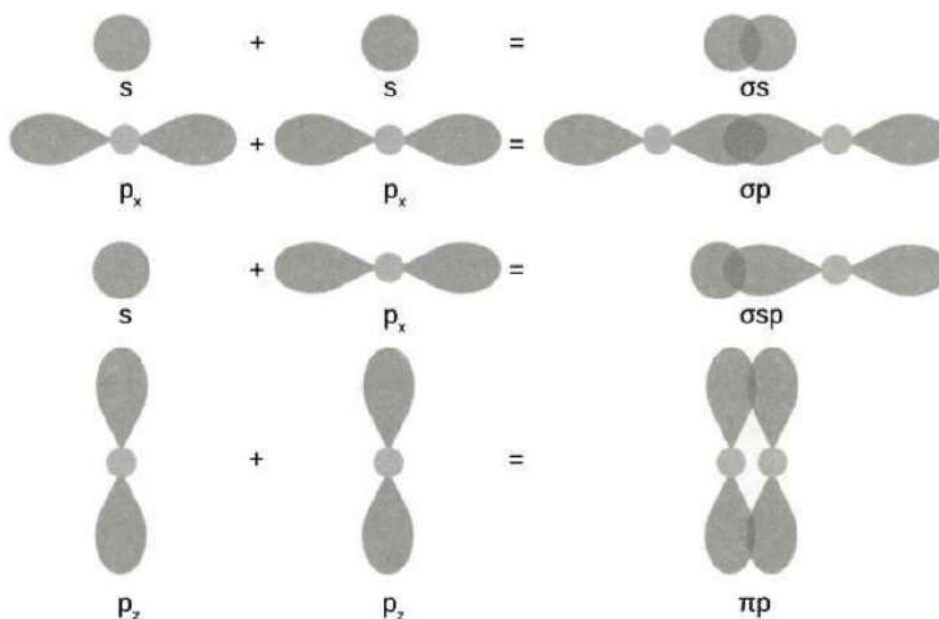
- vznikají lineární kombinací atomových orbitalů

$$\Psi_{H_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_A(\vec{r}_1) \Psi_B(\vec{r}_2) \pm \Psi_A(\vec{r}_2) \Psi_B(\vec{r}_1))$$

- jsou delokalizovány přes více atomů
- mají jinou energii a jiné rozložení náboje (symetrii) než původní atomové orbitály

Aby vznikl molekulový orbital, musí příslušné atomové orbitály splňovat následující podmínky:

- atomové orbitály musí mít podobnou energii
- na vznik molekulového orbitalu je potřeba dostatečný překryv atomových orbitalů
- atomové orbitály musí mít vhodnou symetrii (viz obr. 6.9).



Obrázek 6.9: Nákres vzniku molekulových orbitalů typu σ (vazebné elektrony se nacházejí na spojnici mezi atomy) překryvem atomových orbitalů $s - s$, $p_x - p_x$ a $s - p_x$. Poslední obrázek odpovídá molekulovému π orbitalu vzniklému překryvem p_z atomových orbitalů. U molekulového orbitalu typu π se vazebné elektrony nacházejí podél spojnice těch atomů, které se účastní vazby.

→ vznikne tolik molekulových orbitalů (MO), kolik bylo původních AO

2 atomy... Ψ_A Ψ_B



$$\begin{aligned} \Psi_1 &\sim \Psi_A + \Psi_B \\ \Psi_2 &\sim \Psi_A - \Psi_B \end{aligned}$$

$$S \sim \int \Psi_A \Psi_B^* dV$$

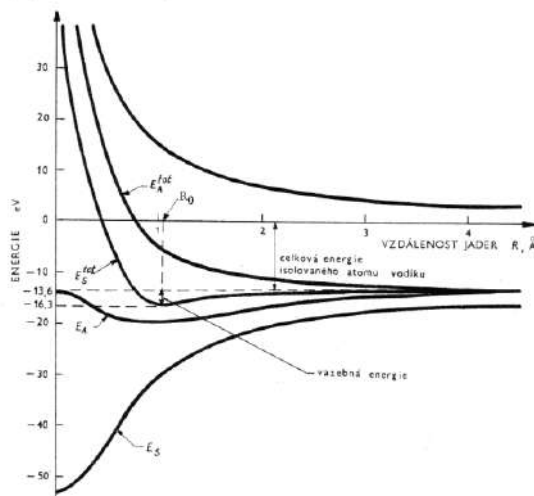
překryvový integrál

LCAO

LCAO – Linear Combination of Atomic Orbitals (aproximace)

výchozí stav – 2 atomy H daleko od sebe
a ty pak přibližují

$$R \rightarrow \infty \quad \Psi_{A1s} \quad \Psi_{B1s}$$



Elektronová struktura molekul – molekula H_2^+

$$H_{el} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e'^2}{r_A} - \frac{e'^2}{r_B} \quad |A\rangle = \Psi_{A1s} = (\pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{r_A}{a_0}}$$

$$|B\rangle = \Psi_{B1s}$$

$$|\Psi\rangle = C_A|A\rangle + C_B|B\rangle \quad \leftarrow \text{LCAO}$$

$$E = \frac{\langle \Psi | H_{el} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{C_A^2 H_{AA} + 2C_A C_B H_{AB} + C_B^2 H_{BB}}{C_A^2 S_{AA} + 2C_A C_B S_{AB} + C_B^2 S_{BB}}$$

pro 1s vlnové funkce platí: $\Psi_{A1s} = \Psi_{A1s}^*$ $\Psi_{B1s} = \Psi_{B1s}^*$

$$S_{XY} = \langle X | Y \rangle \quad S_{AA} = \int |\Psi_A|^2 d^3r = 1 \quad S = S_{AB} = S_{BA} = \int \Psi_A \Psi_B d^3r$$

$$S_{BB} = \int |\Psi_B|^2 d^3r = 1 \quad \text{překryvový integrál}$$

$$H_{XY} = \langle X | H_{el} | Y \rangle \quad S(R') = \left(1 + R' + \frac{R'^2}{3}\right) e^{-R'}$$

Elektronová struktura molekul – molekula H_2^+

$$H_{XY} = \langle X | H_{el} | Y \rangle$$

$$H_{AA} = \int \Psi_A^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e'^2}{r_A} - \frac{e'^2}{r_B} \right) \Psi_A = E_{1s} - \int \Psi_A^* \frac{e'^2}{r_B} \Psi_A = H^C$$

$$H_{AB} = \int \Psi_A^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e'^2}{r_A} - \frac{e'^2}{r_B} \right) \Psi_B = H^x$$

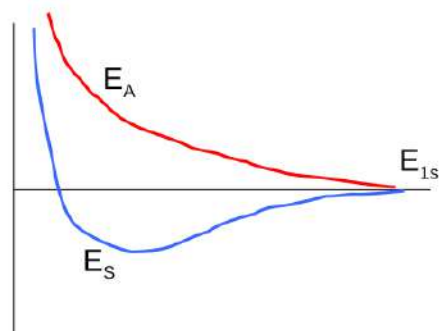
minimalizace energie vůči C_A, C_B

$$E = \frac{H^C \pm H^x}{1 \pm S} + \frac{e'^2}{R_{AB}}$$

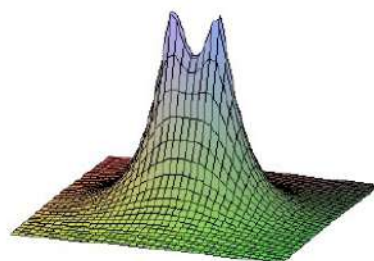
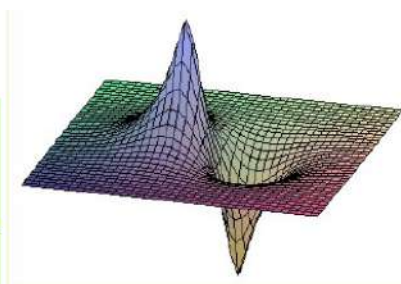
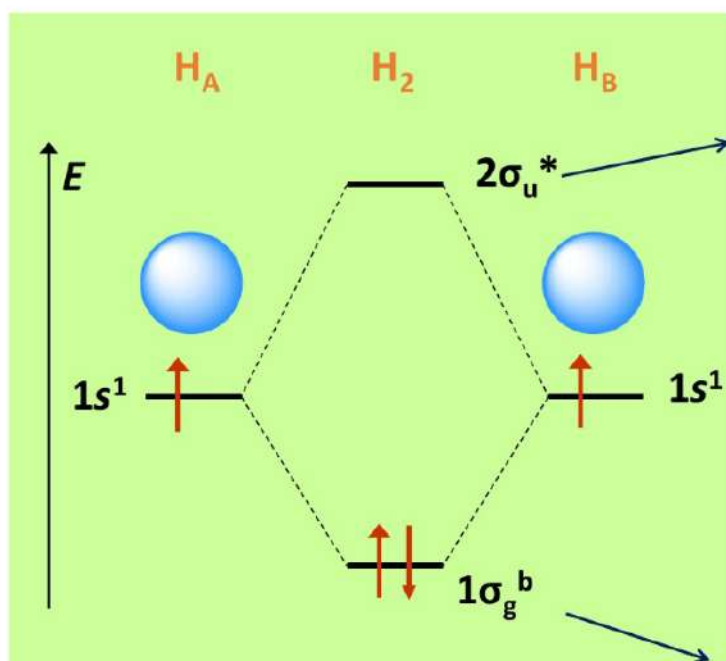
$$C_{A\pm} = \pm C_{B\pm} = \frac{1}{\sqrt{2 \pm 2S}}$$

$$\Psi_+ = \Psi_S = \Psi_g = \frac{1}{\sqrt{2 + 2S}} (\Psi_A + \Psi_B)$$

$$\Psi_- = \Psi_A = \Psi_u = \frac{1}{\sqrt{2 - 2S}} (\Psi_A - \Psi_B)$$



Elektronová struktura molekul



18

LCAO:

- kvantitativně ne zcela přesná
- + dobrý kvalitativní popis
- + zobecnění pro mnohoatomové molekuly

Hybridisace

Chemické vazby se účastní elektronové orbitály s nespárovanými elektrony.

Na základě této představy ale nedokážeme vysvětlit existenci sloučenin, jako je metan CH_4 ani čtyřvaznost uhlíku (měl by být dvojjvazný) a celou organickou chemii.

Nedokážeme vysvětlit ani existenci sloučenin jako BeH_2 či BH_3

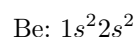
Řešení je připustit lineární kombinace orbitalů (s , p , d , ...). Takto vzniklé (kombinované) orbitály nazýváme jako **hybridní**. Hybridní orbitály vznikají právě tehdy, když je jejich uspořádání **energeticky výhodnější**, než uspořádání původních orbitalů

3 nejnámější hybridní orbitály: sp , sp^2 , sp^3 (kde číslo značí počet elektronů v daném orbitalu)

- **hybridisace sp**

Představíme si na molekule BeH_2

Elektronová konfigurace atomu berylia je



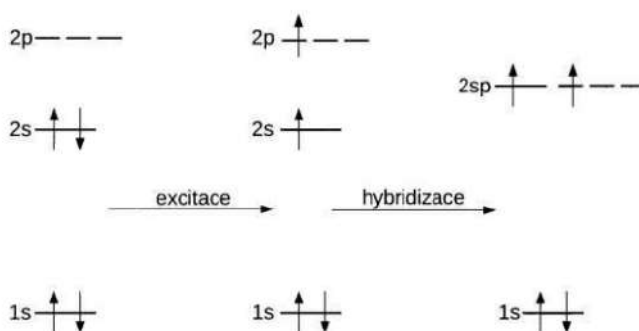
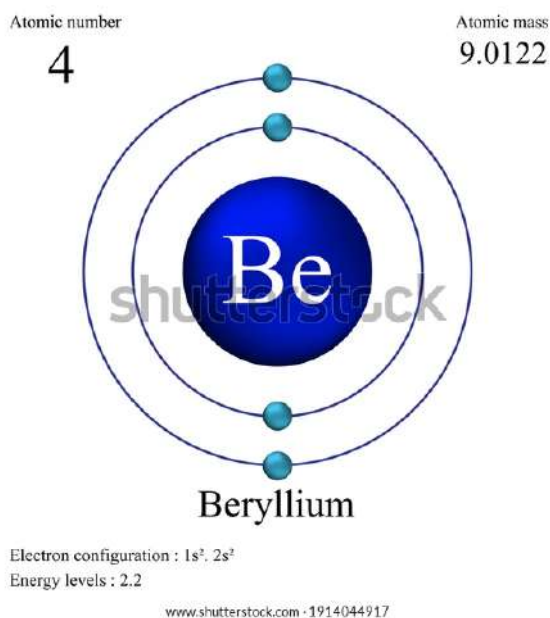
Jeho s orbitály jsou tak zcela zaplněné. Pro Be je tak energeticky výhodné excitovat jeden $2s$ elektron do $2p$ orbitalu.

Poté dojde k energetickému sjednocení $2s$ a $2p$ za vzniku **hybridního $2sp$** , který může být obsazen až 8 elektrony! A to se vyplatí!

Nově vzniklý orbital je definován vlnovou funkcí:

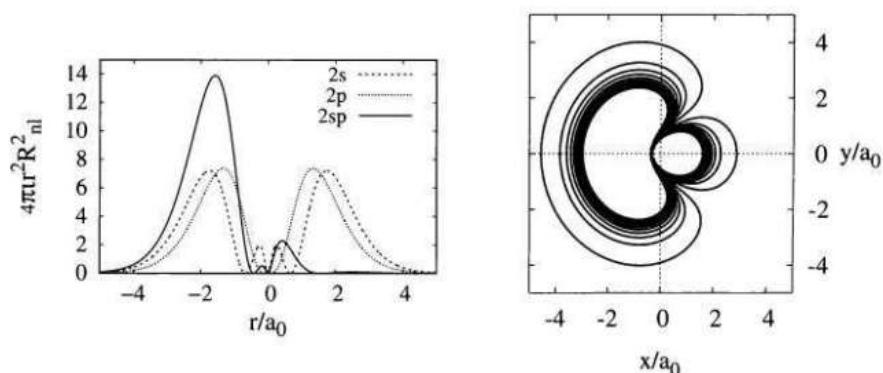
$$\psi_{sp} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{2s} \pm \psi_{2p_z})$$

kde jsme ze tří orbitalů $2p$ z $m = \{-1, 0, 1\}$ vybrali $2p_z$ ($m = 0$)



Obrázek 6.14: Hybridizace elektronových orbitalů $2s$ a $2p$ u atomu berylia. Nejdříve dojde k excitaci jednoho $2s$ elektronu na hladinu $2p$ a poté k vytvoření hybridního orbitalu $2sp$.

Hybridní orbital má jinou symetrii než původní atomové orbitály!

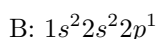


Obrázek 6.15: Vlevo: Radiální elektronová hustota orbitalů $2s$, $2p_z$ a hybridního orbitalu $2sp$. Vpravo: Elektronová hustota daná $|\psi_{sp}|^2$ dle vztahu 6.35 pro kladné znaménko.

- hybridisace sp^2

Představíme si na molekule BH_3

Elektronová konfigurace atomu boru je

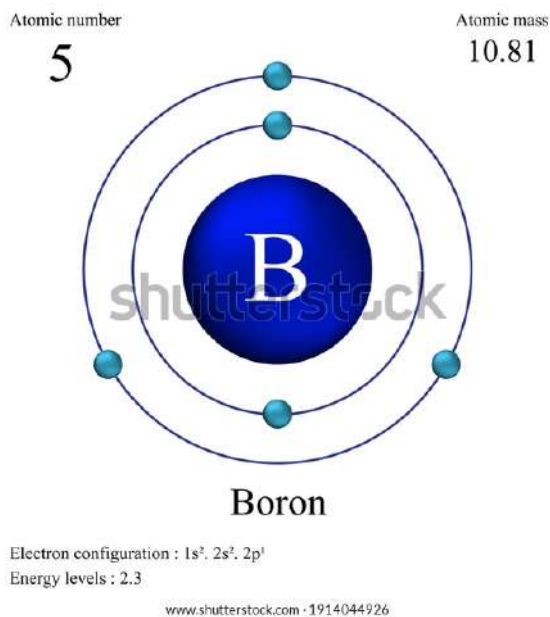


Jelikož se chemické vazby zúčastňují jen nespárované elektrony, mohl by bór tvořit pouze jednovazné sloučeniny.

Označení sp^2 odpovídá počtu elektronů v s a p orbitalech, které tvoří hybridní orbital.

V hybridním orbitalu jsou tak k dispozici pro chemickou vazbu 3 nespárované elektrony.

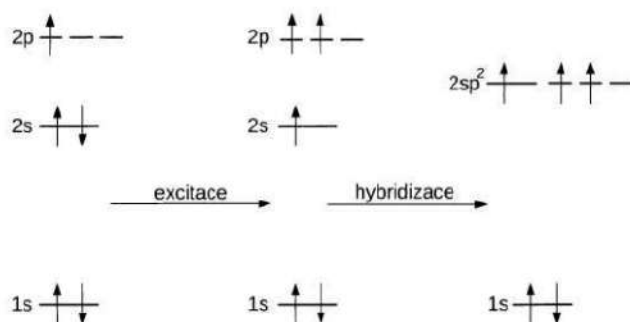
Vlnové funkce hybridního orbitalu budeme opět hledat jako lineární kombinaci atomových orbitalů $2s$, $2p_z$ a například $2p_x$



$$\psi_{sp^2,1} = a_s \psi_{2s} + a_{pz} \psi_{2s} + a_{px} \psi_{2p_x}$$

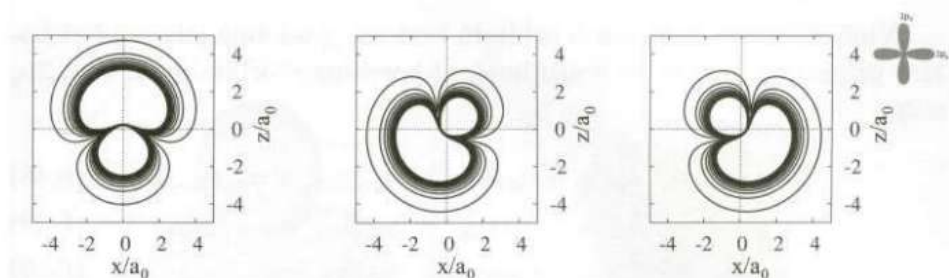
$$\psi_{sp^2,2} = b_s \psi_{2s} + b_{pz} \psi_{2s} + b_{px} \psi_{2p_x}$$

$$\psi_{sp^2,3} = c_s \psi_{2s} + c_{pz} \psi_{2s} + c_{px} \psi_{2p_x}$$



Obrázek 6.16: Hybridizace elektronových orbitalů $2s$ a $2p$ u atomu bóru. Jako v případě sp orbitalu, dojde nejdříve k excitaci jednoho $2s$ elektronu na hladinu $2p$ a poté k vytvoření hybridního orbitalu $2sp^2$.

U sp^2 nám vzniká nový typ symetrie, kterou původní orbitály neměly - trojčetná symetrie!

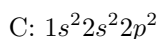


Obrázek 6.17: $|\psi_{sp^2,i}|^2$ funkcí dle vztahů 6.45–6.47. Na rozdíl od atomových $2p$ orbitalů, které jsou na sebe kolmé (viz vložený obrázek vpravo nahoře), máme tři orbitály s trojčetnou symetrií.

• hybridizace sp^3

Představíme si na molekule CH_4

Elektronová konfigurace atomu uhlíku je

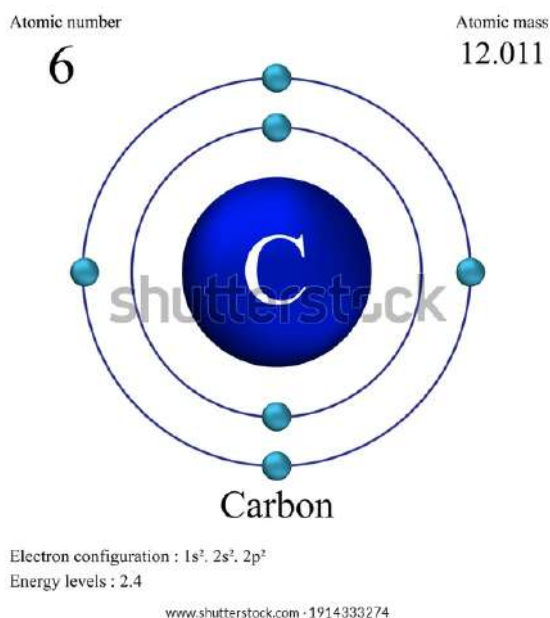


Je pro něj energeticky výhodnější vytvořit hybridní orbital sp^3 .

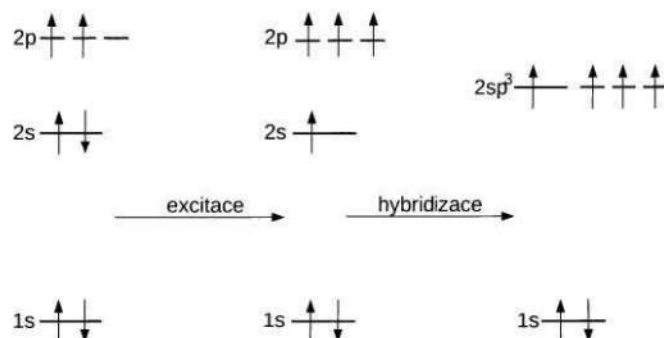
Díky tomu má k vazbě k dispozici 4 nes párované elektrony a díky tomu je uhlík čtyřvazný, což umožňuje vznik organických sloučenin.

Vlnové funkce hybridních orbitalů bychom jako v předchozích případech hledali ve tvaru lineární kombinace orbitalů $2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z$.

Kde opět požadujeme, aby funkce $\psi_{sp^3,i}$ byly normované a ortogonální.

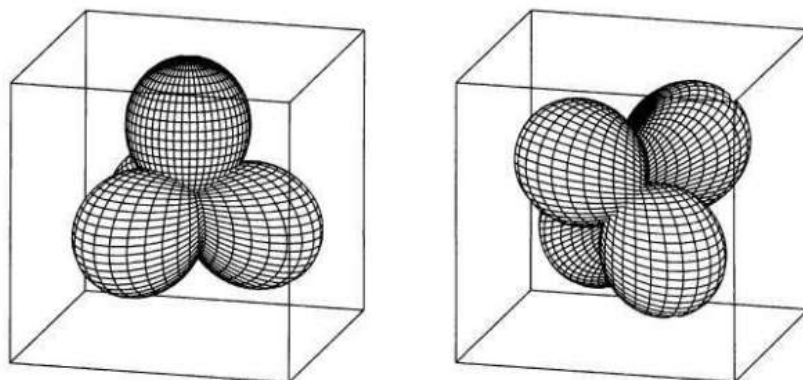


$$\begin{aligned} \psi_{sp^3,1} &= a_s \psi_{2s} + a_{pz} \psi_{2p_z} + a_{px} \psi_{2p_x} + a_{py} \psi_{2p_y} \\ \psi_{sp^3,2} &= b_s \psi_{2s} + b_{pz} \psi_{2p_z} + b_{px} \psi_{2p_x} + b_{py} \psi_{2p_y} \\ \psi_{sp^3,3} &= c_s \psi_{2s} + c_{pz} \psi_{2p_z} + c_{px} \psi_{2p_x} + c_{py} \psi_{2p_y} \\ \psi_{sp^3,4} &= d_s \psi_{2s} + d_{pz} \psi_{2p_z} + d_{px} \psi_{2p_x} + d_{py} \psi_{2p_y} \end{aligned}$$



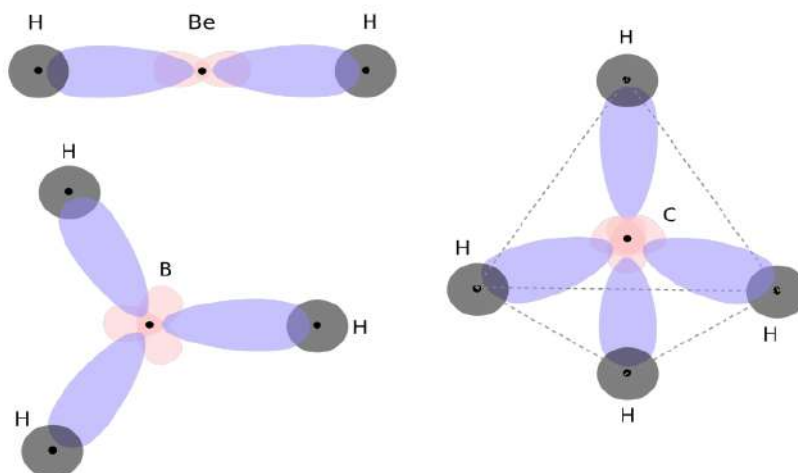
Obrázek 6.18: Hybridizace elektronových orbitalů $2s$ a $2p$ u atomu uhlíku. Jako v případě sp a sp^2 orbitalů, dojde nejdříve k excitaci jednoho $2s$ elektronu na hladinu $2p$ a poté k vytvoření hybridního orbitalu $2sp^3$.

Prostorové rozložení náboje je opět jiné než u původních atomových orbitalů $2s$ a $2p$



Obrázek 6.19: Rozložení konstantní hodnoty elektronové hustoty $\psi_{sp^3,i}$ hybridního orbitalu sp^3 dle funkcí 6.52–6.55 (vlevo) a 6.56–6.59 (vpravo). Na rozdíl od atomových $2p$ orbitalů, které jsou na sebe kolmé, svírají jednotlivé „laloky“ sp^3 orbitalů úhel $109,5^\circ$.

Tvary všech tří zmíněných hybridisovaných orbitalů jsou na následujícím obrázku:



Obrázek 6.20: Schématické zobrazení tvarů molekul tvořených hybridními orbitaly – BeH_2 ($2sp$ orbital), BH_3 ($2sp^2$ orbital) a CH_4 ($2sp^3$ orbital).

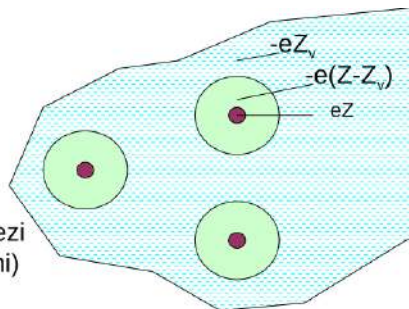
10.9 Model volných a téměř volných elektronů, pásová struktura pevných látek, Blochův teorém.

Model volných elektronů

Drudeho model

Drudeho model

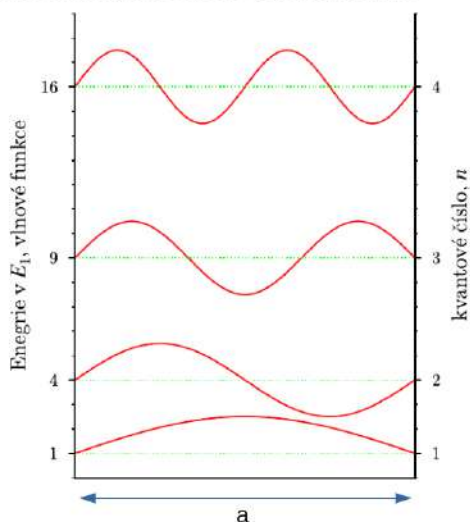
- elektrony se mezi srážkami pohybují volně (není e-e interakce a interakce s kladným zbytkem)
- neustálé srážky (s jádry) - změny rychlosti elektronů
- pravděpodobnost srážky $\sim 1/\tau$ (τ = doba mezi srážkami)
- tepelná rovnováha díky srážkám (rychlost e- daná teplotou v místě srážky)



kov: valenční elektrony
→ vodivostní elektrony

- + el. vodivost, Ohmův zákon, Hallův jev
vztah el. a tepelné vodivosti (Wiedemann-Franz)
- měrné teplo $C \ll \frac{3}{2} Nk_B$

volné elektrony v nekonečně potenciálové jámě

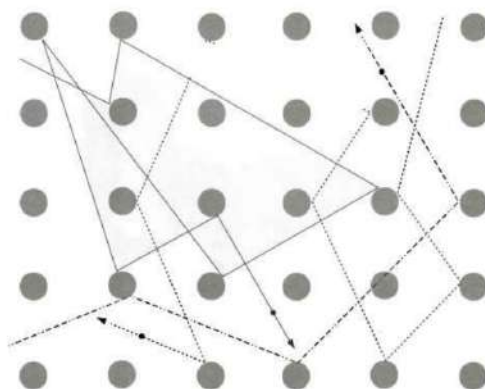


$$H\psi_n = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2\psi_n}{dx^2} = E_n\psi_n$$



$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}, \quad n = 1, 2, \dots$$

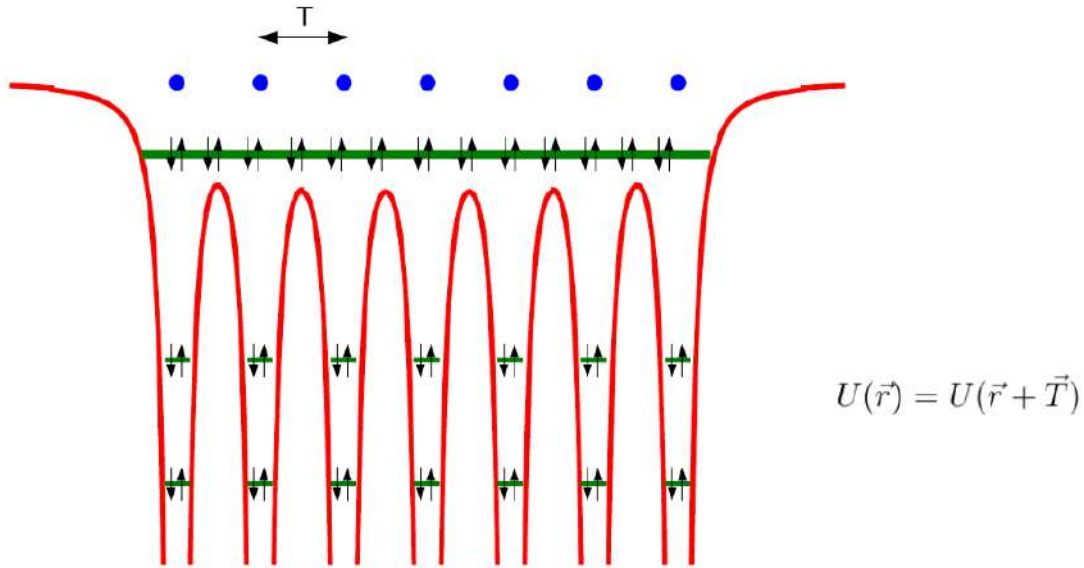
$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e a^2} n^2, \quad n = 1, 2, \dots$$



Obrázek 6.21: Drudeho model volných elektronů. Je uvažován pouze pružný rozptyl elektronů na iontech tvořících krystalovou mříž kovu.

Sommerfeldův model

Elektronová struktura pevných látek – model ~~téměř~~ volných elektronů



$$H\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right) \psi = E\psi$$

Model téměř volných elektronů

Elektronová struktura pevných látek – model volných elektronů

Sommerfeldův model

kvantový popis elektronového plynu

klasický popis: Maxwell-Boltzmannovo rozdělení

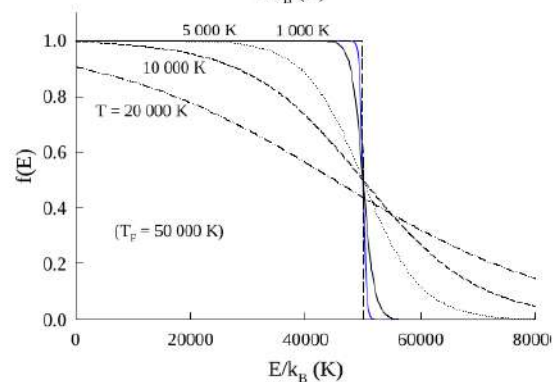
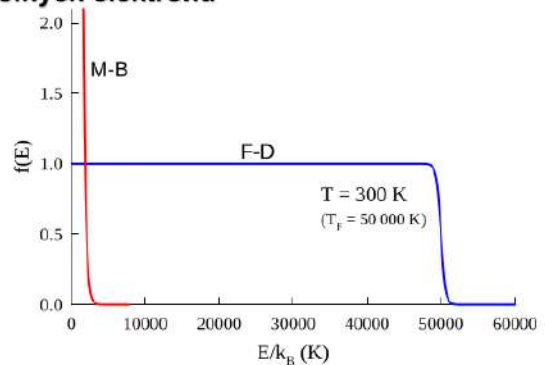
$$f(E) = konst \times e^{-\frac{E}{k_B T}}$$

kvantový popis: Fermi-Diracovo rozdělení

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} + 1}$$

$T = 0 \text{ K} \rightarrow \mu = E_F$ (chemický potenciál)

aplikace na elektronový plyn

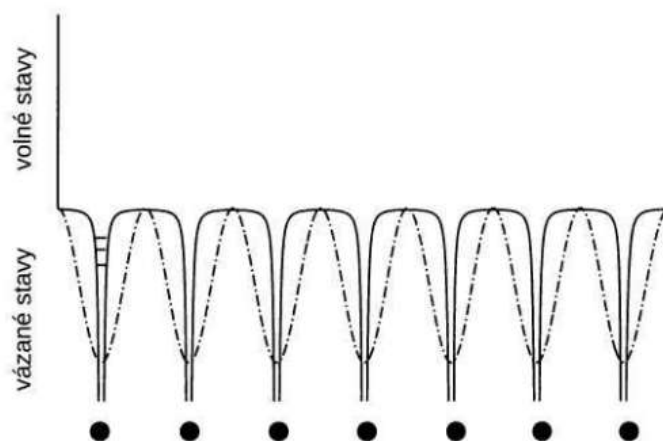


Blochův teorém

Jak již bylo zmíněno v kovech jsou elektrony sdíleny celým krystalem. První pokusy o popis tohoto fenoménu vedly skrze nazírání na elektrony v kovech jako na ideální elektronový plyn (Drude).

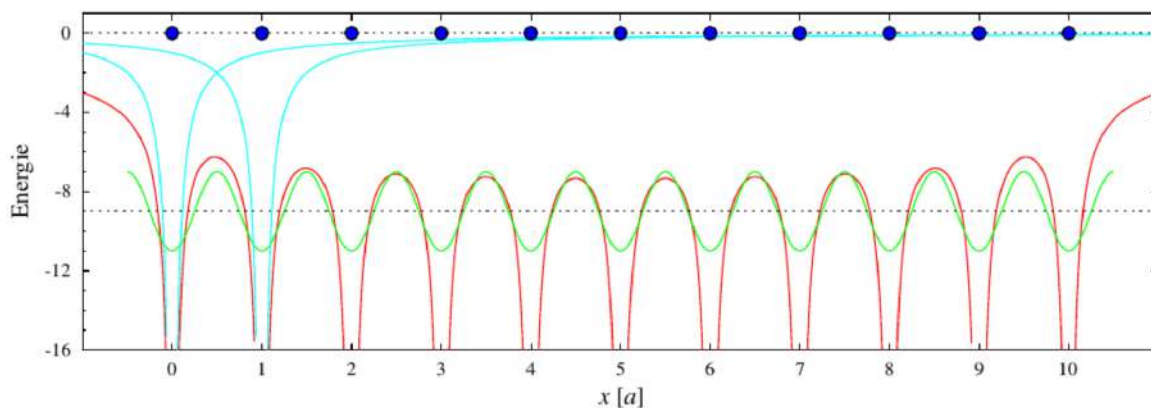
Nicméně v reálných kovech se elektrony pohybují v krystalické mřížce, tedy aby theorie seděla s experimentem, musíme započítat do jejich chování i periodicky se opakující potenciálové působení jader mřížky.

γ (mJ.mol ⁻¹ K ⁻²)	↓ efektivní hmotnost m^*												$\frac{m^*}{m_e} = \frac{\gamma_{exp}}{\gamma_{volne}}$
	Li	Na	K	Fe	Mn	Cu	Zn	Ag	Au	Al	Ga		
volné el.	0.8	1.1	17	0.6	0.6	0.5	0.8	0.6	0.6	0.9	1.0		
experiment	1.6	1.4	2.1	4.6	15.2	0.7	0.6	0.6	0.7	1.3	0.6		



Obrázek 6.27: Schématické znázornění periodického potenciálu, ve kterém se pohybují vodivostní elektrony. Jsou vyznačeny tři hladiny vázaných stavů v potenciálu prvního atomu. Přerušovaná linie odpovídá aproximaci potenciálu jedinou periodickou funkcí – funkcí kosinus. Viz text.

Elektronová struktura pevných látek – model téměř volných elektronů



Blochův teorém

V dokonalém periodickém potenciálu krystalu lze napsat řešení Schrödingerovy rovnice ve tvaru rovinné vlny vynásobené periodickou funkcí, která má periodu shodnou s periodou krystalu.

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}, \quad u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{T}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})$$
$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{T}) = \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{T}}$$

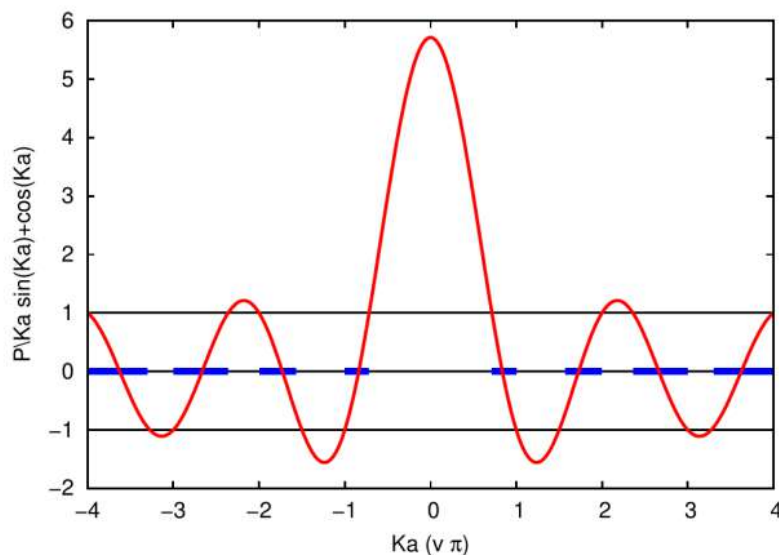
Elektrony, jejichž stavy *přes celý krystal* lze popsat pomocí Blochova teorému, se nazývají **Blochovy elektrony**.

Pásová struktura

- povolené a zakázané pásy

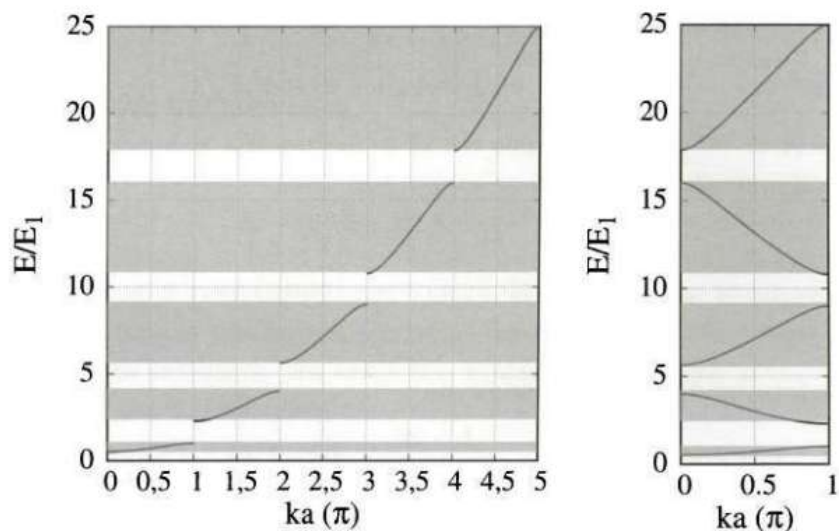
Kronigův-Penneyův model periodických pravoúhlých potenciálových jam vede na vztah:

$$\frac{P}{Ka} \sin(Ka) + \cos(Ka) = \cos(ka)$$



Cosinus je však omezená funkce s oborem hodnot $[-1, 1]$, takže některé hodnoty vlnového čísla k jsou zakázány (tam, kde je absolutní hodnota pravé strany > 1)!

Vznikají tak pásy dovolených energií (šedé) mezi kterými jsou pásy energií zakázaných (bílé).

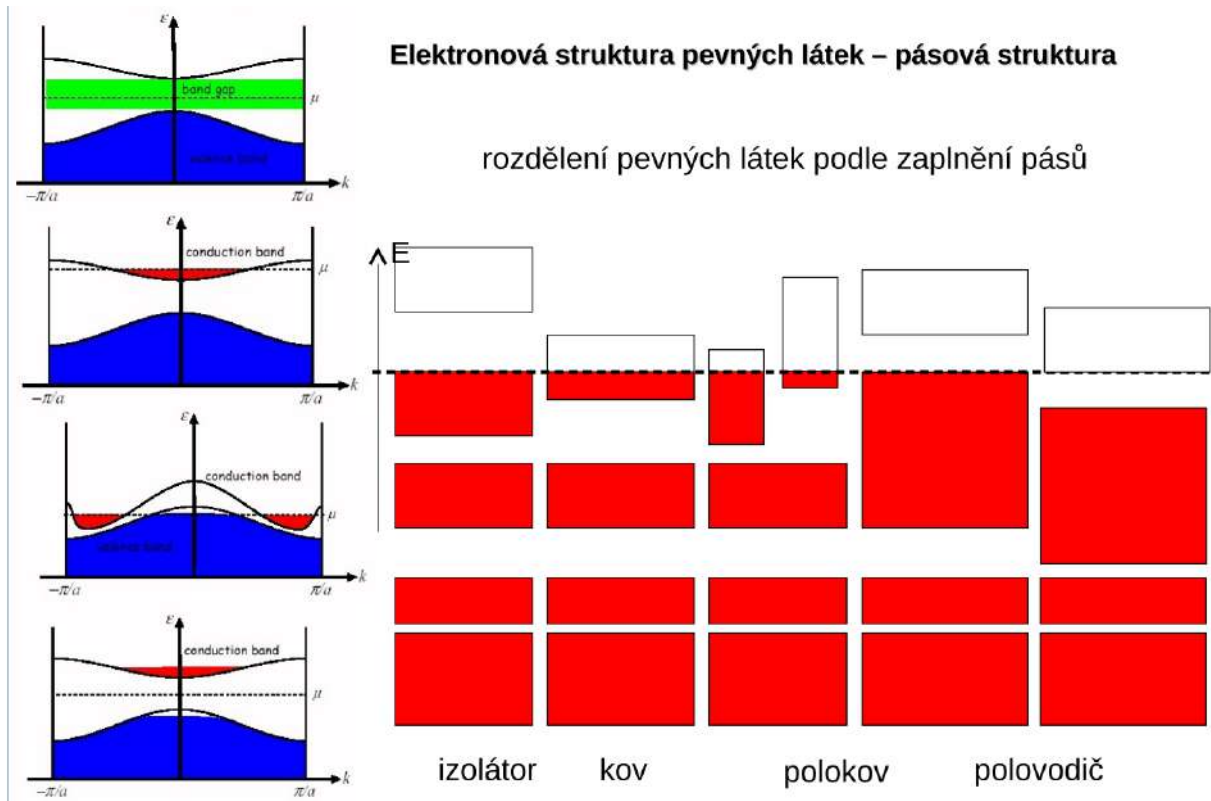


Obrázek 6.31: Disperzní relace Kronigova–Penneyova modelu v limitním případě pro $P = 5$. Šedé zóny označují pásy dovolených energií. Nalevo rozšířené schéma, vpravo redukované schéma v první Brillouinově zóně.

S rostoucí energií se šířka povolených pásů zvětšuje a šířka zakázaných pásů zužuje.

Hodnota $P = 0$ odpovídá volnému elektronu, v takovém případě se na hranicích BZ žádné pásy zakázaných energií neobjeví.

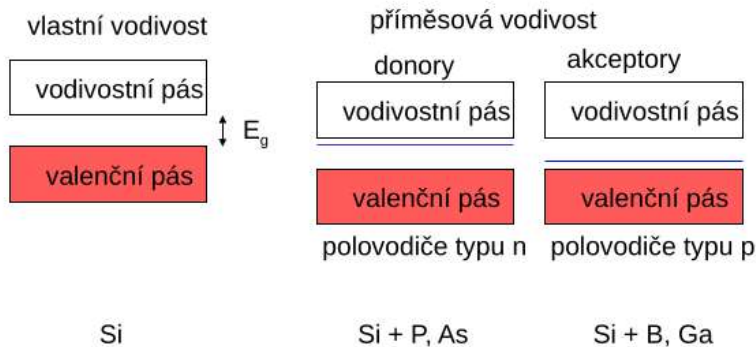
Pásová struktura dovede vysvětlit, proč jsou některé látky vodiče, jiné polovodiče a jiné izolanty:



Zakázaný pás v izolantech je přímo nad valenční vrstvou, elektrony tak nejsou ochotné excitovat se do vodivostního pásu a kladou odpor (jsou odporné).

Kovy naopak končí v půlce povoleného pásu, snadno tak excitují své elektrony z valenčního pásu do vodivostního pásu.

Polovodiče jsou za normálních podmínek spíše izolanty, ale jejich zakázaný pás je dostatečně úzký, aby pomocí vnějších podmínek, např. zvýšením teploty a přidáním příměsí, mohly začít vodit.



$$E_{d,a} = \frac{e^4 m^*}{2\hbar^2 \epsilon}$$

11 Formalismus kvantové teorie

11.1 Popis stavů kvantového systému (princip superpozice, vlnová funkce, relace neurčitosti).

Popis stavů kvantového systému (princip superpozice, vlnová funkce, relace neurčitosti). Reprezentace fyzikálních veličin, diskrétní a spojitě spektrum, stacionární Schrödingerova rovnice. Souřadnicová, impulsová a maticová formulace kvantové mechaniky. Variační metoda a stacionární poruchová metoda hledání vázaných stavů.

Popis stavů kvantového systému

11.1.1 Matematické prostředky kvantové mechaniky

11.1.2 Hilbertův prostor

Abstraktní Hilbertův prostor H je komplexní vektorový prostor na němž je definován skalární prostor. Jsou-li $|f\rangle$ a $|g\rangle$ dva vektory z H , budeme jejich skalární součin značit jako $\langle f|g\rangle$. Pro skalární součin platí

- symetrie $\langle g|f\rangle = \langle f|g\rangle^*$
- pozitivnost $\langle f|f\rangle \geq 0$ rovnost platí pro $|f\rangle = 0$
- antilinearita v prvním argumentu $\langle cf|g\rangle = c^*\langle f|g\rangle$, kde c je komplexní číslo.

Skalární součin umožňuje zavést pojem ortogonality vektorů - říkáme, že vektory $|f\rangle$ a $|g\rangle$ jsou kolmé pokud $\langle f|g\rangle = 0$. Můžeme také definovat normovaný vektor pro který platí $\|\psi\rangle = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle} = 1$. Jednou z implementací Hilbertova prostoru je prostor $L^2(\Omega)$ všech kvadraticky integrovatelných komplexních funkcí reálné proměnné na oblasti Ω , v kontextu kvantové teorie pak mluvíme o stavových vektorech v souřadnicové reprezentaci či o vlnových funkcích. Jsou-li $f(x)$ a $g(x)$ dvě funkce z $L^2(\Omega)$, jejich skalární součin definujeme jako

$$\langle f|g\rangle = \int_{\Omega} f^*(x)g(x)dx \quad (5)$$

11.1.3 Operátory, vlastní čísla a vlastní vektory

Klíčovým pojmem matematického aparátu kvantové teorie je pojem vlastních číseloperátoru: platí-li pro nenulový operátor $|u\rangle$ a nějaký operátor \hat{A} :

$$\hat{A}|u\rangle = \lambda|u\rangle \quad (6)$$

říkáme, že $|u\rangle$ je vlastní vektor operátoru \hat{A} a λ je k němu příslušné vlastní číslo. Operátor tak převádí vektor na vektor stejného směru jen jiné délky. Vlastním vektorem je tedy každý jiný vektor lišící se od vektoru $|u\rangle$ pouze délkou. Vzhledem k tomu budeme za různé vlastní vektory považovat pouze ty, které jsou lineárně nezávislé.

Operátor \hat{A}^\dagger je hermitovsky sdružený k \hat{A} na prostoru \mathfrak{R} , pokud pro libovolné dva vektory z \mathfrak{R} platí

$$\langle f|\hat{A}g\rangle = \langle \hat{A}^\dagger f|g\rangle \quad (7)$$

Platí-li $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ říkáme, že \hat{A} je hermitovským operátorem. Hermitovský operátor \hat{P} pro který platí $\hat{P}\hat{P} = \hat{P}$ se nazývá projekční. Je-li $|u\rangle$ normalizovaný vektor z \mathfrak{R} , pak operátor

$$\hat{P}_u = |u\rangle\langle u| \quad (8)$$

je projekčním operátorem promítajícím do směru $|u\rangle$, protože působí-li \hat{P}_u na libovolný ket $|f\rangle$, pak výsledný vektor míří podél $|u\rangle$: $\hat{P}_u|f\rangle = |u\rangle\langle u|f\rangle$. Projekční operátory můžeme sčítat, je-li prostor \mathfrak{N} rozměrný a normované vektory $|u_j\rangle$ jsou vzájemně kolmé, pak operátor $\hat{P}_{\mathfrak{R}}$ definovaný vztahem $\hat{P}_{\mathfrak{R}} = \sum_{j=1}^N |u_j\rangle\langle u_j| = \hat{1}$, jelikož promítá na celý prostor. Tomuto vztahu říkáme rozklad na jedničku a představuje podmínku úplnosti ortonormálního souboru vektorů $|u_j\rangle$.

Veličiny, které nejsou přímo měřitelné, nemusí být reprezentovány hermitovskými operátory, ale mohou být reprezentovány unitárními operátory, jenž jsou definované

$$\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{1} \quad (9)$$

11.1.4 Základní postuláty

V klasické mechanice je pohyb částice popsán znalostí její trajektorie. Získáme jí řešením klasických pohybových rovnic. Výsledkem je závislost polohového vektoru částice na čase, $\vec{r}(t)$. Tato veličina je přímo měřitelná a dobře představitelná. V kvantové mechanice je popis i jedné částice mnohem složitější a naší intuici nepřístupnější. Tento problém se odehrává v nekonečně rozměrném komplexním vektorovém prostoru.

- **Postulát I:** o stavovém vektoru

- Stav systému je v kvantové teorii popsán vektorem v komplexním Hilbertově prostoru.
- Platí princip superpozice: Jsou-li ψ_1 a ψ_2 dva stavové vektory, pak i jejich lineární kombinace $a\psi_1 + \psi_2$ je rovněž přístupným stavovým vektorem.

Využíváme Diracovo značení, kde zanáčíme tyto stavy $|\psi\rangle$ a nazveme ho ket-vektorem. Vlnová funkce $\psi(x)$, které se k popisu kvantového systému standardně používají, jsou vyjádřením stavového vektoru v konkrétní bázi. Stavové vektory jsou pouze matematickou konstrukcí, z nichž se dají vypočítat fyzikální charakteristiky systému, jež popisují. Princip superpozice stojí v srdci interferenčních jevů a stanovuje, že kvantová teorie je lineární teorií, tedy že časový vývoj stavu je zprostředkovan lineárním operátorem.

Tak jako je stav systému popsán vektorem z Hilbertova prostoru, jsou fyzikálními veličinám přiřazeny operátory, které působí v prostoru těchto vektorů.

- **Postulát II:** o měřitelných veličinách

- Měřitelným fyzikálním veličinám odpovídají v kvantové teorii lineární hermitovské operátory, jejichž vlastní vektory tvoří úplný systém v prostoru stavových vektorů.
- Jediné hodnoty, jichž může měřitelná fyzikální veličina F nabývat, jsou vlastní čísla operátoru \hat{F} této veličině přiřazeného.

Měřitelnými veličinami máme na mysli veličiny, jako je například poloha, rychlost, či energie. Neměřitelnými veličinami rozumíme formálně zavedené matematické veličiny (rotace, posunutí). V úvodu klasické mechaniky se postuluje, že stavové vektory popisující jednu částici jsou zobrazeny jako vlnové funkce $\psi(x_1, x_2, x_3)$ v E_3 . Kartézské souřadnice x_j částice a jim odpovídající hybnosti p_j jsou v prostoru vlnových funkcí reprezentovány operátory \hat{x}_j a \hat{p}_j působící jako

$$\hat{x}_j \psi(x_1, x_2, x_3) = x_j \cdot \psi(x_1, x_2, x_3) \quad (10)$$

$$\hat{p}_j \psi(x_1, x_2, x_3) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \psi(x_1, x_2, x_3) \quad (11)$$

Tyto operátory slňují fundamentální - takzvané kanonické - komutační relace

$$[\hat{x}_j, \hat{x}_i] = 0 \quad [\hat{p}_j, \hat{p}_i] = 0 \quad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij} \quad (12)$$

- **Postulát I^{BIS} a II^{BIS}**

Předchozí postuláty nekldou otázku, které stavy jsou přípustné, ani které hermitovské operátory jsou pozorovatelné. Pragmatické odpověď je, že přípustné vektory a operátory jsou všechny, které jsou potřebné. Tuto skutečnost vyjadřuje dvoudílný postulát úplnosti I^{BIS} a II^{BIS}

- **Postulát I^{BIS} o stavovém vektoru** - každý vektor Hilbertova prostoru popisuje přípustný stav.
- **Postulát II^{BIS} o měřitelných veličinách** - každý hermitovský operátor ne Hilbertově prostoru popisuje nějakou pozorovatelnou veličinu.

• **Postulát III:** o kanonickém kvantování kartézských proměných

- Jsou-li $x_1, p_i, i = 1 \dots N$ kartézské kanonické proměné, pak jejich operátory splňují komutační relace

$$[\hat{x}_j, \hat{x}_i] = 0 \qquad [\hat{p}_j, \hat{p}_i] = 0 \qquad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \qquad (13)$$

z platnosti těchto komutačních relací plyne, že pro libovolnou funkci $F(x)$ nebo $F(p)$, jenž lze rozvést do mocniné řady, platí

$$\left[\hat{x}_s, \hat{F}(\hat{p}_s) \right] = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_s} \hat{F}(\hat{p}_s) \qquad \left[\hat{p}_s, \hat{F}(\hat{x}_s) \right] = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_s} \hat{F}(\hat{x}_s)$$

Mějme nyní společný vlastní vektor všech operátorů souřadnice $\hat{x}_i|\phi\rangle = a_i|\phi\rangle$, kde a_i jsou nějaká reálná čísla. Zvolme dále N -tici reálných čísel $\{b_i\}$ a pomocí unitární transformace definujeme vektor

$$|\{b_i\}\rangle = e^{(i\hbar)^{-1} \sum \hat{p}_j (b_j - a_j)} |\phi\rangle = \hat{F}(\hat{p})|\phi\rangle \qquad (14)$$

S pomocí parciální derivace dostáváme

$$\begin{aligned} \hat{x}_i|\{b_i\}\rangle &= \hat{F}(\hat{p})a_i|\phi\rangle + i\hbar \frac{\partial}{\partial \hat{p}_i} \hat{F}(\hat{p})|\phi\rangle \\ &= b_i|\{b_i\}\rangle \end{aligned}$$

Protože čísla b_i jsou libovolná, znamená to, že operátory souřadnice mají neohrazené spojité spektrum vyplňující interval $(-\infty, \infty)$. Totéž platí pro operátor hybnosti. Zatímco původní stav popisuje částice v místech a_i , vektor $|\{b_i\}\rangle$ popisuje částice v místech b_i , tedy operátor

$$\hat{F}(\hat{p}) = e^{(i\hbar)^{-1} \sum p_j (b_j - a_j)} \qquad (15)$$

popisuje posunutí v konfiguračním prostoru o vektor $b - a$

11.1.5 Měření

Měření hraje v kvantové teorii zásadní vliv. Nelze totiž měření uspořádat tak, abychom mohli jeho vliv na systém zanedbat. S měřením jsou propojeny základní stavební kameny kvantové fyziky

- Měření projevuje principiálně pravděpodobnostní charakter kvantového světa. Adekvátní náhled na podstatu kvantových pravděpodobností je nezbytný pro popsání mnoha jevů mikrosvěta.
- Měření zachycuje dualismus vlna-částice a obecněji princip komplementarity a s tím související princip neurčitosti.
- Součástí standartní teorie kvantového měření je také projekční postulát, podle něhož měřením je stav kvantového systému nevratně změněn - dojde k jeho redukci.

Měření vystupuje v kvantové mechanice dvojím způsobem:

- Slouží k vytvoření počátečního stavu, tj. vlnové funkce, kterou můžeme systému připsat. Stav systému se pak vyvíjí podle pohybové rovnice až do okamžiku, kdy provedeme měření, abychom
- obdrželi kvantitativní vyhodnocení té fyzikální veličiny, která nás zajímá.

Postuláty o měření v kvantové teorii jsou:

• **Postulát IV:** o středních hodnotách

– Střední hodnota pozorovatelné F pro systém popsaný stavovým vektorem $|\psi\rangle$ je dána předpisem

$$\bar{F} = \langle F \rangle = \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle \quad (16)$$

Číslo označované $\langle F \rangle$ se nazývá střední hodnota F ve stavu $|\psi\rangle$. Smysl tohoto postulátu ukážeme nejdříve na diskretním spektru. $\hat{F} = \sum_l F_l \hat{P}_l$, kde $\hat{P} = \sum_{\lambda=1}^{g_l} |l\lambda\rangle \langle l\lambda|$, kde g_l je degenerace l -tého vlastního čísla F_l . Chceme-li spočítat střední hodnotu tohoto operátoru dostaneme

$$\langle F \rangle = \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle = \sum_l \langle \psi | \hat{P}_l | \psi \rangle F_l = \sum_l w_l F_l \quad (17)$$

Tedy čísla w_l mají význam předpovězené pravděpodobnostní váhy výsledku měření F_l , tedy jeho pravděpodobnosti. Význam této pravděpodobnosti můžeme vyjádřit ještě jinými působy:

$$\begin{aligned} w_l &= \langle \psi | \hat{P}_l | \psi \rangle = \langle \hat{P}_l \rangle \\ &= \langle \psi | \hat{P}_l \cdot \hat{P}_l | \psi \rangle = \| \hat{P}_l | \psi \rangle \|^2 \\ &= \langle \psi | \sum_{\alpha=1}^{g_l} |l\alpha\rangle \langle l\alpha| \psi \rangle = \sum_{\alpha=1}^{g_l} |\langle \alpha | \psi \rangle|^2 \end{aligned}$$

Právě skalární součin $\langle \varphi | \psi \rangle$ jako amplituda vzájemné pravděpodobnosti je skutečnou univerzální signaturou kvantové teorie. Jasně je vidět pro případ nedegenerované vlastní hodnoty, které přísluší jediný vlastní vektor. Pro tento případ

$$w_l = |\langle l | \psi \rangle|^2, g_l = 1, \hat{F} | l \rangle = F_l | l \rangle \quad (18)$$

Jde-li o měření veličiny F se spojitým spektrem, je v principu nemožné naměřit jediné vlastní číslo - měřicí přístroj má vždy konečnou rozlišovací schopnost, takže naměříme-li F řekněme v intervalu $\Delta F_0 = (F_0 - \Delta F/2, F_0 + \Delta F/2)$, výraz

$$w_F = w(F) = |\langle F | \psi \rangle|^2 \quad (19)$$

udává hustotu pravděpodobnosti, s níž je veličina F rozložena.

• **Postulát V:** o měření

– Měření pozorovatelné \hat{F} s výsledkem F_k převádí systém z půvosního stavu $|\psi\rangle$ do normovaného vlastního stavu $|f_k\rangle$ úměrného projekci $\hat{P}_k |\psi\rangle$:

$$|f_k\rangle = \frac{\hat{P}_k |\psi\rangle}{\| \hat{P}_k |\psi\rangle \|} \quad \hat{P}_k = |f_k\rangle \langle f_k| \quad (20)$$

Zatímco před měřením v sobě stavový vektor srýval potenciálně možnost naměřit všechny hodnoty F_l , po měření byly tyto možnosti redukovány na jedinou hodnotu F_k . Změříme-li F vzápětí na témž systému (na němž jsme právě naměřili F_k) naměříme opět F_k . Kodaňská škola interpretuje tento fakt jako redukcí stavového vektoru v důsledku interakce s měřicím přístrojem.

Je-li naměřená hodnota F_k degenerovaná g_k -násobně, pak po měření bude systém ve stavu $\| \hat{P}_k |\psi\rangle \|^{-1} \hat{P}_k |\psi\rangle = \sum_{\alpha=1}^{g_k} c_\alpha |F_{k\alpha}\rangle$, kde koeficienty c_α nejsou určeny měřením. Abychom tuto neurčitost vyřešili můžeme ve stejnou dobu změřit ještě fyzikální veličinu G . Pokud F a G spolu komutují existují jejich společné vlastní vektory a bude tedy po měření systém ve společném vlastním stavu $|G_l, F_l\rangle$, je-li tento stav jednoznačně určen, pak jsme našli stavový vektor, jenž můžeme systému připsat, pokud ne postupujeme analogicky. Množině takových operátorů, které musíme použít k úplnému nalezení jednoznačně definovaného systému vlastních vektorů říkáme úplný soubor vzájemně komutujících operátorů. Má-li operátor \hat{F} reprezentující měřenou veličinu F spojitě spektrum, je situace složitější. Jak jsme již uvedli, má měřicí přístroj v tomto případě vždy nějakou šířku okna ΔF .

• **Postulát VI:** projekční postulát pro spojité spektrum

- Je-li systém v okamžiku měření popsán stavovým vektorem $|\psi\rangle$ a jsou-li výsledkem měření F hodnoty z intervalu $(F_0 - \Delta F/2, F_0 + \Delta F/2)$, pak toto měření přivádí systém z původního stavu $|\psi\rangle$ do stavu

$$|\psi'\rangle = k\hat{P}|\psi\rangle \quad \hat{P} = \int_{F_0 - \Delta F/2}^{F_0 + \Delta F/2} |F\rangle\langle F| dF \quad (21)$$

kde \hat{P} je projekční operátor na podprostor "naměřených" stavů a k je normovací faktor

$$k^{-1} = \sqrt{\langle \psi | \hat{P} | \psi \rangle} = \sqrt{\int_{F_0 - \Delta F/2}^{F_0 + \Delta F/2} |\langle F | \psi \rangle|^2 dF} \quad (22)$$

Uvažujeme-li v případě měření veličiny se spojitým spektrem o měření jako o způsobu, jak přiřadit systému určitý stav, vidíme, že po měření stav $|\psi'\rangle$ stále ještě obsahuje neznámé koeficienty

$$c_F = \langle F | \psi \rangle \quad F_0 - \Delta F/2 \leq F \leq F_0 + \Delta F/2$$

protože stav $|\psi\rangle$ není obecně znám. Je-li však klubko dostatečně úzké (volné klubko s rozptylem rychlosti Δv kolem jisté hodnoty v_0 splňující $\Delta v/v_0 \ll 1$), pak nebude výsledek dalších měření s dostatečnou přesností záviset na konkrétním tvaru koeficientu c . Proto je možno jejich tvar volit tak, aby byl početně co nejvýhodnější - často se volí gaussovské rozdělení o šířce ΔF a kolem bodu F_0

$$c_F = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\Delta F}} e^{-(F-F_0)^2/(4\Delta F^2)} \quad (23)$$

Tuto funkci nazýváme gaussovým klubkem. Rozdělení pravděpodobnosti je dáno kvadrátem $|c_F|^2$, který má obvyklý tvar s normovací jedničkou $\int |c_F|^2 dF = 1$ (proto je tam čtvrtá odmocnina). Při této volbě má také veličina ΔF význam neurčitosti, totiž druhého kumulantu rozdělení pravděpodobnosti:

$$(\Delta F)^2 = \int dF (F - F_0)^2 |c_F|^2 \quad (24)$$

11.1.6 Relace neurčitosti

Relace neurčitosti doprovázejí kvantovou fyziku v ikonické podobě $\Delta x \Delta p \cong \hbar$ již od roku 1927, kdy W. Heisenberg do nich shrnul své usilí o fyzikální interpretaci kanonické komutační relace mezi souřadnicí a hybností.

11.1.7 Robertsonův vztah

Robertson již v roce 1929 zveřejnil vztah, jenž je pokládán za nejobecnější odvození relací neurčitosti. Máme dvě pozorovatelné \hat{A} a \hat{B} . Pro každý stav $\hat{\rho}$ je měřením možno určit statistické váhy vlastních čísel pro každou z pozorovatelných veličin

$$\begin{aligned}\hat{A} &\longrightarrow w_l^A = \text{Tr} \hat{\rho} \hat{P}_l^A \\ \hat{B} &\longrightarrow w_l^B = \text{Tr} \hat{\rho} \hat{P}_l^B\end{aligned}$$

Cílem je vyhledat základní statistické charakteristiky obou rozdělání a jejich vztah. Využijeme rozptyl obou veličin $(\Delta A)^2$ a $(\Delta B)^2$. Jejich odmocniny jsou spojeny s kvantomechanickými neurčitostmi. Pro tyto neurčitosti platí Robertsonův vztah

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle -i [\hat{A}, \hat{B}] \rangle| \quad (25)$$

Operátor středovaný na pravé straně je hermitovský, tedy pozorovatelný.

Formální odvození Robertsonova vztahu dává neurčitostem apriorní ráz, jakoby v daném stavu byly obě veličiny rozmazané a jejich hodnota neurčitá a role měření je zatlačena do pozadí. Na druhou stranu je zde představa o nepřesnosti současného měření dvou nekomutujících pozorovatelných veličin, která se vzájemně ovlivňují.

Realce neurčitosti nám dává účinné omezení, jen pokud je pravá strana nenulová. K tomu je nutné splnit tři podmínky:

- pozorovatelné veličiny nejsou komparabilní $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$
- stav není diagonální v bázi ani jedné z pozorovatelných veličin $[\hat{A}, \hat{\rho}] \neq 0$ a $[\hat{B}, \hat{\rho}] \neq 0$
- stav neleží v nulovém prostoru pozorovatelné veličiny $-i [\hat{A}, \hat{B}]$ tj. $-i [\hat{A}, \hat{B}] \hat{\rho} \neq 0$

První podmínka je samozřejmá, druhá znamená, že daný stav nemůže být např. vlastním stavem ani jedné z pozorovatelných veličin. Třetí podmínka je důležitá při odvození relace neurčitosti pro moment hybnosti a azimutální úhel φ .

11.1.8 Heisenbergovy relace

Pro kartézskou souřadnici a odpovídající hybnost máme kanonickou komutační reuaci $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \hat{1}$ a Robertsonova relace tak přechází ve vztah

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (26)$$

Kanonickou komutační relací je zaručeno, že pravá strana nerovnosti nezávisí na stavu a dostali jsme tak univerzální dolní odhad pro součin neurčitostí. Heisenbergově relaci ej možno dát velmi názorný smysl v kontextu vlnové mechaniky. Omezíme se an čisté stavy a zečneem tak, že neurčitosti zapíšeme ve vlastní reprezentaci každé měřitelné veličiny, tedy Δx v x-representaci a Δp v p-representaci. S použitím výsledků dostáváme

$$\begin{aligned}(\Delta x)^2 &= \int dx (x - \langle x \rangle)^2 |\psi(x)|^2, (\Delta p)^2 = \int dp (p - \langle p \rangle)^2 |\tilde{\psi}(p)|^2 \\ (\Delta x)^2 (\Delta p)^2 &\geq \frac{1}{4} \hbar^2\end{aligned} \quad (27)$$

Neurčitosti mají tedy doslovně strukturu a význam druhých momentů hustoty pravděpodobnosti sořadnice a hybnosti. Přejdeme nyní od hybností k vlnovým vektorům podle de Broglieho vztahu $p = k\hbar$. Přechod od souřadnicové k impulzové reprezentaci pak přepíšeme jako

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \Phi(k) dk \quad \Phi(k) = \sqrt{\hbar} \tilde{\psi}(\hbar k) \quad (28)$$

kde jsme pro pohodlí vypsali vztah obou zápisů.

Tento Fourierův integrál můžeme popsat jako rozklad Schrödingerovy vlny $\psi(x)$ do rovinných vln. Rovnice (1.23) pak dostáváme ve tvaru

$$(\Delta x)^2 = \int dx (x - \langle x \rangle)^2 |\psi(x)|^2 \qquad (\Delta k)^2 = \int dk (k - \langle k \rangle)^2 |\tilde{\Phi}(k)|^2 \qquad (29)$$

$$(\Delta x)^2 (\Delta k)^2 \geq \frac{1}{4}$$

Místo o hustotě pravděpodobnosti můžeme mluvit o intenzitách: $|\psi(x)|^2$ je intenzita Schrödingerovy vlny, $|\tilde{\Phi}(k)|^2$ je její spektrální intenzita. Jejich druhé momenty splňují uvedenou nerovnost, která

- je čistě formálním důsledkem obecných vlastností a jejich spektrálního rozkladu
- je plně ekvivalentní s Heisenbergovou relací neurčitosti

11.2 Reprezentace fyzikálních veličin, diskrétní a spojité spektrum, stacionární Schrödingerova rovnice.

11.2.1 Stacionární Schrödingerova rovnice

Zavedeme obecný stavový vektor $|\psi\rangle = \int dp a(p)|p\rangle$, kde $a(p)$ je obecný rozvoj do báze. V souřadnicové reprezentaci bude tento vektor ve tvaru $\langle x|\psi\rangle = \psi(x) = \int dp a(p)\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp a(p)e^{ipx\hbar}$. Tento vektor můžeme zavést i ve 3D jako

$$\psi(x_1, x_2, x_3) = \int dp_1 dp_2 dp_3 \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} a(p_1, p_2, p_3) e^{\frac{i}{\hbar}(p_1 x_1 + p_2 x_2 + p_3 x_3)} \quad (30)$$

Potřebujeme zavést operátor energie. Kinetická energie v x reprezentaci je zavedená jako

$$\hat{T}_1 = \int dp \frac{p_1^2}{2m} |p_1\rangle\langle p_1| = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \quad (31)$$

ve 3D dostáváme operátor kinetické energie jako

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \quad (32)$$

Vlastní stavy operátoru kinetické energie jsou $\hat{T}|p_1\rangle = \frac{p_1^2}{2m}|p_1\rangle$. Operátor celkové energie zavedeme jako $\hat{E} = \hat{T} + \hat{V}$. Pro stavy $|q\rangle$, který odpovídá situaci, kdy částice sedí na místě q. Tedy musí mít potenciální energii odpovídající tomuto místu $V(q)$:

$$\hat{V} = \int dq V(q)|q\rangle\langle q| \quad (33)$$

Operátor celkové energie se nazývá Hamiltonián a je zaveden

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \int dp \frac{p^2}{2m} |p\rangle\langle p| + \int dq V(q)|q\rangle\langle q| \quad (34)$$

Základní úlohou kvantové mechaniky je měření diskrétního energetického spektra, pro něž platí stacionární Schrödingerova rovnice

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (35)$$

11.2.2 Schrödingerova rovnice v souřadnicové reprezentaci

Začneme se základní Schrödingerovou rovnicí a aplikujeme bra vektor $\langle \vec{x} |$ ve 3D:

$$\begin{aligned}\hat{H}|\psi\rangle &= E|\psi\rangle \\ \langle \vec{x} | \hat{H} |\psi\rangle &= E \langle \vec{x} | \psi\rangle\end{aligned}$$

Zjednodušíme si náš příklad na 1D případ: $\langle x | \psi\rangle = \psi(x)$ a tedy pravá strana přejde do tvaru $E \langle x | \psi\rangle = \psi(x)$ a levá strana je ve tvaru

$$\begin{aligned}\langle x | \hat{H} \int dx' |x'\rangle \langle x' | \psi\rangle &= \int dx' \langle x | \hat{H} |x'\rangle \psi(x') \\ \langle x | \hat{H} |x'\rangle &= \int dp \frac{p^2}{2m} \langle x | p\rangle \langle p | x'\rangle + \int dq V(q) \langle x | q\rangle \langle q | x'\rangle \\ &= \int dp \frac{1}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}px - \frac{i}{\hbar}p x'} + \int dq V(q) \delta(q-x) \delta(x'-q) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp e^{\frac{i}{\hbar}p(x-x')} + V(x) \delta(x-x') \\ \int dx' \langle x | \hat{H} |x'\rangle \psi(x') &= \int dx' V(x) \delta(x-x') \psi(x') + \int dx' \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \delta(x-x') \psi(x') \\ &= V(x) \psi(x) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x)\end{aligned}$$

Tedy explicitně zapsané ve tvaru

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(x) = E \psi(x) \quad (36)$$

a pro 3D dostáváme tvar

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z) \right] \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z) \quad (37)$$

kde $\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$ nazveme Laplaceovým operátorem Δ .

11.3 Souřadnicová, impulsová a maticová formulace kvantové mechaniky.

11.3.1 Maticová reprezentace

Jen pro několik málo operátorů - Hamiltonián lineárního harmonického oscilátoru, nebo moment hybnosti - dokážeme nalézt jejich spektrum přímo algebraicky přímo v abstraktním Hilbertově prostoru. V ostatních případech je nutné zavést v příslušném Hilbertově prostoru vhodnou bázi a přejít ke konkrétní reprezentaci ketů a operátorů v tomto souřadném systému. Tímto souřadným systémem se může stát libovolný úplný ortonormální systém vektorů, zpravidla za něj volíme vlastní vektory nějakého z hermitovských operátorů. Zvolíme-li za bázi vlastní vektory nějakého operátoru \hat{F} , řekneme, že pracujeme v F-representaci. Je-li $\{|f_i\rangle\}$ zmíněná báze, $|\psi\rangle$ libovolný ket a \hat{A} libovolný operátor, pak v F-representaci budou $|\psi\rangle$ nebo \hat{A} reprezentovány nekonečným sloupcovým vektorem, nebo nekonečnou čtvercovou maticí

$$|\psi\rangle \iff \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \dots \\ \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle f_1|\psi\rangle \\ \langle f_2|\psi\rangle \\ \langle f_3|\psi\rangle \\ \dots \\ \dots \end{pmatrix} \quad \hat{A} \iff \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & \dots \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \quad (38)$$

kde $A_{ij} = \langle f_i|\hat{A}|f_j\rangle$. Kupříkladu stacionární Schrödingerova rovnice ve tvaru $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ má nyní tvar maticové rovnice

$$\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & H_{13} & \dots \\ H_{21} & H_{22} & H_{23} & \dots \\ H_{31} & H_{32} & H_{33} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \dots \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \dots \end{pmatrix} \quad (39)$$

Přechod od jedné bázi k druhé je spojen s unitární transformací: jsou-li $\{|f_i\rangle\}$ a $\{|g_i\rangle\}$ dvě takové báze (F-representace a G-representace) a U příslušná unitární transformace ta, že platí $|g_i\rangle = \hat{U}|f_i\rangle = \sum_j U_{ji}|f_j\rangle$, pak jsou složky libovolného ketu $|\psi\rangle$ v obou reprezentacích spojeny vztahem

$$\psi_i^G = \langle g_i|\psi\rangle = \langle \sum_j U_{ji}|f_j\rangle|\psi\rangle = \sum_j U_{ji}^* \langle f_j|\psi\rangle = \sum_j \hat{U}_{ij}^\dagger \psi_j^F \quad (40)$$

neboli maticově

$$(\psi)_G = U^\dagger (\psi)_F \quad (41)$$

Transformace operátorů vychází z lineární algebry a je

$$\|\hat{A}\|_G = \|\hat{U}^\dagger \|\hat{A}\|_F \|\hat{U}\| \quad (42)$$

Operace maticemi nekonečného řádu jsou však obtížné, a tak Schrödingerovu rovnici v maticové podobě řešíme zpravidla jen tehdy, když nám vhodná aproximace umožní omezit se na řešení v konečném prostoru. V ostatních případech je výhodné zvolit bázi, v níž místo maticové rovnice dostaneme diferenciální rovnici. Tento případ je rozebírán v sekci 2.2.

11.3.2 Souřadnicová a impulsová reprezentace

Jelikož x se mění spojitě můžeme zavést analogicky k (2.1) značení

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \langle x|\psi\rangle \\ \langle x'|\psi\rangle \\ \langle x''|\psi\rangle \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi(x) \\ \psi(x') \\ \psi(x'') \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (43)$$

jinými slovy složky $|\psi\rangle$ jsou spojitou funkcí x , které můžeme označit jako $\psi(x)$. Podobnou úvahu můžeme provést pro hybnost a zavést stejně $\psi(p)$. Operátory \hat{x} a \hat{p} působí nyní podle předpisu

$$\langle x|\hat{x}\psi\rangle = \int \langle x|\hat{x}|x'\rangle \langle x'|\psi\rangle dx' \quad (44)$$

$$\langle x|\hat{p}\psi\rangle = \int \langle x|\hat{p}|x'\rangle \langle x'|\psi\rangle dx' \quad (45)$$

Maticе $\|\hat{x}\|$ je v bázi vlastních vektorů diagonální a tedy platí $\langle x|\hat{x}|x'\rangle = x'\delta(x-x')$. Matici $\|\hat{p}\|$ nalezneme pomocí komutační relace, která má v souřadnicové reprezentaci tvar $\langle x|\hat{x}\hat{p}|x'\rangle - \langle x|\hat{p}\hat{x}|x'\rangle = i\hbar\delta(x-x')$. Z této komutační relace dostáváme

$$\begin{aligned} \langle x|\hat{p}\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} i\hbar \left[\frac{d}{dx'}\delta(x-x') \right] \langle x'|\psi\rangle dx' \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} i\hbar \left[\frac{d}{dx'}\delta(x-x') \right] \psi(x') dx' \end{aligned}$$

neboli s použitím definice derivace δ -funkce, která má formálně stejný tvar jako metoda per-partes, dostáváme maticové působení operátoru \hat{p}

$$\hat{p}\psi(x) = -i\hbar \frac{d}{dx}\psi(x) \quad (46)$$

Máme tedy dvě reprezentace, p -reprezentaci a x -reprezentaci. Tyto dvě reprezentace jsou spojeny Fourierovou transformací

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx/\hbar} \tilde{\psi}(p) dp \quad (47)$$

11.4 Variační metoda a stacionární poruchová metoda hledání vázaných stavů.

Řešením stacionární úlohy kvantové mechaniky se rozumí nalezení spektra energií daného systému a vlastních stavů Hamiltoniánu. Tyto úlohy však mohou být značně složité. Existuje mnoho aproximativních metod, mezi něž patří například využití výpočetní síly počítačů, nebo některá aproximativní řešení jsou založena na správném pochopení problému, jako je tomu v aproximaci středního pole. V této sekci se zaměříme na dvě metody řešení úlohy

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (48)$$

Tyto dvě metody patří mezi nejdůležitější a jsou to

- metoda variační
- metoda poruchová

11.4.1 Variační metoda

Variační metoda nahrazuje řešení rovnice (4.1) hledáním extrémálních bodů funkcionálu energie $\varepsilon[E] = \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle$ při vedlejší podmínce $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. Platí totiž, že variační podmínka

$$\delta(\varepsilon[E] - E\langle\psi|\psi\rangle) = 0 \quad (49)$$

je ekvivalentní Schrödingerově rovnici a Lagrangeův multiplikátor E respektující normovací podmínku má význam vlastní energie. K důkazu této fundamentální věty postačí pohled na explicitní tvar této podmínky

$$\langle\delta\psi|\hat{H} - E|\psi\rangle + \langle\psi|\hat{H} - E|\delta\psi\rangle = 0 \quad (50)$$

Každé řešení stacionární Schrödingerovy rovnice pak vyhovuje této podmínce. Dříve formálně zavedený parametr E má skutečně význam energie ve stavu $|\psi\rangle$. Platnost této podmínky pro libovolné variace $|\delta\psi\rangle$ implikuje, že $|\psi\rangle$ splňuje Schrödingerovu rovnici. Výsledkem variační metody je často označována energie základního stavu, která je rovna globálnímu minimu funkcionálu $\varepsilon[E]$. Omezme se na hamiltonián s diskretním spektrem $E_1 < E_2 < E_3 < \dots$ s odpovídajícími vlastními vektory $\{\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \dots\}$. Libovolný vektor $|\psi\rangle$, jenž budeme nazývat testovacím, nyní zapíšeme ve tvaru

$$|\psi\rangle = \sum_i |\varphi_i\rangle \langle\varphi_i|\psi\rangle, \quad \sum_i |\langle\varphi_i|\psi\rangle|^2 = \langle\psi|\psi\rangle = 1 \quad (51)$$

funkcionál v této reprezentaci má tvar

$$\varepsilon[E] = \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = \sum_i |\langle\varphi_i|\psi\rangle|^2 E_i \quad (52)$$

Pro energii základního stavu E_1 dostáváme

$$\varepsilon[E] = E_1 + \sum_i |\langle\varphi_i|\psi\rangle|^2 (E_i - E_1) \geq E_1 \quad (53)$$

Není-li stav degenerovaný, je nerovnost ostrá pro každý vektor $|\psi\rangle \neq |\varphi_i\rangle$ a tedy funkcionál dává horní odhad energie základního stavu. Pro energii excitovaného stavu E_l dostáváme

$$\varepsilon[E] = E_l + \sum_{E_i < E_l} |\langle\varphi_i|\psi\rangle|^2 (E_i - E_l) + \sum_{E_i > E_l} |\langle\varphi_i|\psi\rangle|^2 (E_i - E_l) \quad (54)$$

Pro testovací funkce ortogonální k těmto stavům zůstává jen poslední člen a dostaneme opěr horní odhad energie existovaného stavu. Postupnou ortogonalizací k již nalezeným vlastním stavům s energií nižší a následnou minimalizací funkcionálu energie bychom mohli nalézt celé spektrum vlastních energií. Postupná akumulace chyb však omezuje úspěšnost takové metody.

Uvedeme zde nyní praktické využití variační metody:

1. Prvním krokem bývá analýza symetrie hamiltoniánu. Volba testovací funkce by měla odrážet tyto symetrie.
2. Obvyklý postup je vybrat testovací funkci jako normovanou. Tuto testovací funkci parametrizujeme pomocí parametrů c_1, c_2, \dots, c_s . Funkcionál pak přejde do tvaru $\varepsilon[c_1, c_2, \dots, c_s]$ a hledání minima přejde v sousatvu rovnic

$$\frac{\partial \varepsilon[c_1, c_2, \dots, c_s]}{\partial c_i} = \frac{\partial}{\partial c_i} \langle \hat{H} \rangle = 0 \quad (55)$$

Úspěch spočívá ve vhodné volbě parametrizace, při níž dochází k vlastní aproximaci.

3. Tvar zkušebních funkcí není nijak omezen, ale existují volby, které jsou často využívány. Nejvýznamější je tzv. Ritzova variační metoda. Zkušební funkce je sestavena jako lineární kombinace konečného počtu pevně zvolených vektorů, které nemusí být vzájemně ortogonální.

$$|\psi\rangle = c_1|\varphi_1\rangle + c_2|\varphi_2\rangle + \dots + c_s|\varphi_s\rangle, \langle \varphi_i|\varphi_j\rangle = S_{ij} \quad (56)$$

kde S_{ij} je překryvová matice. Koeficienty jsou ovšem komplexní a tak reálných variačních parametrů je $2s$. Rovnice pro optimální c_i tvoří homogenní systém lineárních rovnic

$$\sum_{j=1}^s H_{ij}c_j = E \sum_{j=1}^s S_{ij}c_j \quad (57)$$

kde E je střední hodnota energie ve stavu ψ . Algebraicky jde o zobecněnou úlohu na vlastní čísla, do které vstupují dvě matice: hamiltonián a překryvová matice.

Pro úplnost ještě uvedu variační princip pro normované funkce. Pak má funkcionál energie odlišný tvar

$$\tilde{\varepsilon}[E] = \frac{\langle \psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle \psi|\psi\rangle} \quad (58)$$

a základní variační podmínka určující kritické body má tvar

$$\delta \tilde{\varepsilon}[E] = 0 \quad (59)$$

11.4.2 Poruchová metoda

Poruchová metoda vychází z rozdělení Hamiltoniánu na neporušenou část $\hat{H}^{(0)}$ a poruchu $\lambda\hat{W}$

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \lambda\hat{W} \quad (60)$$

Bezrozměrný parametr λ je reálné číslo představující velikost poruchy (například intenzitu vnějšího pole). Často je však jako porucha vyčleněna část hamiltoniánu, jejíž působení je vhodné započíst dodatečně jako modifikaci základního obrazu obsaženého v $\hat{H}^{(0)}$. Řešení původní Schrödingerovy rovnice (4.1) hledáme tak, že vyjeme z řešení neporušeného

$$\hat{H}^{(0)}\psi_i^{(0)} = E_i^{(0)}\psi_i^{(0)} \quad (61)$$

kteřé je působením poruchy modifikováno. Porucha závisí na λ analyticky a základním předpokladem poruchové teorie je, že totéž platí i pro vlastní energie a vlastní vektory. Vzájemně jednoznačnou korespondenci $\psi_i^{(0)} \Leftrightarrow \psi_i$ a $E_i^{(0)} \Leftrightarrow E_i$ je pak možno nalézt jako rozvoj v mocninách poruchy. Tato formulace je nazvána Rayleighův-Schrödingerův poruchový počet. Explicitně

$$\psi_i^{(0)} \Leftrightarrow \psi_i = \psi_i^{(0)} + \lambda\psi_i^{(1)} + \lambda^2\psi_i^{(2)} + \dots \quad (62)$$

$$E_i^{(0)} \Leftrightarrow E_i = E_i^{(0)} + \lambda E_i^{(1)} + \lambda^2 E_i^{(2)} \dots \quad (63)$$

Cílem teorie je stanovit koeficienty u jednotlivých mocnin. Standardním postupem je dosadit rozvoj do Schrödingerovy rovnice a přejít k $E^{(0)}$ reprezentaci. Porovnáním členů u téže mocniny λ dosátneme rekurzivní vztahy, které jsou řešeny postupně. První krok je snadný

$$E_i^{(1)} = \langle \psi_i^{(0)} | \hat{W} | \psi_i^{(0)} \rangle \quad |\psi_i^{(1)}\rangle = \sum_{l \neq i} |\psi_l^{(0)}\rangle \frac{\langle \psi_l^{(0)} | \hat{W} | \psi_i^{(0)} \rangle}{E_i^{(0)} - E_l^{(0)}} \quad (64)$$

Pro další členy se vyskytne nesnáž. Rozvoj pro vlnovou funkci není Schrödingerovou rovnicí určen jednoznačně, je nutno připojit předpis pro normování a pro neurčitou fázi vlnové funkce. Další možnosti dostáváme při využití rozdělovací metody (partitioning).

11.4.3 Rozdělovací metoda (partitioning)

Tato metoda vychází z toho, že celý Hilbertův prostor rozdělíme na dva ortonormální podprostory: $H = H_a \oplus H_b$, dimenze prvního z nich je zpravidla konečná a druhého nekonečná. Každý stav, tedy i řešení Schrödingerovy rovnice, můžeme jednoznačně rozdělit na odpovídající ortogonální projekce $\psi = \psi_a + \psi_b$, kde $\langle \psi_a | \psi_b \rangle = 0$. Schrödingerova rovnice je tedy převedena na sousatvu rovnic. Tento postup dává fyzikální interpretaci takovou, že jedné části prostoru je nutné věnovat speciální péči zatímco druhou část prostoru lze respektovat pouze přibližně (poruchově). Definujeme vektor koeficientů $\bar{c} = \begin{pmatrix} c_a \\ c_b \end{pmatrix}$ a zavedeme hamiltonián

jako $\bar{H} = \begin{pmatrix} \bar{H}_{aa} & \bar{H}_{ab} \\ \bar{H}_{ba} & \bar{H}_{bb} \end{pmatrix}$. Dostáme pak sousatvu Schrödingerových rovnic na jednotlivých prostorech ve tvaru

$$\bar{H}\bar{c} = E\bar{c} \quad (65)$$

neboli dostáváme dvě rovnice ve tvaru

$$\begin{aligned} (H_{aa} - E1_{aa})c_a + H_{ab}c_b &= 0 \\ H_{ba}c_a + (H_{bb} - E1_{bb})c_b &= 0 \end{aligned}$$

budeme se snažit vypočíst efektivní hamiltonián na prostoru H_a . Z druhé rovnice vyjádříme c_b a poté ho dosadíme do první rovnice

$$\begin{aligned} c_b &= [E1_{aa} - H_{aa}]^{-1} \cdot H_{ba} \cdot c_a \\ H_{aa}c_a + H_{ab} [E1_{aa} - H_{aa}]^{-1} \cdot H_{ba} \cdot c_a &= Ec_a \\ H_{aa}^{(ef)} &= H_{aa} + H_{ab} [E1_{aa} - H_{aa}]^{-1} H_{ba} \end{aligned}$$

a s pomocí tohoto nového hamiltoniánu dostáváme znovu Schrödingerovu rovnici ve tvaru

$$H_{aa}^{(ef)}(E)c_a = Ec_b \quad (66)$$

11.4.4 Nedegerovaná hladina

Je-li neporušená energie $E_l^{(0)}$ nedegerovaná, klademe do prostoru H_a jedinou funkci $\psi_l^{(0)}$ a rovnice (4.19) pro upravenou energii není rovnicí maticovou, ale skalární

$$H_{ll}^{(ef)} c_l = E_l c_l$$

$$H_{ll}^{(ef)} = E_l^{(0)} + \lambda W_{ll} + \lambda^2 \sum_{i,j \neq l} W_{ij} \frac{\delta_{ij}}{(E_l - E_i^{(0)})} W_{ji} + \dots$$

Tedy vlastní energie je ve tvaru

$$E_l = E_l^{(0)} + \lambda W_{ll} + \lambda^2 \sum_{i \neq l} \frac{|W_{li}|}{E_l - E_i^{(0)}} + \dots \quad (67)$$

Tomuto výrazu odpovídá výraz pro vlnovou funkci prvního řádu v λ , který je ve tvaru

$$\psi_l = c_l \left[\psi_l^{(0)} + \lambda \sum_{i \neq l} \frac{W_{il}}{E_l^{(0)} - E_i^{(0)}} \psi_i^{(0)} \right] \quad (68)$$

11.4.5 Degenerovaná hladina

V tomto případě bázi prostoru H_a tvoří s funkcí $\psi_1^{(0)}, \psi_2^{(0)}, \dots, \psi_s^{(0)}$, příslušející hladinám $E_1^{(0)}, E_2^{(0)}, \dots, E_s^{(0)}$. V nižším řádu poruchového počtu má Schrödingerova rovnice tvar

$$(H_{aa}^{(ef)} + \lambda W_{aa}) c_a = E c_a \quad (69)$$

tedy

$$\begin{pmatrix} E_1^{(0)} - E + \lambda W_{11} & \lambda W_{12} & \dots & \lambda W_{1s} \\ \lambda W_{21} & E_2^{(0)} - E + \lambda W_{22} & \dots & \lambda W_{2s} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \lambda W_{s1} & \lambda W_{s2} & \dots & E_s^{(0)} - E + \lambda W_{ss} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \\ c_s \end{pmatrix} = 0 \quad (70)$$

kde $W_{ij} = \langle \psi_i^{(0)} | \hat{W} | \psi_j^{(0)} \rangle$. Soustava lineárních rovnic představuje standardní úlohu hledání vlastních čísel a vlastních vektorů hermitovské matice $H_{aa}^{(ef)} + \lambda W_{aa}$. Podmínkou netriviálního řešení je, aby determinant matice sousatvy byl roven nule

$$\det (H_{aa}^{(ef)} - E 1_{aa} + \lambda W_{aa}) = 0 \quad (71)$$

12 Kvantová dynamika

12.1 Nestacionární Schrödingerova rovnice, rovnice kontinuity, Ehrenfestovy rovnice.

12.1.1 Nestacionární Schrödingerova rovnice

Nymí rozšíříme evoluci kvantového systému o časovou evoluci (zatím bylo možné stav změnit pomocí měření). Časová Schrödingerova rovnice rozšiřuje vlnovou funkci, která je jejím řešením, o časovou závislost. Při zavedení budeme uvažovat Newtonův čas, který neovlivnitelně plyne rovnoměrným způsobem a je společný všem hmotným objektům a vztažným soustavám. čas není dynamickou proměnou a nepodléhá kvantování. V tomto fyzikálním čase se systém vyvíjí kauzálně a reverzibilně dokud nedojde k zásahu z venčí (například měřením). Můžeme vyslovit postulát:

- **Postulát I:** o časové evoluci

1. Stavový vektor izolovaného systému se vyvíjí v čase podle rovnice

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle \quad (72)$$

kde $\hat{H}(t)$ je lineární hermitovský operátor tzv. Hamiltonián, specifický pro daný systém.

2. Pro systém s klasickou analogií je \hat{H} operátorem vzniklým "kvantováním" klasické Hamiltonovy funkce

První část má zcela univerzální podobu. Striktně vymezuje evoluci systému v době od jejího měření - přípravy počátečního stavu - k druhému měření. Rovnice (1.1) e nazývá časovou Schrödingerovou rovnicí v abstraktní podobě. Je to diferenciální rovnice prvního řádu a její řešení je jednoznačně určeno počáteční podmínkou $|\psi(t_0)\rangle = |\psi_0\rangle$ v počátečním čase $t = t_0$. Popisuje evoluci, která je plně deterministická a mluvíme o kvantové kauzalitě. Tato kauzalita se týká stavového vektoru, vlnové funkce, která má význam amplitudy hustoty pravděpodobnosti. Směr času pro časovou Schrödingerovu rovnici není privilegovaný a je tedy reverzibilní.

Schrödingerova rovnice je lineární a proto dynamická evoluce systému nenarušuje princip superpozice. Snadno se dá ukázat, že během časového vývoje se nemění norma stavového vektoru

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \|\psi(t)\|^2 &= \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle \\ &= \left\langle \frac{d}{dt} \psi(t) \middle| \psi(t) \right\rangle + \left\langle \psi(t) \middle| \frac{d}{dt} \psi(t) \right\rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | -\hat{H}^\dagger + \hat{H} | \psi(t) \rangle = 0 \end{aligned}$$

Tedy $\|\psi(t)\|^2 = \|\psi(t_0)\|^2 = \text{konst.}$ Tento poznatek můžeme iterpatovat jako zákon zachování celkové pravdpodobnosti během časové evoluce. Právě tento zákon zachování nám dává podmínku, aby byl Hamiltonián hermitovský. Můžeme dokázat jednoznačnost časové Schrödingerovy rovnice:

Mějme dvě řešení $\psi(t)$ a $\varphi(t)$ vycházející z počátečních podmínek $\psi(t_0) = \psi_0$ a $\varphi(t_0) = \varphi_0$. Rozdíl těchto řešení je také řešením této rovnice s počáteční podmínkou $\psi_0 - \varphi_0$. Konstantnost velikosti nám dává $\|\psi(t) - \varphi(t)\| = \|\psi_0 - \varphi_0\|$, pro všechny časy. Jestliže jsou počáteční podmínky totožné, pak $\|\psi(t) - \varphi(t)\| = 0$ pro všechny časy a řešení splývají.

Druhá část postulátu odpovídá na otázku jak sestavit hamiltonián pro konkrétní systémy (jen ty s klasickou interpretací). Na hamiltonián klademe tři podmínky:

- Musí být hermitovský.
- Musí být zdola ohraničený, jinak je systém nestabilní (Příkladem může být fiktivní atom vodíku $\hat{p}^2/2m - \kappa/r^\alpha$, kde pro příliš vysoká α je přitažlivá síla příliš velká a částice se zhroutí do sebe).
- Musí být podřízen principu korespondence tam, kde má limita $\hbar \rightarrow 0$ smysl (přechod mezi klasickou fyzikou a kvantovou fyzikou).

Přejdeme k časové závislosti pozorovatelných veličin. Časová závislost $\langle \hat{A} \rangle$ je dána jednak časovou závislostí vlnové funkce a jednak explicitní závislostí \hat{A} na čase (interakce s vnějším časově závislým polem)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle &= \left\langle \frac{d\psi(t)}{dt} | \hat{A} | \psi(t) \right\rangle + \langle \psi(t) | \hat{A} | \frac{d\psi(t)}{dt} \rangle + \langle \psi(t) | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} | \psi(t) \rangle \\ &= \langle \psi(t) | -\frac{1}{i\hbar} \hat{H} \hat{A} | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \hat{A} | \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} | \psi(t) \rangle \end{aligned}$$

kde jsme dosadili za časové derivace ze Schrödingerovy rovnice. Tedy dostáváme vztah pro časovou derivaci

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \left\langle \psi(t) \left| \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{H}] + \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right| \psi(t) \right\rangle \quad (73)$$

Střední hodnotu přepíšeme pomocí operátoru

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{H}] + \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \quad \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \left\langle \frac{d\hat{A}}{dt} \right\rangle \quad (74)$$

Podobně jako v klasické mechanice hrají v kvantové mechanice významnou roli integrály pohybu, jako veličiny jejichž střední hodnota se během pohybu nemění. Tedy \hat{A} je integrálem pohybu, pokud \hat{A} nezávisí explicitně na čase a komutuje s hamiltoniánem. Dostáváme tedy podmínku pro integrály pohybu

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = 0 \quad \iff \quad \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = [\hat{A}, \hat{H}(t)] = 0 \quad (75)$$

Spolu s \hat{A} je integrálem pohybu i každá jeho funkce $f(\hat{A})$.

12.1.2 Rovnice kontinuity

Využijeme časovou Schrödingerovu rovnici a dosadíme dosadíme standartní vyjádření hamiltoniánu

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) \quad (76)$$

Nyní vezmeme standartní definici hustoty pravděpodobnosti

$$\hat{\rho}(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2$$

Nyní vezmeme časovou derivaci hustoty pravděpodobnosti a dosadíme do této derivace z rovnice (1.5)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} &= \frac{\partial (\psi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t))}{\partial t} = \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \\ &= \psi^* \left(\frac{i\hbar}{2m} \Delta \psi - \frac{i}{\hbar} V \psi \right) + \psi \left(-\frac{i\hbar}{2m} \Delta \psi^* + \frac{i}{\hbar} V \psi^* \right) \\ &= \frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*) = \frac{i\hbar}{2m} \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \\ &= -\frac{i\hbar}{2m} \nabla \cdot (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) = \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} \end{aligned}$$

Zavedeme tedy hustotu toku jako vektorovou veličinu

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) \quad (77)$$

Pak dostáváme obecný tvar rovnice kontinuity, který zároveň vyjadřuje zákon zachování pravděpodobnosti

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \vec{j} = 0 \quad (78)$$

12.1.3 Ehrenfestovy rovnice

Budeme se nyní snažit vypočítat pohybové rovnice pro střední hodnoty souřadnice a hybnosti

$$\langle x(t) \rangle = \langle \psi(t) | \hat{x} | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | U^\dagger(t, t_0) \hat{x} U(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle \quad (79)$$

$$\langle p(t) \rangle = \langle \psi(t) | \hat{p} | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | U^\dagger(t, t_0) \hat{p} U(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle \quad (80)$$

Pro časovou derivaci střední hodnoty pohybu tedy bude platit

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle &= \langle \psi(t_0) | \left(\frac{d}{dt} U^\dagger(t, t_0) \right) \hat{x} U(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle + \langle \psi(t_0) | U^\dagger(t, t_0) \hat{x} \frac{d}{dt} U(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \left[\langle \psi(t_0) | U^\dagger(t, t_0) \hat{H} \hat{x} U(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle - \langle \psi(t_0) | U^\dagger(t, t_0) \hat{x} \hat{H} U(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle \right] \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | [\hat{H}, \hat{x}] | \psi(t) \rangle = \frac{i}{\hbar} \left(-\frac{i\hbar}{m} \right) \langle \hat{p} \rangle \\ &= \frac{\langle \hat{p} \rangle}{m} \end{aligned}$$

kde jsme dosadily za hamiltonián $\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$ a využili známých komutačních relací. Pro časovou derivaci střední hodnoty operátoru hybnosti dostáváme

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | [\hat{H}, \hat{p}] | \psi(t) \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | [V(\hat{x}), \hat{p}] | \psi(t) \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | i\hbar \frac{dV(\hat{x})}{d\hat{x}} | \psi(t) \rangle = - \left\langle \frac{dV(\hat{x})}{d\hat{x}} \right\rangle \end{aligned}$$

12.2 Evoluce obecného kvantového systému, kvantové měření.

12.2.1 Evoluce obecného kvantového systému

12.2.2 Hamiltonián nezávislý na čase

Nezávisí-li hamiltonián na čase, má dynamická úloha mnoho důležitých dodatečných vlastností. Energie je integrálem pohybu jako v klasické mechanice. Je možné také sestavit obecné řešení Schrödingerovy rovnice v energetické reprezentaci:

$$\hat{H}|\psi_i\rangle = E_i|\psi_i\rangle \quad (81)$$

kde E_i jsou měřitelné energie systému. Čísloujeme energie od nuly a tím zavádíme základní stav E_0 . Obecné řešení stacionární Schrödingerovy rovnice vyjádříme superpozicí

$$|\psi(t)\rangle = \sum_i c_i(t)|\psi_i\rangle$$

kde koeficienty $\langle\psi_i|\psi(t)\rangle$ jsou dány soustavou nezávislých obyčejných diferenciálních rovnic plynoucích z časové Schrödingerovy rovnice

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_i(t) = E_i c_i(t)$$

s počáteční podmínkou v čase $t = t_0$ plynoucí z poúvodní počáteční podmínky $|\psi(t_0)\rangle = |\psi_0\rangle$. Po dosazení dostáváme obecnou počáteční podmínku pro samotné koeficienty $c_i(t_0) = \langle\psi_i|\psi(t_0)\rangle = \langle\psi_i|\psi_0\rangle = c_{i0}$. S touto počáteční podmínkou můžeme psát obecné řešení časové Schrödingerovy rovnice jako superpozici stacionárních stavů

$$|\psi(t)\rangle = \sum_i c_{i0} e^{-iE_i(t-t_0)/\hbar} |\psi_i\rangle \quad (82)$$

Toto řešení nám dává interpretaci časového vývoje v kvantové mechanice. Stav závislý na čase je superpozicí vlastních stavů v energetické reprezentaci s fázovými faktory měnícími se v čase, tedy lze jeho vývoj chápat jako časově proměnou interferenci časově neměných "Schrödingerových vln". Blíže se také můžeme podívat na vývoj pozorovatelné veličiny

$$\begin{aligned} \langle\hat{A}\rangle_t &= \langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle \\ &= \sum_i \sum_j c_{i0}^* c_{j0} \langle\psi_i|\hat{A}|\psi_j\rangle e^{i\omega_{ik}(t-t_0)} \quad \omega_{ik} = (E_i - E_k)/\hbar \end{aligned}$$

Časová závislost této střední hodnoty je rovněž určena výlučně fázovými faktory, které odpovídají rozdílům energií, které nazýváme Bohrovými frekvencemi. Skutečnou časovou proměnlivost přinášejí členy s nenulovými Bohrovými frekvencemi.

12.2.3 Evoluční operátor

Začneme s evolučním operátorem, pro nějž není hamiltonián závislý na čase. Vyjdeme z již vypočteného řešení (2.2).

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \sum_i e^{-iE_i(t-t_0)/\hbar} |\psi_i\rangle \langle \psi_i | \psi(t_0)\rangle = \sum_i \left[e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} |\psi_i\rangle \right] \langle \psi_i | \psi(t_0)\rangle \\ &= e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} \sum_i [|\psi_i\rangle \langle \psi_i|] |\psi(t_0)\rangle = e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} |\psi(t_0)\rangle \end{aligned}$$

kde v posledním kroku jsme využili úplnost stacionárního systému. Z posledního členu také vidíme, že časový vývoj stavu nám zprostředkovává evoluční operátor definovaný jako

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} \quad (83)$$

Vidíme, že evoluční operátor převádí ket vektor $|\psi(t_0)\rangle$ na ket vektor $|\psi(t)\rangle$. Evoluční operátor má dvě proměnné. Počáteční čas může být také proměnou a pro $t = t_0$ platí identita

$$\hat{U}(t_0, t_0) = \hat{1}$$

sloužící jako počáteční podmínka. Evoluční operátor sám o sobě obsahuje všechna možná řešení Schrödingerovy časové rovnice, protože zobrazuje celý prostor stavů sám na sebe. Jeho výhodou je, že je explicitní a má globální platnost. Má uzavřený kompaktní tvar nezávislý na reprezentaci. Evoluční operátor je unitární a má výhodu v tom, že závisí pouze na časovém rozdílu.

Pro obecný časově závislý hamiltonián můžeme evoluční operátor definovat vztahem velice podobným původnímu

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (84)$$

pro libovolnou počáteční podmínku a libovolnou dvojici časů t, t_0 . Existence této operátorové funkce je rovnocenná s existencí a jednoznačností řešení časové Schrödingerovy rovnice. Vložení evolučního operátoru do Schrödingerovy rovnice dostáváme

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H} \hat{U}(t, t_0)$$

s počáteční podmínkou $\hat{U}(t_0, t_0) = \hat{1}$. Tento evoluční operátor je stále unitárním. Tato vlastnost plyne z toho, že $\hat{H}(t) = \hat{H}^\dagger(t)$. Z pohybových rovnic dostáváme

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0) \right] = 0$$

Tedy po aplikaci počáteční podmínky dostáváme řešení

$$\hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0) = \hat{1} \quad \hat{U}(t, t_0) \hat{U}^\dagger(t, t_0) = \hat{1} \quad (85)$$

Z čehož plyne, že evoluční operátor je nejen izometrický, ale i unitární. Pro libovolnou trojici časů t, t_1, t_0 splňuje funkce \hat{U} multiplikativní kompoziční pravidlo zvané grupová vlastnost

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t, t_1) \hat{U}(t_1, t_0)$$

Evoluční operátor a jeho vlastnost shrnuje tento postulát

- **Postulát:** o časové evoluci

- Evoluce stavů mezi dvěma časy $t > t_0$ je dána evolučním operátorem

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad |\psi(t_0)\rangle = |\psi_0\rangle \quad |\psi_0\rangle \in H \quad (86)$$

- Tento operátor je lineární a unitární.

- Pro tři časy $t > t_1 > t_0$ platí pologrupové kompoziční pravidlo

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t, t_1) \hat{U}(t_1, t_0) \quad (87)$$

Evoluční operátor splňuje pohybovou rovnici

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{U}(t, t_0) \quad (88)$$

12.2.4 Kvantové měření

Měření hraje v kvantové teorii zásadní vliv. Nelze totiž měření uspořádat tak, abychom mohli jeho vliv na systém zanedbat. S měřením jsou propojeny základní stavební kameny kvantové fyziky

- Měření projevuje principiálně pravděpodobnostní charakter kvantového světa. Adekvátní náhled na podstatu kvantových pravděpodobností je nezbytný pro popsání mnoha jevů mikrosvěta.
- Měření zachycuje dualismus vlna-částice a obecněji princip komplementarity a s tím související princip neurčitosti.
- Součástí standartní teorie kvantového měření je také projekční postulát, podle něhož měřením je stav kvantového systému nevratně změněn - dojde k jeho redukci.

Měření vystupuje v kvantové mechanice dvojím způsobem:

- Slouží k vytvoření počátečního stavu, tj. vlnové funkce, kterou můžeme systému připsat. Stav systému se pak vyvíjí podle pohybové rovnice až do okamžiku, kdy provedeme měření, abychom
- obdrželi kvantitativní vyhodnocení té fyzikální veličiny, která nás zajímá.

Postuláty o měření v kvantové teorii jsou:

- **Postulát IV:** o středních hodnotách

– Střední hodnota pozorovatelné F pro systém popsáný stavovým vektorem $|\psi\rangle$ je dána předpisem

$$\bar{F} = \langle F \rangle = \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle \quad (89)$$

Číslo označované $\langle F \rangle$ se nazývá střední hodnota F ve stavu $|\psi\rangle$. Smysl tohoto postulátu ukážeme nejdříve na diskrétním spektru. $\hat{F} = \sum_l F_l \hat{P}_l$, kde $\hat{P} = \sum_{\lambda=1}^{g_l} |l\lambda\rangle \langle l\lambda|$, kde g_l je degenerace l -tého vlastního čísla F_l . Chceme-li spočítat střední hodnotu tohoto operátoru dostaneme

$$\langle F \rangle = \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle = \sum_l \langle \psi | \hat{P}_l | \psi \rangle F_l = \sum_l w_l F_l \quad (90)$$

Tedy čísla w_l mají význam předpovězené pravděpodobnostní váhy výsledku měření F_l , tedy jeho pravděpodobnosti. Význam této pravděpodobnosti můžeme vyjádřit ještě jinými působí:

$$\begin{aligned} w_l &= \langle \psi | \hat{P}_l | \psi \rangle = \langle \hat{P}_l \rangle \\ &= \langle \psi | \hat{P}_l \cdot \hat{P}_l | \psi \rangle = \| \hat{P}_l | \psi \rangle \|^2 \\ &= \langle \psi | \sum_{\alpha=1}^{g_l} |l\alpha\rangle \langle l\alpha| \psi \rangle = \sum_{\alpha=1}^{g_l} |\langle \alpha | \psi \rangle|^2 \end{aligned}$$

Právě skalární součin $\langle \alpha | \psi \rangle$ jako amplituda vzájemné pravděpodobnosti je skutečnou univerzální signaturou kvantové teorie. Jasně je vidět pro případ nedegerované vlastní hodnoty, které přísluší jediný vlastní vektor. Pro tento případ

$$w_l = |\langle l | \psi \rangle|^2, g_l = 1, \hat{F} | l \rangle = F_l | l \rangle \quad (91)$$

Jde-li o měření veličiny F se spojitým spektrem, je v principu nemožné naměřit jediné vlastní číslo - měřicí přístroj má vždy konečnou rozlišovací schopnost, takže naměříme-li F řekněme v intervalu $\Delta F_0 = (F_0 - \Delta F/2, F_0 + \Delta F/2)$, výraz

$$w_F = w(F) = |\langle F | \psi \rangle|^2 \quad (92)$$

udává hustotu pravděpodobnosti, s níž je veličina F rozložena.

• **Postulát V:** o měření

- Měření pozorovatelné \hat{F} s výsledkem F_k převádí systém z půvosního stavu $|\psi\rangle$ do normovaného vlastního stavu $|f_k\rangle$ úměrného projekci $\hat{P}_k|\psi\rangle$:

$$|f_k\rangle = \frac{\hat{P}_k|\psi\rangle}{\|\hat{P}_k|\psi\rangle\|} \quad \hat{P}_k = |f_k\rangle\langle f_k| \quad (93)$$

Zatímco před měřením v sobě stavový vektor srýval potenciálně možnost naměřit všechny hodnoty F_l , po měření byly tyto možnosti redukovány na jedinou hodnotu F_k . Změříme-li F vzápětí na témž systému (na němž jsme právě naměřili F_k) naměříme opět F_k . Kodaňská škola interpretuje tento fakt jako redukcí stavového vektoru v důsledku interakce s měřícím přístrojem.

Je-li naměřená hodnota F_k degenerovaná g_k -násobně, pak po měření bude systém ve stavu $\|\hat{P}_k|\psi\rangle\|^{-1} \hat{P}_k|\psi\rangle = \sum_{\alpha=1}^{g_k} c_\alpha |F_{k\alpha}\rangle$, kde koeficienty c_α nejsou určeny měřením. Abychom tuto neurčitost vyřešili můžeme ve stejnou dobu změřit ještě fyzikální veličinu G . Pokud F a G spolu komutují existují jejich společné vlastní vektory a bude tedy po měření systém ve společném vlastním stavu $|G_l, F_l\rangle$, je-li tento stav jednoznačně určen, pak jsme našli stavový vektor, jenž můžeme systému připsat, pokud ne postupujeme analogicky. Množině takových operátorů, které musíme použít k úplnému nalezení jednoznačně definovaného systému vlastních vektorů říkáme úplný soubor vzájemně komutujících operátorů. Má-li operátor \hat{F} reprezentující měřenou veličinu F spojitě spektrum, je situace složitější. Jak jsme již uvedli, má měřící přístroj v tomto případě vždy nějakou šířku okna ΔF .

• **Postulát VI:** projekční postulát pro spojitě spektrum

- Je-li systém v okamžiku měření popsán stavovým vektorem $|\psi\rangle$ a jsou-li výsledkem měření F hodnoty z intervalu $(F_0 - \Delta F/2, F_0 + \Delta F/2)$, pak toto měření převádí systém z půvosního stavu $|\psi\rangle$ do stavu

$$|\psi'\rangle = k\hat{P}|\psi\rangle \quad \hat{P} = \int_{F_0 - \Delta F/2}^{F_0 + \Delta F/2} |F\rangle\langle F| dF \quad (94)$$

kde \hat{P} je projekční operátor na podprostor "naměřených" stavů a k je normovací faktor

$$k^{-1} = \sqrt{\langle\psi|\hat{P}|\psi\rangle} = \sqrt{\int_{F_0 - \Delta F/2}^{F_0 + \Delta F/2} |\langle F|\psi\rangle|^2 dF} \quad (95)$$

Uvažujeme-li v případě měření veličiny se spojitým spektrem o měření jako o způsobu, jak přiřadit systému určitý stav, vidíme, že po měření stav $|\psi'\rangle$ stále ještě obsahuje neznámé koeficienty

$$c_F = \langle F|\psi\rangle \quad F_0 - \Delta F/2 \leq F \leq F_0 + \Delta F/2$$

protože stav $|\psi\rangle$ není obecně znám. Je-li však klubku dostatečně úzké (volné klubko s rozptylem rychlosti Δv kolem jisté hodnoty v_0 splňující $\Delta v/v_0 \ll 1$), pak nebude výsledek dalších měření s dostatečnou přesností záviset na konkrétním tvaru koeficientu c . Proto je možno jejich tvar volit tak, aby byl početně co nejvýhodnější - často se volí gaussovské rozdělení o šířce ΔF a kolem bodu F_0

$$c_F = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta F}} e^{-(F-F_0)^2/(4\Delta F^2)} \quad (96)$$

Tuto funkci nazýváme gaussovým klubkem. Rozdělení pravděpodobnosti je dáno kvadrátem $|c_F|^2$, který má obvyklý tvar s normovací jedničkou $\int |c_F|^2 dF = 1$ (proto je tam čtvrtá odmocnina). Při této volbě má také veličina ΔF význam neurčitosti, totiž druhého kumulantu rozdělení pravděpodobnosti:

$$(\Delta F)^2 = \int dF (F - F_0)^2 |c_F|^2 \quad (97)$$

12.3 Integrály pohybu, kvantová čísla, symetrie v kvantové mechanice.

12.3.1 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

$$\frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt} = \left\langle \frac{d\hat{A}}{dt} \right\rangle$$

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

$$\psi(x, t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{E_n t / (i\hbar)}$$

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 kvantověmechanické 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 .

12.3.2 Kvantová čísla

Uvažujme model atomu vodíku. Napíšeme si hamiltonián takového systému.

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \right) - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \quad (98)$$

kde pro vodík platí $Z=1$. Jelikož je potenciál jádra sféricky symetrický je výhodné přejít ke sférickým souřadnicím. Kinetický člen hamiltoniánu bude ve sférických souřadnicích mít tvar

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (99)$$

Řešení Schrödingerovy rovnice budeme hledat ve tvaru

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r) \Theta_{lm}(\vartheta) \Phi_m(\varphi) \quad (100)$$

tedy oddělíme od sebe radiální část vlnové funkce $R_{nl}(r)$ a axiální část vlnové funkce $\Theta_{lm}(\vartheta) \Phi_m(\varphi)$. Celočíselné indexy n, l, m se nazývají kvantová čísla. Kvantovými čísly se popisuje stav elektronu v atomu.

Pomocí řešení Schrödingerovy rovnice jsme našli omezení kvantových čísel n, l, m jako celých čísel. Kvantové číslo n se nazývá hlavní a kvantuje energii stavu $E_n = -\frac{Z^2}{n^2} Ry$ a může nabývat hodnot $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

Kvantové číslo l se nazývá vedlejší a kvantuje velikost momentu hybnosti \hat{L}^2 jako $\hat{L}^2 = \hbar^2 l(l+1)$. Vedlejší kvantové číslo může nabývat pouze hodnot $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$. Třetí kvantové číslo se nazývá magnetické a kvantuje složku momentu hybnosti, volí se jeho složka podél osy z a kvantuje je jí jako $\hat{L}_z = \hbar m$, kde magnetické kvantové číslo může nabývat pouze hodnot $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$. Energie elektronových hladin závisí pouze na hlavním kvantovém čísle. Obecně máme pro každé n celkem n -hodnot kvantového čísla l a pro každé číslo l máme $(2l+1)$ hodnot čísla m . Tedy hladina s kvantovým číslem n je obecně D degenerovaná

$$D = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \quad (101)$$

To není nic jiného než součet aritmetické řady, jejíž součet je dán vzorcem $\frac{a_0+a_n}{2}n$, proto je součet roven n^2 .

12.3.3 Výběrová pravidla

Víme, že elektrony mohou v atomech přeskakovat z orbitalu na orbital a vyzařuje se přitom foton, pro jehož vlnovou délku platí

$$\frac{1}{\lambda} \sim E_{nlm} - E_{n'l'm'} \quad (102)$$

kde nlm a $n'l'm'$ jsou kvantová čísla popisující jednotlivé hladiny. Ovšem ne všechny přeskoky jsou povolené, realizují se pouze určité změny kvantových čísel

$$\begin{array}{ll} \Delta n = n - n' & \text{libovolné} \\ \Delta l = l - l' & \Delta l = \pm 1 \\ \Delta m = m - m' & \Delta m = 0, \pm 1 \end{array}$$

Intenzita spektrální linie je dána Fermiho zlatým pravidlem

$$w_{ij} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle i | M_{ij} | j \rangle|^2 \delta(\hbar\omega \pm (E_j - E_i)) \quad (103)$$

w_{ij} je pravděpodobnost přechodu mezi i -tou a j -tou hladinou, kde M_{ij} je maticí přechodu a právě v ní se výběrová pravidla projeví. Výběrová pravidla jsou vypočítaná pro určité podmínky (teplota, tlak), existují příklady, kdy nepaltí jsou například spektrální linie ve zředěném neonu a nebo polární záře - excitace kyslíku a dusíku ve vysokých výškách.

Jako příklad si uvedeme odvození výběrového pravidla pro magnetické kvantové číslo. Při excitaci elektronu musí dojít k interakci atomu a záření, tedy využijeme poruchový počet kvantové mechaniky. Zavedeme poruchový člen hamiltoniánu jako $\hat{W}_{nlmn'l'm'}$, který bude popisovat dnou interakci. V našem případě bude elektromagnetické záření interagovat s dipólovým momentem $e\vec{r}$. Maticový element poruchového členu nalezneme jako

$$W_{nlmn'l'm'} = \int \psi_{n'l'm'}^*(\vec{r}') e \vec{r}' \psi_{nlm}(\vec{r}') dV \quad (104)$$

Pokud je poruchový člen roven nule je přechod zakázaný a pokud je nenulový je povolen. Využijeme řešení ve tvaru (4.3), kde nás budou zajímat pouze funkce $\Phi_m(\varphi)$, které mají tvar

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \quad (105)$$

Vyjádříme kartézské složky ve sférických souřadnicích a dostaneme vztahy

$$\begin{aligned}x &= r \cos \varphi \sin \vartheta \\y &= r \sin \varphi \sin \vartheta \\z &= r \cos \vartheta \\dV &= r^2 \sin \vartheta dr d\vartheta d\varphi\end{aligned}$$

Poruchovou část hamiltoniánu tedy můžeme rozepsat do složek. Pro složku x platí

$$\begin{aligned}\int_0^{2\pi} \cos \varphi \Phi_m(\varphi) \Phi_{m'}^*(\varphi) d\varphi &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi} \cos \varphi d\varphi \\&= \frac{1}{2} && \text{pro } \Delta m = \pm 1 \\&= 0 && \text{pro } \Delta n \neq \pm 1\end{aligned}$$

Pro y-ovou složku dostáváme

$$\begin{aligned}\int_0^{2\pi} \sin \varphi \Phi_m(\varphi) \Phi_{m'}^*(\varphi) d\varphi &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi} \sin \varphi d\varphi \\&= \frac{1}{2} && \text{pro } \Delta m = \pm 1 \\&= 0 && \text{pro } \Delta n \neq \pm 1\end{aligned}$$

Pro z-ovou složku

$$\begin{aligned}\int_0^{2\pi} \Phi_m(\varphi) \Phi_{m'}^*(\varphi) d\varphi &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi} d\varphi \\&= 1 && \text{pro } \Delta m = 0 \\&= 0 && \text{pro } \Delta n \neq 0\end{aligned}$$

12.3.4 Symetrie v kvantové mechanice

Tak jako v klasické mechanice, i v kvantové mechanice odpovídá každé z invariancí zákon zachování: energie (homogenita času), hybnosti (homogenita prostoru), momentu hybnosti (izotropie prostoru). Je dokonce možné z těchto zákonů zachování odvodit fundamentální komutační relace.

12.3.5 Homogenita času

Předpokládejme, že v řase t_1 a t_2 začneme dva identické experimenty se systémem, který je izolovaný od okolí a který je připravený do téhož počátečního stavu. Homogenita času vyžaduje, aby po uplynutí téže doby τ byly obě vlnové funkce identické. Pro infinitesimální $\tau = \Delta t$ nacházíme z časové Schrödingerovy rovnice

$$\begin{aligned} |\psi_1(t_1 + \Delta t)\rangle &\approx \left(1 - \frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_1) \Delta t\right) |\psi_1(t_1)\rangle \\ |\psi_2(t_2 + \Delta t)\rangle &\approx \left(1 - \frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_2) \Delta t\right) |\psi_2(t_2)\rangle \end{aligned}$$

Je-li $|\psi_1(t_1)\rangle = |\psi_2(t_2)\rangle$ a požadujeme-li, aby $|\psi_1(t_1 + \Delta t)\rangle = |\psi_2(t_2 + \Delta t)\rangle$, pak

$$\hat{H}(t_1) = \hat{H}(t_2)$$

Hamiltonián tudíž nezávisí na čase. Jelikož časová změna střední hodnoty libovolného operátoru je dána výrazem

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle \quad (106)$$

položíme-li $\hat{A} = \hat{H}$, plyne z toho, že $\langle \hat{H} \rangle$ (čili energie) je konstantní v čase. Homogenita času ovšem implikuje, že na systém nepůsobí vnější časově proměnná pole.

12.3.6 Homogenita prostoru

Předpokládáme, že systém je popsán jednočásticovou Schrödingerovou rovnicí s hamiltoniánem

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \quad (107)$$

Přítomnost potenciální energie sygnalizuje, že systém není izolovaný, protože existují další částice, jejichž silové působení reprezentuje potenciální energie $V(\vec{r})$, ale jejichž proměny nevstupují do hamiltoniánu dynamicky. Zároveň s (5.2) uvažujeme systém, jenž vznikne posunutím půvosního systému o infinitesimální vzdálenost $\Delta \vec{a}$ a který je popsán hamiltoniánem

$$\hat{H}' = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V'(\vec{r}) \quad V'(\vec{r}) = V(\vec{r} - \Delta \vec{a}) \quad (108)$$

Je-li prostor homogenní musí být řešení Schrödingerovy rovnice popsané hamiltoniány (5.2) a (5.3) spojeny vztahem

$$\psi'(\vec{r}') = \psi(\vec{r}) \quad \vec{r}' = \vec{r} + \Delta \vec{a}$$

a pro infinitesimální $\Delta \vec{a}$ platí

$$\psi'(\vec{r}) = \psi(\vec{r} - \Delta \vec{a}) \approx \left(1 - \Delta \vec{a} \frac{d}{d\vec{r}}\right) \psi(\vec{r}) = \left(1 - \frac{i}{\hbar} \Delta \vec{r} \hat{p}\right) \psi(\vec{r})$$

můžeme tedy definovat operátor $\hat{T}(\Delta \vec{a})$, který zprostředkuje vztah mezi $\psi(\vec{r})$ a $\psi'(\vec{r})$

$$\psi'(\vec{r}) = \hat{T}(\Delta \vec{a}) \psi(\vec{r}) \quad \hat{T}(\Delta \vec{a}) = \left(1 - \frac{i}{\hbar} \Delta \vec{a} \hat{p}\right)$$

Od infinitesimální posunutí přejdeme nyní ke konečnému posunutí \vec{a} a chtěli bychom určit jak vypadá operátor hybnosti pro takové konečné posunutí $\hat{T}(\vec{a})$

$$\hat{T}(\vec{a}) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[1 - \frac{i}{\hbar} \frac{\vec{a}}{N} \hat{p}\right]^N = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \hat{p}}$$

Operátoru $\vec{p} = i\hbar \frac{\partial \hat{T}(\vec{a})}{\partial \vec{a}} \Big|_{\vec{a}=0}$ se proto říká generátor (grupy) translací. Pro funkci $\psi'(\vec{r})$ máme tedy dvě alternativní vyjádření

$$\begin{aligned} \psi'(\vec{r}) &= \psi(\vec{r} - \vec{a}) \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \hat{p}} \psi(\vec{r}) \end{aligned}$$

Všimneme si, že poloha těžiště klubek popisujících studované systémy je

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}' \rangle &= \int |\psi'(\vec{r})|^2 \vec{r} d^3x = \int |\psi(\vec{r} - \vec{a})|^2 \vec{r} d^3x \\ &= \langle \vec{r} \rangle + \vec{a} \end{aligned}$$

kdežto

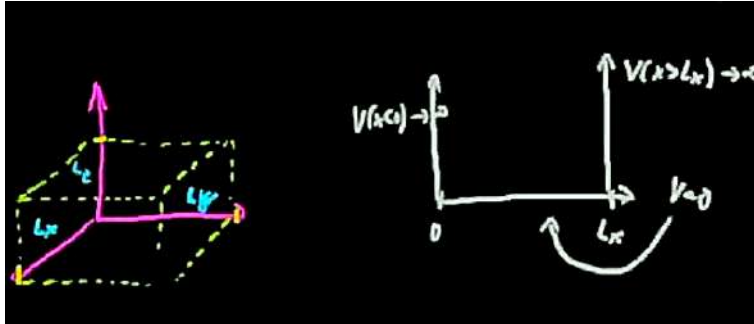
$$\langle \vec{p}' \rangle = \langle \vec{p} \rangle \quad (109)$$

jak jsme očekávali.

13 Jednoduché kvantové systémy

13.1 Kvantování energie pro vázanou částici: pravoúhlá potenciálová jáma a harmonický oscilátor.

Nekonečná pravoúhlá potenciálová jáma



Schrödingerova rovnice (3D případ)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \right) \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z)$$

- separace proměnných

$$\psi(x, y, z) = \psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z)$$

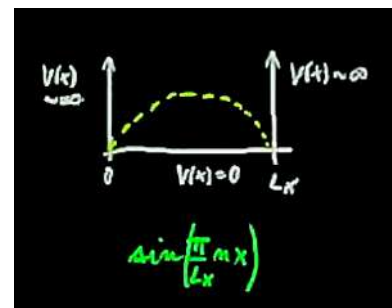
$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, y, z) = \psi_y(y)\psi_z(z) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_x(x)$$

Schrödingerova rovnice (1D případ)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x)$$

- V intervalu $\langle 0, L_x \rangle$ je potenciální energie $V = 0$
- Mimo tento interval je potenciální energie $V \rightarrow \infty$ a částice se zde nemůže vyskytovat, tedy $\psi(x) = 0$ mimo tento interval.
- Nulovost potenciálu na hranicích jámy zajistí volba vlastních funkcí operátoru ve tvaru **sinů**

$$\sin\left(\frac{\pi}{L_x}nx\right)$$

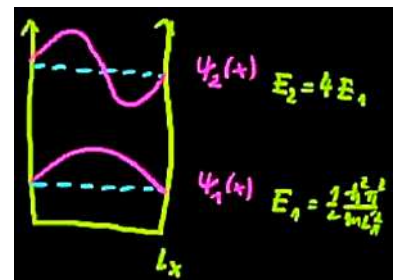


Dosadíme do Schrödingerovy rovnice a dostaneme předpis pro energie:

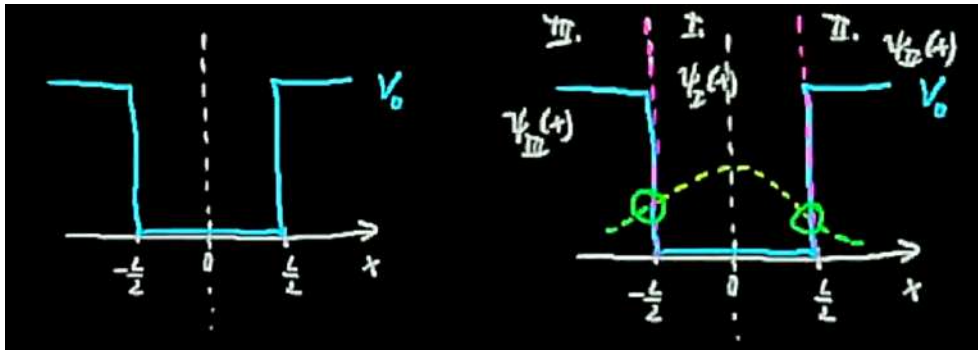
$$E_n = \frac{1}{2} \frac{\pi^2 \hbar^2}{m L_x^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Vlastní funkce po znormování pak mají tvar:

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\left(\frac{\pi}{L_x}nx\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots$$



Konečná pravoúhlá potenciálová jáma



Schrödingerova rovnice (1D případ)

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x) \psi(x) = E \psi(x)$$

Okrajové podmínky

- Pro hladké a spojitě napojení požadujeme v $-\frac{L}{2}$:

$$\psi_{\text{III}} \left(-\frac{L}{2} \right) = \psi_{\text{I}} \left(\frac{L}{2} \right)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \psi_{\text{III}}(x) \Big|_{x=-\frac{L}{2}} = \frac{\partial}{\partial x} \psi_{\text{I}}(x) \Big|_{x=-\frac{L}{2}}$$

- A dále v $\frac{L}{2}$:

$$\psi_{\text{I}} \left(\frac{L}{2} \right) = \psi_{\text{II}} \left(\frac{L}{2} \right)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \psi_{\text{I}}(x) \Big|_{x=\frac{L}{2}} = \frac{\partial}{\partial x} \psi_{\text{II}}(x) \Big|_{x=\frac{L}{2}}$$

Podmínka konečné pravděpodobnosti: $\psi_{\text{III}}(x \rightarrow -\infty) = 0$, $\psi_{\text{II}}(x \rightarrow \infty) = 0$

Ansatzy splňující dané podmínky

I. (Uvnitř jámy)

$$\psi_{\text{I}}(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx), \quad k \in \mathbb{R} \text{ libovolné}$$

II. $x > \frac{L}{2}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = (E - V_0) \psi(x)$$

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = \frac{(V_0 - E) 2m}{\hbar^2} \psi(x) \Rightarrow \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} \psi(x) = \xi \psi(x) \Rightarrow \cancel{e^{\alpha x}}; e^{-\alpha x}, \xi = \alpha^2$$

V oblasti II tedy dostáváme řešení: $\psi_{\text{II}} = C e^{-\alpha x}$

III. $x < -\frac{L}{2}$

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = \frac{(V_0 - E) 2m}{\hbar^2} \psi(x) \Rightarrow \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} \psi(x) = \xi \psi(x) \Rightarrow e^{\alpha x}; \cancel{e^{-\alpha x}}, \xi = \alpha^2$$

V oblasti III tedy dostáváme řešení: $\psi_{\text{III}} = D e^{\alpha x}$

QLHO

Řešení:

- možné řešit v souřadnicové reprezentaci
- mnohem lepší je řešit pomocí kreačních a anihilačních operátorů (tzv. Fockova reprezentace)

Uvažujme **nečasovou Schrödingerovu rovnici** ve tvaru:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \psi(x) = E \psi(x)$$



Anihilační a kreační operátory

- **anihilační operátor**

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (\hat{p} - i\omega m \hat{x})$$

- a hermitovsky sdružený **kreační operátor**

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (\hat{p} + i\omega m \hat{x})$$

- kde využíváme vztahů pro operátory:

$$\begin{array}{ll} \hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx} & \dots \text{ operátor hybnosti} \\ \hat{x} = x & \dots \text{ operátor polohy} \end{array}$$

- S využitím **komutační relace**

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

lze snadno ověřit, že platí

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2 = \hbar\omega \left(\hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} \right)$$

Operátory \hat{a} a \hat{a}^+ nejsou hermitovské, jsou však navzájem hermitovsky sdružené a platí $[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$.

Vlastní energie hamiltoniánu \hat{H}

- K nalezení **vlastních energií hamiltoniánu**
 \Leftrightarrow stačí najít **vlastní čísla operátoru počtu částic**

$$\hat{N} = \hat{a}^+ \hat{a}$$

řešíme tedy problém

$$\hat{N} \psi_\lambda = \lambda \psi_\lambda$$

kde λ jsou vlastní čísla a ψ_λ jsou příslušné vlastní stavy.

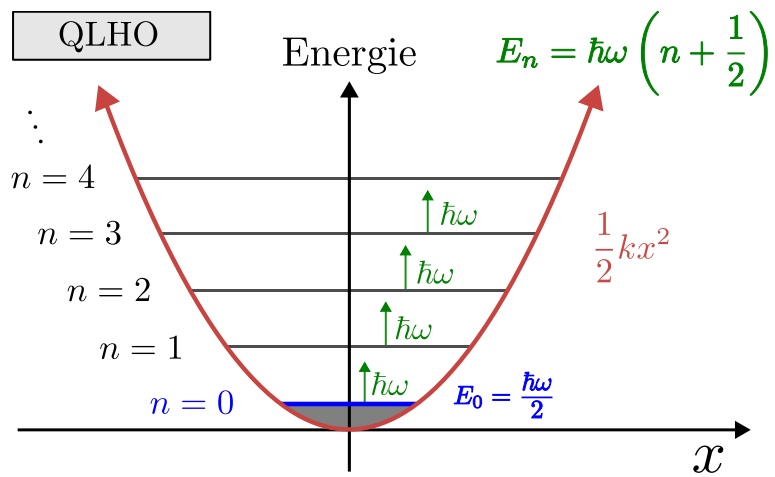
Předpokládáme normované vlastní vektory $\psi_\lambda \mid \psi_\lambda = 1$.



Úpravami dostaneme, že vlastní čísla operátoru \hat{N} jsou tedy rovna $\lambda = 0, 1, 2, \dots$

Vlastní energie hamiltoniánu jsou pak dány vztahem

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad \text{kde } n = 0, 1, 2, \dots$$



13.2 Volná částice, vlnové balíky, průchod částice potenciálovou bariérou.

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.

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$$

Jelikož jde o volnou částici nemá hamiltonián žádný člen odpovídající potenciální energii a tedy nečasové Schrödingerovy rovnice přejde na tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \Rightarrow \left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \right) \psi(x) = 0.$$

Pro energii volné částice platí $E \geq 0$, proto můžeme označit

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2,$$

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

$$\lambda^2 + k^2 = 0 \Rightarrow \lambda_{1,2} = \pm ik.$$

Výsledné dvě partikulární řešení rovnice (17.2) mají tvar

$$\psi(x) = e^{\pm ikx}.$$

Ze znalosti operátoru impulsu (hybnosti)

$$\hat{p}\psi(x) = -i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx} = \pm \hbar k \psi(x)$$

jsme schopni určit impuls částice p s vlnovou funkcí tvaru (17.5) jako

$$p = \pm \hbar k.$$

Vlnové funkce $\psi(x)$ tedy můžeme při použití vztahu (17.7) psát ve tvaru

$$\psi(x) = e^{\frac{-px}{\hbar}}.$$

Ze znalosti tvaru časově závislé části vlnové rovnice $\phi(t)$, která je výsledkem řešení nečasové Schrödingerovy rovnice

$$\phi(t) = e^{\frac{Et}{\hbar}},$$

můžeme výslednou časově závislou vlnovou funkci volné částice zapsat ve tvaru rovinné vlny

$$\psi(x, t) = e^{\frac{(Et - px)}{i\hbar}}.$$

Celková energie částice je rovna její kinetické energii

$$E = \psi \hat{H} \psi = \psi \hat{T} \psi = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$$

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

$$\psi(x) = \psi(x + L),$$

kde ψ je vlnová funkce (17.8) a L je délka intervalu, se kterým se vlnová funkce periodicky opakuje. To vede ke kvantování impulzu

$$p_n = \frac{2\pi\hbar n}{L}.$$

Na základě periodicity můžeme zavést normování při integraci přes libovolný interval délky L , takže dostáváme vlnové funkce s kvantovanými impulzy

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\frac{-ip_n x}{\hbar}}.$$

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

$$\delta(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} dx.$$

Normujeme-li prostorovou část vlnové funkce (17.10) vztahem

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{-px}{\hbar}},$$

dostaneme skalární součin

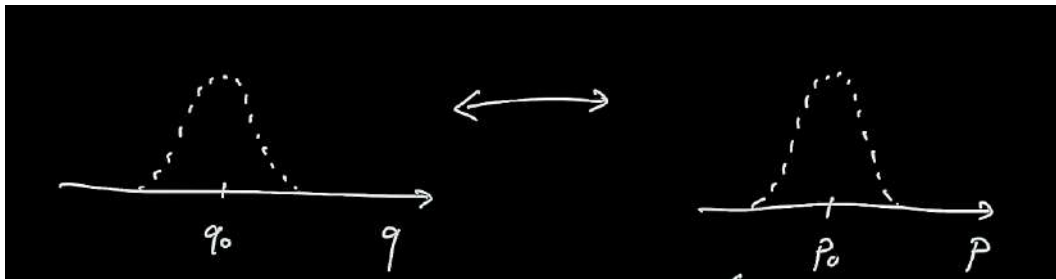
$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_p(x)^* \psi_{p'}(x) dx = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{(p-p')x}{\hbar}} dx = \delta(p - p'),$$

který odpovídá vztahu (17.15). 136 Obecné řešení časové Schrödingerovy rovnice pro trojrozměrný pohyb volné částice lze psát ve tvaru superpozice či lineární kombinace řešení (17.10)

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int c(\mathbf{p}) e^{\frac{E(\mathbf{p})t - \mathbf{p}\mathbf{r}}{i\hbar}} d^3\mathbf{p},$$

kde integrace probíhá přes celý třírozměrný prostor impulzů $d^3\mathbf{p}$ a funkce $c(\mathbf{p})$ je Fourierovým obrazem funkce $\psi(\mathbf{r}, 0)$.

Rozplývání vlnového balíku



Výchozí rozdělení hybností

$$\psi(x, t) = N \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{-\frac{(p-p_0)^2}{\Delta^2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}$$

Normalisace

$$\psi(x, t) = \left(\frac{2}{\pi\Delta^2}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{-\frac{(p-p_0)^2}{\Delta^2}} e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}$$

Časově závislý vlnový balík

$$\begin{aligned} (\delta x(t))^2 &\sim \frac{1}{\beta} + \frac{\alpha^2}{\mu} t^2 = \left(\frac{2\hbar}{\Delta}\right)^2 + \frac{\Delta^2}{\mu^2} t^2 \\ &= \delta^2 + \left(\frac{1}{\delta}\right)^2 \frac{4\hbar^2}{\mu^2} t^2 \end{aligned}$$

pro $t \rightarrow 0$ } anomálně
 $\mu \rightarrow \infty$ } rozplývání

Čím menší počet částic lokalizace,
 tím rychlejší rozplývání

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 spojitým 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

$$k = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar},$$

kde $E < V_0$. Výsledky tedy dostaneme záměnou $k \rightarrow i\kappa$, kde vlnový vektor 140

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} > 0$$

je reálný. Ze znalosti vztahu $\sin i\kappa a = i \sinh \kappa a$, dostaneme z rovnice (17.41) koeficient průchodu

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k_0}{\kappa} - \frac{\kappa}{k_0} \right)^2 \sinh^2 \kappa a},$$

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.

13.3 Orbitální a spinový moment hybnosti, základy skládání momentů hybnosti.

spinový a orbitální moment



spin – vlastní moment hybnosti elektronu neorbitálního původu
- složky splňují komutační relace momentu hybnosti

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar \hat{S}_z$$

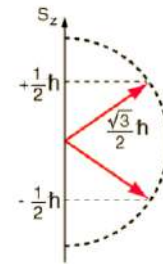


teoretický koncept 1925 Uhlenbeck (vlevo), Goudsmit (vpravo)

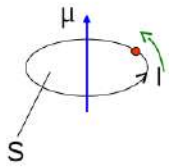
spin elektronu je kolmý k rovině "oběžné" dráhy a má vždy stejnou hodnotu $\frac{\hbar}{2}$

$$\hat{s}^2 = \hbar^2 l_s(l_s + 1) \quad l_s = \frac{1}{2}$$

$$\hat{s}_z = \hbar m_s = \pm \frac{\hbar}{2}$$



je spojen s magnetickým momentem $\vec{\mu}_s = -\frac{e}{m_e} \vec{s}$



1) **orbitální** magnetický moment (... moment proudové smyčky)

$$L = m_e r v$$

$$\mu_l = IS = -\frac{ev}{2\pi r} \pi r^2 = -\frac{1}{2} e r v = -\frac{e}{2m_e} m_e r v = -\frac{e}{2m_e} L = \gamma L$$

gyromagnetický poměr: $\gamma = \frac{\mu}{L}$

kvantování: $L^2 = \hbar^2 l(l+1) \quad L_z = \hbar m_l$

$$\mu_l = -\frac{e\hbar}{2m_e} \sqrt{l(l+1)} \quad \mu_{lz} = -\frac{e\hbar}{2m_e} m_l = -\mu_B m_l$$

Bohrův magneton: $\mu_B = 9.274 \times 10^{-24} \text{ A}\cdot\text{m}^2 \text{ (JT}^{-1}\text{)}$

2) **spinový** magnetický moment

$$\mu_s = -\frac{e\hbar}{m_e} \sqrt{l_s(l_s+1)}$$

$$\vec{\mu}_s = -\frac{e}{m_e} \vec{s} \quad \gamma_s = -\frac{\mu_s}{s} = -\frac{e}{m_e}$$

$$\mu_{sz} = -\frac{e\hbar}{m_e} m_s = -2\mu_B m_s = \pm \mu_B$$

skládání orbitálního a spinového momentu hybnosti:

1-elektronová aproximace

$$H = \sum_{i=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + \sum_{i=1}^N -\frac{Ze'^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}|} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e'^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

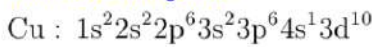
$$H_0 = \sum_i -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + \sum_{i=1}^N -\frac{Ze'^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}|} + \sum_{i=1}^N U^{el}$$

$$H_{kor} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e'^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \sum_i U^{el}$$

$$H_{SO} = \lambda \vec{L} \cdot \vec{S}$$

$$H = H_0 + H_{kor} + H_{SO}$$

elektronová konfigurace



Russel-Saundersova vazba

j-j vazba

n-elektronů v neuzavřené slupce $\binom{4l+2}{n}$ degenerace

skládání orbitálního a spinového momentu hybnosti:

$H_{kor} \gg H_{SO}$ Russel-Saundersova vazba

1) H_{kor} 1 elektron \vec{l}_i, \vec{s}_i

slupka n-elektronů $\vec{L} = \sum_{i=1}^n \vec{l}_i \quad \vec{S} = \sum_{i=1}^n \vec{s}_i$

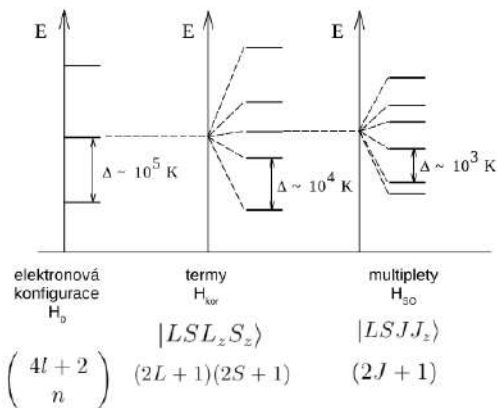
zcela zaplněná slupka $\vec{L} = 0, \vec{S} = 0$

2) H_{SO} celkový moment hybnosti

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad J_z = \hbar M_J$$

j-j vazba

$$\vec{j}_i = \vec{l}_i + \vec{s}_i \quad \vec{J} = \sum_{i=1}^n \vec{j}_i$$



jenná struktura

13.4 Částice ve sféricky symetrickém potenciálu, atom vodíku.

Atom vodíku

Podle klasické fyziky by atom vodíku ani žádné jiné atomy neměly být stabilní. Elektron by měl vyzářovat 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

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}.$$

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

$$\psi(r, \theta, \phi) = \psi_{nlm}(r, \theta, \phi),$$

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

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\Delta_{\theta, \phi}}{r^2} \right) \right] - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r},$$

kde operátor $\Delta_{\theta, \phi}$ je dán vztahem

$$\Delta_{\theta,\phi} = \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2}.$$

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

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y_{lm}(\theta, \phi),$$

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 $R(r)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} R = ER,$$

kde E je vlastní energie. Pro zjednodušení použijeme několik substitucí a zavedeme vhodné bezrozměrné jednotky

$$R(r) = \frac{u(r)}{r}, \quad \rho = \frac{r}{a_B}, \quad \text{kde} \quad a_B = 4\pi\epsilon_0 \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \quad \text{a} \quad \epsilon = \frac{E}{Ry},$$

kde a_B je Bohrov poloměr a Ry je jeden Rydberg, který je roven

$$Ry = \frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2}.$$

Bohrův 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

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} + \left[\epsilon + \frac{2Z}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u = 0.$$

Zdlouhavým a nechtuně matematickým řešením (viz. str. 127 v [1]) získáme vztah pro kvantované hodnoty energie vázaných stacionárních stavů atomu vodíku vzhledem k hlavnímu kvantovému číslu n

$$E_n = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z^2 e^2}{2a_B} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

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 . 144 Normované radiální funkce lze zapsat ve tvaru

$$R_{nl}(\xi) = N_{nl} e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^l L_{n-l-1}^{2l+1}(\xi),$$

kde N_{nl} je normovací koeficient a $L_k^s(\xi)$ jsou přidružené Laguerrovy polynomy. Celkové vlnové funkce vázaných stavů atomu vodíku mají tvar

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

a tvoří pro přípustné hodnoty n , lam 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

$$dp(r, \theta, \phi) = |\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)|^2 r^2 dr d\Omega,$$

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

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) \rightarrow (-1)^l \psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$$

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 diskretních 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 spojité 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.

13.5 Částice v elektromagnetickém poli: Zeemanovo štěpení hladin, Larmorova precese.

Zeemanovo štěpení hladin

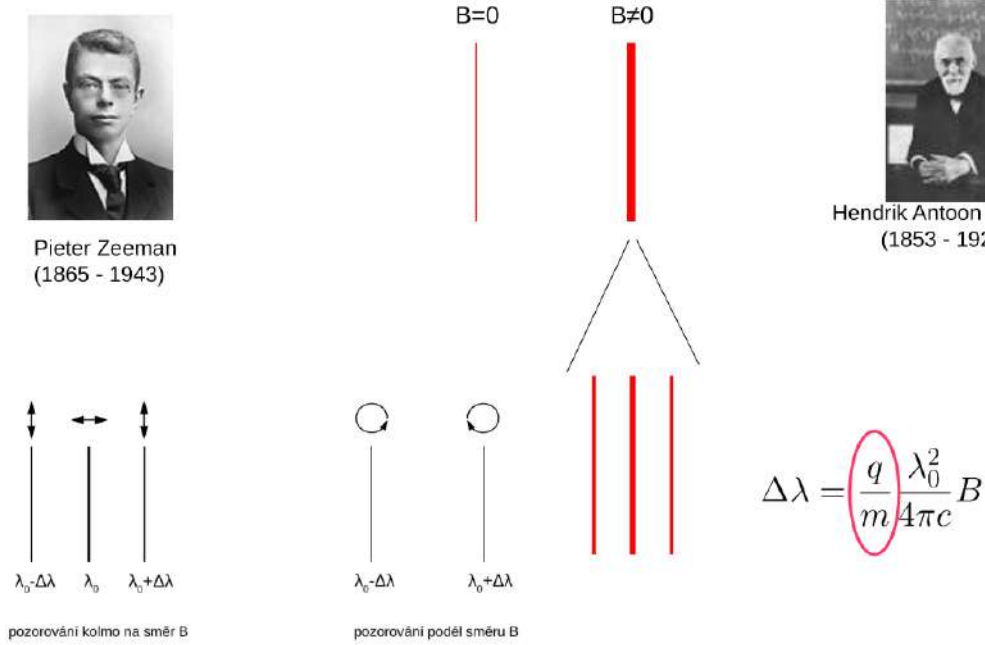
Zeemanův jev - rozštěpení spektrálních čar v magnetickém poli (1896)



Pieter Zeeman
(1865 - 1943)



Hendrik Antoon Lorentz
(1853 - 1928)



Zeemanův jev - rozštěpení spektrálních čar v magnetickém poli (1896)

normální Zeemanův jev

$$U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu_z B = m_l \mu_B B$$

$$\Delta m_l = 0, \pm 1$$

$$\Delta U = \Delta U_0$$

$$\Delta U_0 + \mu B$$

$$\Delta U_0 - \mu B$$

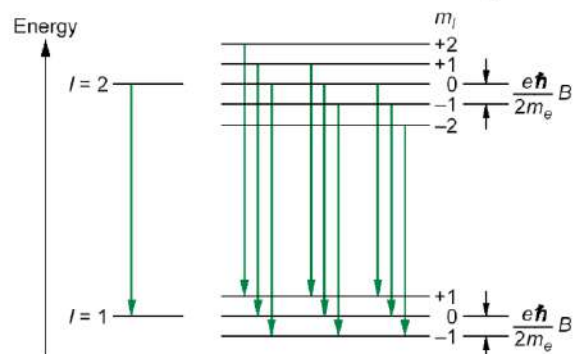


B = 0

B ≠ 0



Pieter Zeeman
(1865 - 1943)



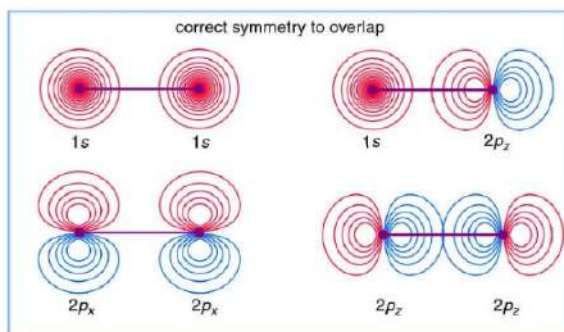
13.6 Systémy s více částicemi: nerozlišitelnost, Pauliho princip, jednočásticová aproximace.

Elektronová struktura molekul

- podmínky kombinace AO: 1. podobná energie atomových orbitalů
2. dostatečný překryv
3. vhodná symetrie atomových orbitalů

vznik vazebného a nevazebného MO

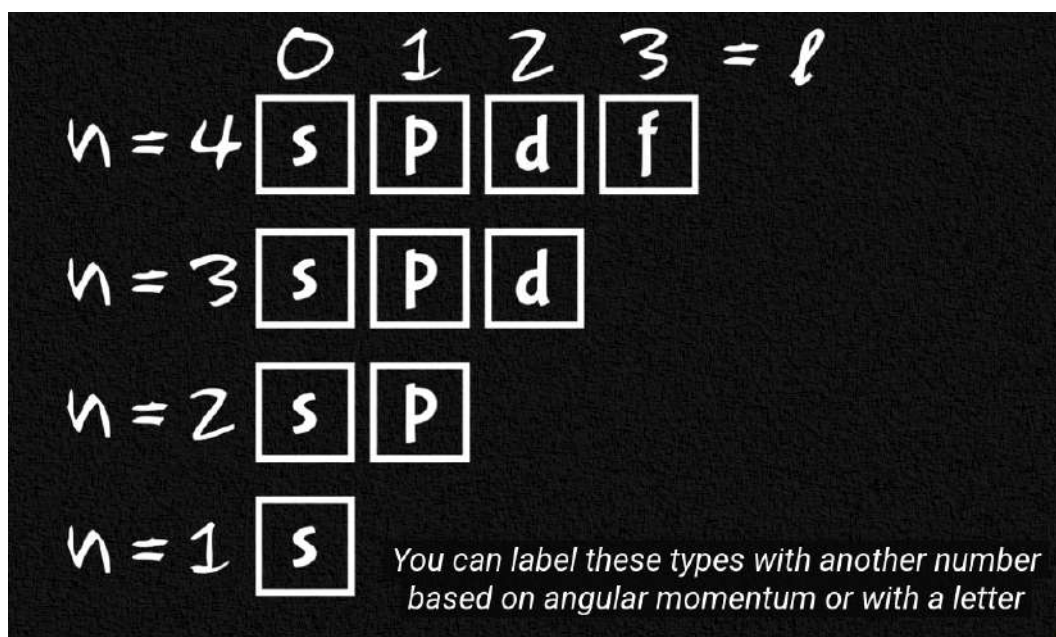
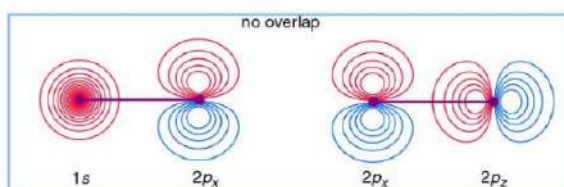
$$S > 0 \quad S < 0$$

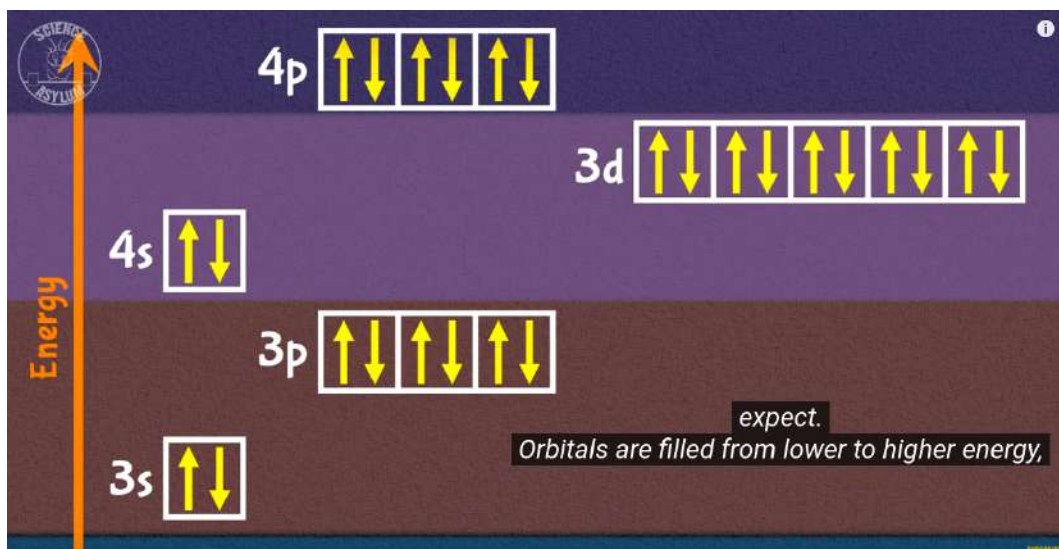
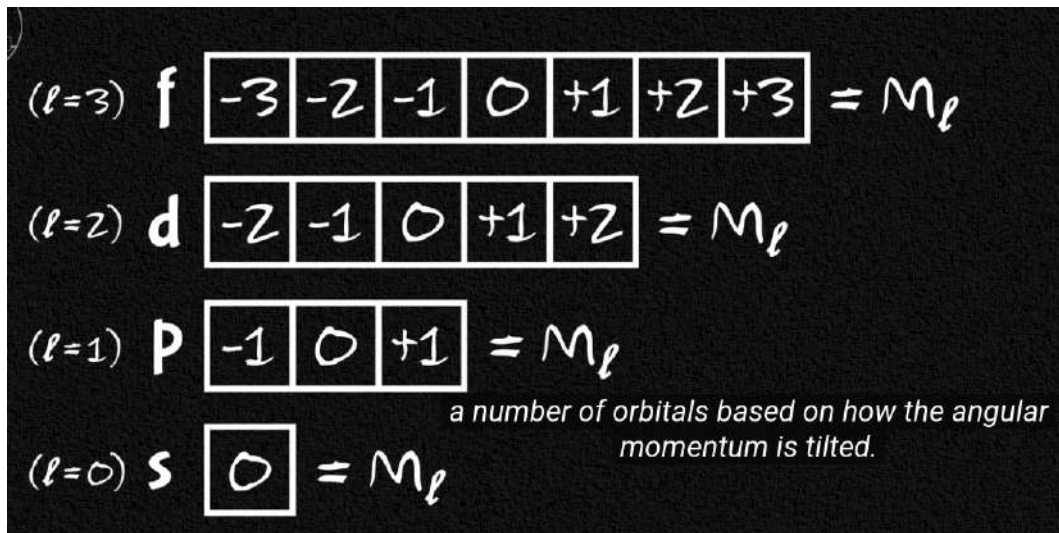


neúčinný překryv AO

$$S \sim 0$$

↓
nevazebné MO





Elektronová struktura atomů – víceelektronové atomy

$$H = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta - \frac{Ze^2}{r}}_{\text{jedno e}^- \text{ H}} \rightarrow H = \sum_{i=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + \sum_{i=1}^N -\frac{Ze^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}|} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}}_{\text{e}^- \text{e}^- \text{ interakce}}$$

$$H\Psi = E\Psi$$

zjednodušení: 1-elektronová **aproximace** – e⁻ se pohybuje pod vlivem ostatních e⁻, ve **středním poli**, které je důsledkem působení ostatních elektronů

$$H^{1e} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta - \frac{Ze^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}|} + U^{el}$$

$$U^{el}(\vec{r}) = -e \int d\vec{r}' \varrho(\vec{r}') \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

$$H^{1e} \Psi_i = E_i \Psi_i$$

nábojová hustota: $\varrho(\vec{r}) = -e \underbrace{\sum_i |\Psi_i(\vec{r})|^2}_{\text{hustota e- jako částic v r}}$

Hartreeho rovnice

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta \Psi_i(\vec{r}) - \frac{Ze^2}{|\vec{r} - \vec{R}|} \Psi_i(\vec{r}) + \left[\sum_j \int d\vec{r}' |\Psi_j(\vec{r}')|^2 \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right] \Psi_i(\vec{r}) = E_i \Psi_i(\vec{r})$$

Hartreeho přiblížení – nesplňuje podmínku antisymetrie (Pauliho princip)

$$\Psi(\vec{r}_1\sigma_1, \vec{r}_2\sigma_2, \dots, \vec{r}_N\sigma_N) = \Psi(\vec{r}_1\sigma_1)\Psi(\vec{r}_2\sigma_2) \dots \Psi(\vec{r}_N\sigma_N)$$

$$\Psi(\vec{r}_1\sigma_1, \dots, \vec{r}_i\sigma_i, \dots, \vec{r}_j\sigma_j, \dots, \vec{r}_i\sigma_i, \dots, \vec{r}_N\sigma_N) = -\Psi(\vec{r}_1\sigma_1, \dots, \vec{r}_j\sigma_j, \dots, \vec{r}_i\sigma_i, \dots, \vec{r}_N\sigma_N)$$

zobecnění – **Hartree-Fockova aproximace** (splňuje antisymetrii vlnové funkce)

$$\Psi(\vec{r}_1\sigma_1, \vec{r}_2\sigma_2, \dots, \vec{r}_N\sigma_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \Psi_1(\vec{r}_1\sigma_1) & \dots & \Psi_1(\vec{r}_N\sigma_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \Psi_N(\vec{r}_1\sigma_1) & \dots & \Psi_N(\vec{r}_N\sigma_N) \end{vmatrix}$$

H-F rovnice: Hartree + **výměnný člen**

$$\Delta\Psi_i(\vec{r}) + V^{ef}\Psi_i(\vec{r}) - \sum_j \int \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \Psi_j^*(\vec{r}')\Psi_i(\vec{r}')d^3\vec{r}'\Psi_j(\vec{r})\delta_{\sigma_i\sigma_j} = E_i\Psi_i(\vec{r})$$

14 Jaderné záření

14.1 Interakce jaderného záření s látkou.

Typy interakcí

Jaderné záření si představujeme jako tok částic (elementární částice, ionty, jádra prvků ..). Rozlišujeme 4 druhy základních interakcí s látkou:

- **elektromagnetická** - nabité 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.

Pojmy

- **Účinný průřez**

- Význam je pravděpodobnost interakce částic
- Značíme σ
- jednotkou jsou barny $1b = 10^{-28}m^{-2}$

- **Počet interakcí**

$$N = \sigma \cdot j \cdot N_{\text{target}} = N_{\text{beam}} \cdot \sigma \cdot T \cdot n_{\text{target}},$$

kde j je tok částic, T je tloušťka terče, N jsou počty částic a n je hustota počtu částic.

- **Diferenciální účinný průřez**

- Vyjádření účinného průřezu v závislosti na směru $\frac{d\sigma}{d\Omega}$
- hodí se např. v Rutherfordově pokusu

- **Pravděpodobnost přežití**

- Význam: jakou má částice šanci na projití dráhy T aniž by jakkoliv interagovala s okolím
- Značíme p
- Tuto pravděpodobnost vypočteme celkem snadno z **počtu interakcí**, když si uvědomíme, že počet událostí vlastně znamená změnu počtu částic ve svazku

$$N_{\text{beam}}(T) = N_{\text{beam}}(0) \exp(-\sigma n_{\text{target}} T) \rightarrow p(t) = \frac{N_{\text{beam}}(T)}{N_{\text{beam}}(0)} = \exp(-\sigma n_{\text{target}} T).$$

- **Střední interakční délka**

- Definována jako

$$\tau = \int_0^{\infty} T \cdot p(T) dT = \frac{1}{\sigma n_{\text{target}}}.$$

- Význam: vzdálenost, kterou musí částice v materiálu urazit, aby jednou zainteragovala.

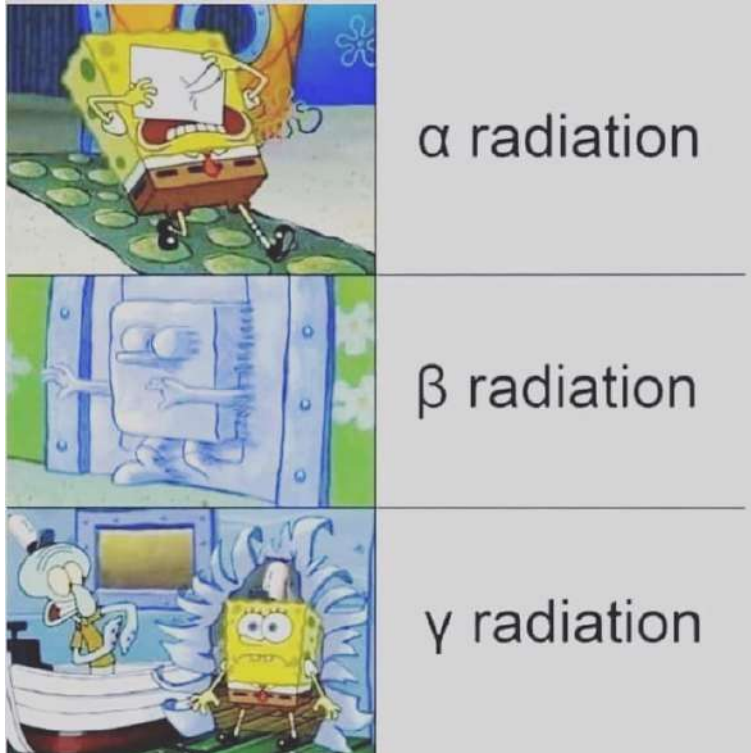
- **Braggova křivka**

- Význam: závislost energetických ztrát $\frac{dE}{dx}$ na x dráze částice v materiálu
- Neutrální částice detekujeme podle sekundárních produktů jejich interakcí.

- **Střední volná dráha částice**

$$l = \frac{1}{n\sigma}$$

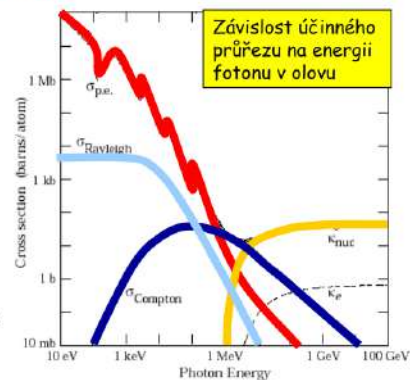
Průchodnost záření



- těžké částice
- lehké částice
- fotony

Interakce fotonů

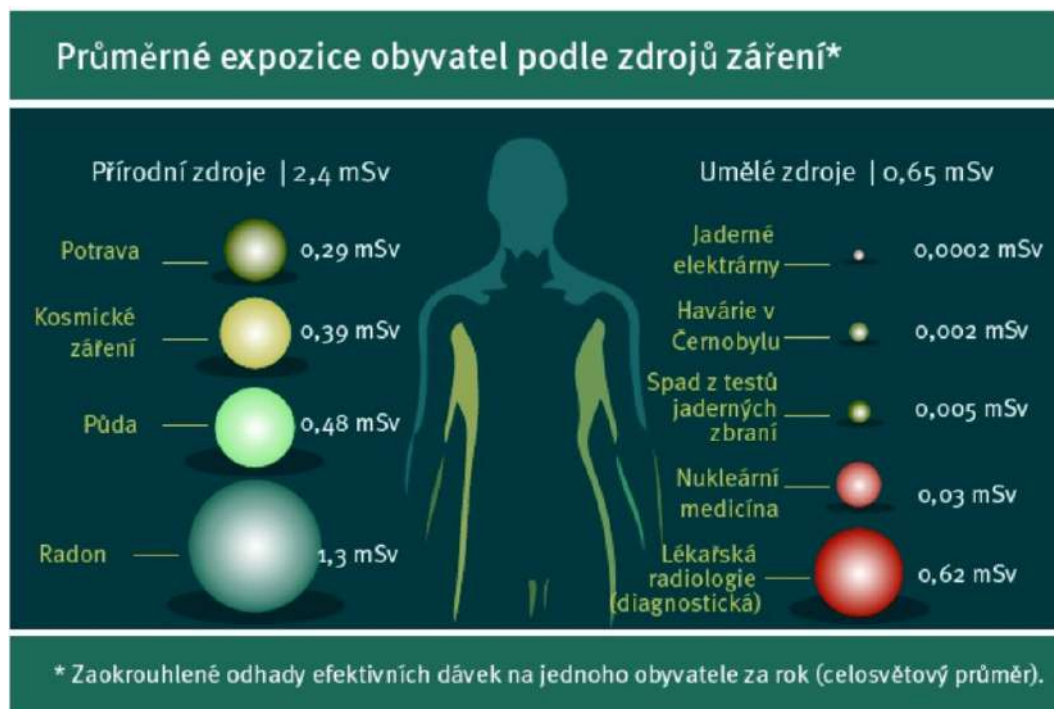
- **Fotoefekt** – vyražení e^- nejčastěji z K-slupky, doprovázeno emisí charakteristického záření při přeskoku “vnějšího” e^- do “díry” po uvolněním e^-
- **Rayleighův (pružný) rozptyl** – nízkoenergetické fotony ($E_\gamma < 10$ keV) excitují atom, vyzáří se foton se stejnou energií, ale v jiném směru



- **Comptonův rozptyl** – foton se rozptýlí na kvazivolném e^-
- **Tvorba e^+e^- párů** – buď v **poli jádra** (pravděpodobnější) nebo v poli e^- , různé energetické prahy!

35

Biologické účinky záření



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 (Bq)
- vypovídá o intenzitě uvolňování záření ze zářiče. Přesně je to množství jaderných přeměn za jednotku času ($1Bq = 1\text{přeměna}/1s$).
- Běžná aktivita zářičů v praxi, které nejsou vůbec zdraví nebezpečné, je 100 kBq.

- **Dávka**

- udává se v grayích (Gy)
- Říká nám jaké množství energie záření se předalo jednotce hmotnosti prostředí ($1Gy = 1J/1kg$).

- **Dávkový ekvivalent**

- udává se v sievrtech (Sv)
- Oproti dávce 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 mSv/rok

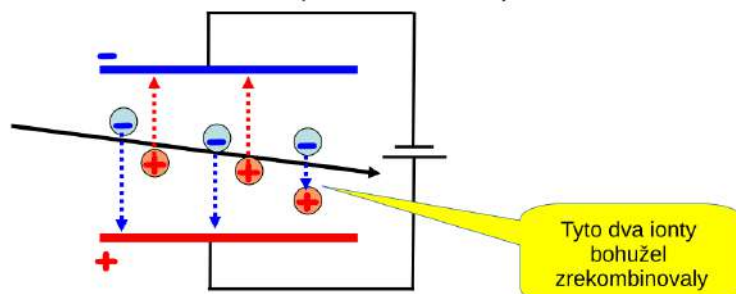
14.2 Detekce a spektroskopie jaderného záření.

Minulé detektory

- fotoemulze
- bublinkové a mlžné 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.

Dnešní detektory

- plynové ionizační detektory
 - letící částice ionizuje plyn uvnitř detektoru
 - vlivem elektrického pole se ionty a elektrony pohybují k elektrodám, kde naměříme elektrický proud
 - přesná funkce detektoru závisí na přiloženém napětí

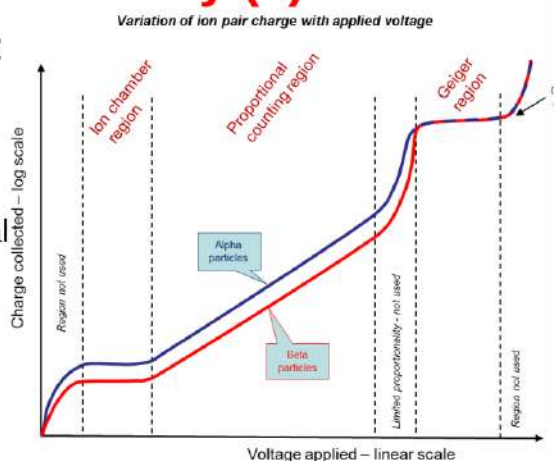


- Geiger-Muellerův počítač
 - * tak vysoké napětí, že jeden pár způsobí výboj v plynu
 - * sekundární laviny vznikají díky deexcitaci, kdy fotony pomocí fotoefektu uvolňují v plynu další elektrony

Plynové ionizační detektory (2)

- Vlastnosti záleží na plynu a napětí:

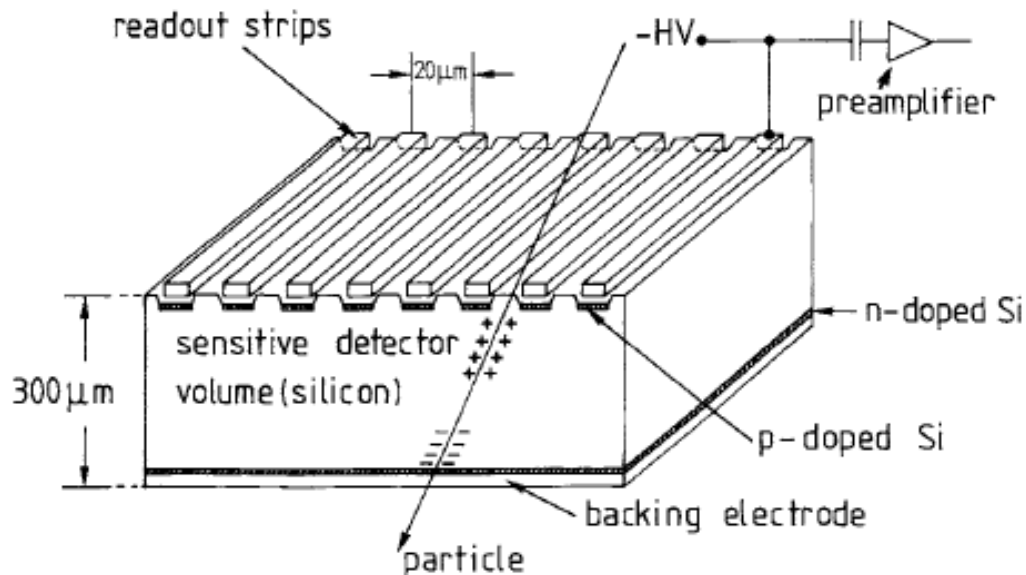
- **ionizační oblast** - úplný sběr náboje, ale žádné zesílení
- **proporcionální oblast** - v plynu dochází k zesílení, ale výsledný signál je úměrný ztracené energii primární částice
- **Geigerova oblast** – masívní fotoemise, dochází k výboji



- Energie potřebná na vznik iontů je v plynu **20-40 eV**. Např. v argonu je tato energie 26 eV, minimální ionizační ztráty v argonu jsou $dE/dx = 2,5 \text{ keV/cm}$, tzn. na **1 cm** vznikne přibližně **100 párů** – náboj (+ i -) je $100 \times 1,6 \times 10^{-19} \text{ C}$! To není jednoduché naměřit. Potřebujeme zvýšit počet iontů – zesílit signál!

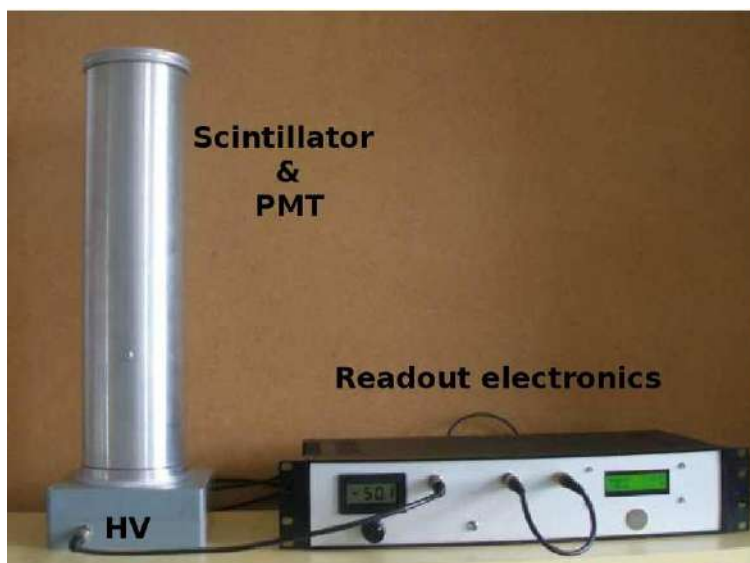
- polovodičové detektory

- dodáme-li elektronu ve valenčním pásu energii (průletem částice, tepelnými fluktuacemi, světlem) větší než je šířka zakázaného pásu (u křemíku 1,1 eV) přeskočí do pásu vodivostního a ve valenčním pásu vznikne díra, která se chová jako kladný náboj.
- křemíkový stripový detektor (obdoba mnohohrátové komory, ale na bázi polovodiče)



- scintilační detektory

- Scintilátor se po excitaci molekul nabitou částicí deexcituje, část energie je vyzářena ve formě záření (viditelné či UV)
 - světelný signál je třeba odvést světlovodem a detekovat
- Nejčastější typy a použití
 - * plastické: nízké Z (vhodné pro β), rychlá odezva
 - * krystaly: vyšší Z (možná detekce γ), vyšší světelný výtěžek, pomalejší odezva



- Čerenkovského detektory

- Nabitá částice emituje ČZ, pokud je její rychlost větší než rychlost světla v daném prostředí ($\beta > 1/n$)

- * záření (viditelná či UV oblast) vysíláno pod úhlem θ_c vůči směru letu částice,

$$\cos(\theta_c) = 1/(\beta n)$$

- * detekce záření pomocí fotonásobiče

- Čerenkovské radiátory

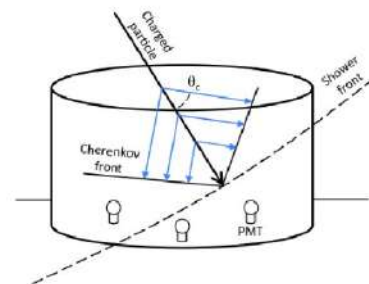
- * plyny: změnou tlaku p lze jednoduše regulovat index lomu n a tím i práh emise ČZ ($p \approx n - 1$)

- * kapaliny: např. voda

- * některé krystaly

Čerenkovské detektory (2)

- Příklad: vodní nádrž s detekcí ČZ fotonásobiči



- ČZ vidíme také uvnitř jaderného reaktoru

Spektroskopie

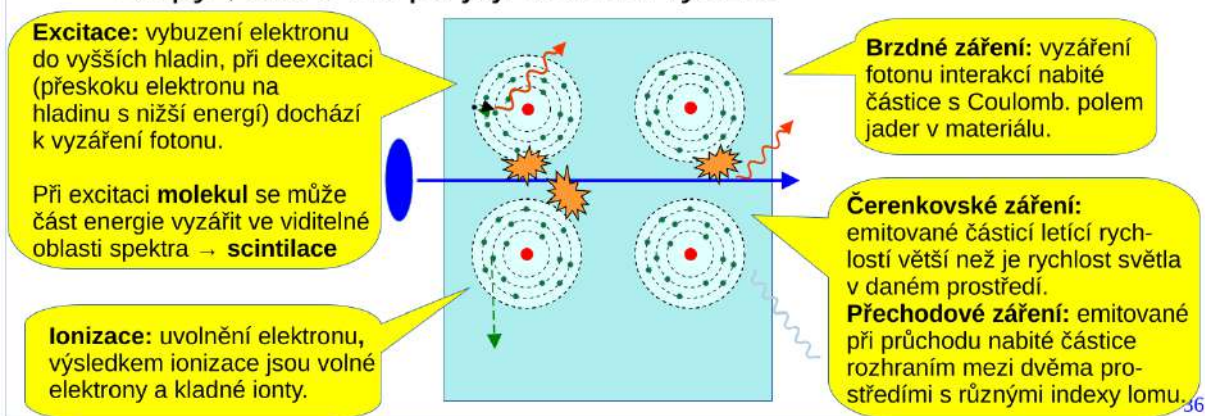
Spektrometrie se zabývá měřením energie záření (resp. částic). Pro různé typy částic byly vyvinuty různé typy detekce a výpočtu energií:

- **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 udát 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).

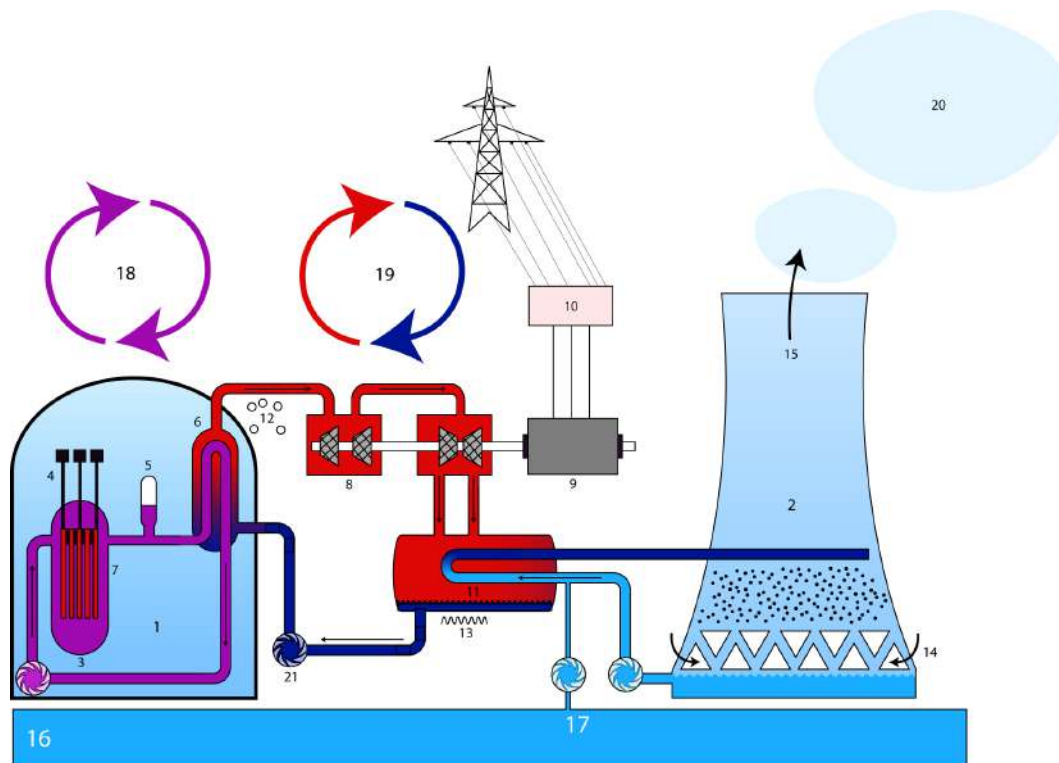
Interakce nabitých částic (1)

- Letící nabitá částice **excitací** či **ionizací** látky ztrácí energii, brzdí se. Svou energii ztrácí také **zářením**. Všechny tyto procesy znamenají, že částice „zanechává stopy“, které lze při její detekci využít.



14.3 Využití jaderného záření.

Jaderné elektrárny



Obrázek: Schéma jaderné elektrárny. Význam jednotlivých čísel: 1. Reaktorová hala, uzavřená v nepropustném kontejneru. 2. Chladicí věž. 3. Tlakovodní reaktor. 4. Řídicí 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. Plynný stav. 13. Kapalným 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

Aplikace v medicíně (1)

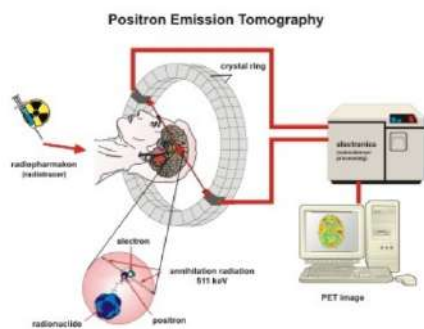
- RTG snímky



- PET (positron emission tomography)
 - β^+ radioaktivní prvek s krátkou dobou života se vpraví pacientovi do těla
 - např. ^{18}F ($T_{1/2} \approx 100$ min), který je "zabudován" do glukózy (^{18}F -FDG)
 - pozitron emitovaný v β^+ rozpadu se rychle zastaví a anihiluje, detekujeme 2 γ -kvanta ($E_\gamma = 511$ keV) letící do opačných směrů

Aplikace v medicíně (2)

- PET (pokračování)
 - z výsledků měření se počítačově rekonstruuje obraz zkoumané části těla



15 Atomové jádro

15.1 Základní vlastnosti a charakteristiky jádra.

Vlastnosti jádra

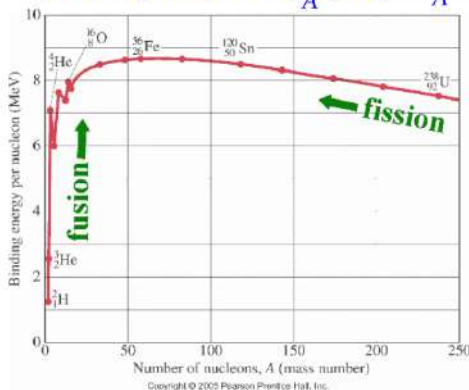
- Složení: protony a neutrony
 - izospin kvůli zjednodušení popisu
- Hmotové (A) a nábojové (Z) číslo, vazbová energie $B(A,Z) = Z \cdot m_p + (A-Z) \cdot m_n - M(A,Z)$
- Poloměr $R \approx R_0 \cdot A^{1/3}$, měření formfaktoru v $e-X$ rozptylu
- Spin, parita J^P
 - základní stav S-S jádra 0^+
- Magnetický moment $\vec{\mu} = a \frac{e\hbar}{2m_p} \frac{\vec{J}}{J}$
 - vyjadřujeme v jednotkách jaderného magnetonu $\frac{e\hbar}{2m_p}$

Modely jádra

- Kapkový model

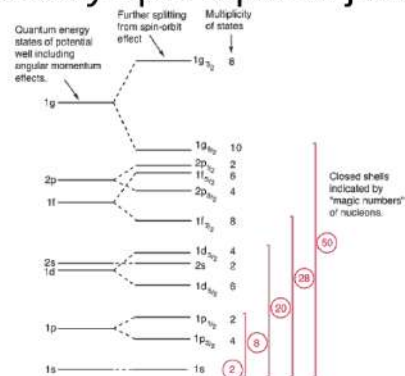
- přibližně vysvětluje vazbovou energii

$$B(A, Z) = a_v A - a_s A^{2/3} - a_c \frac{Z^2}{A^{1/3}} - a_a \frac{(A-2Z)^2}{A} \pm \frac{\delta}{A^{3/4}}$$



- Slupkový model

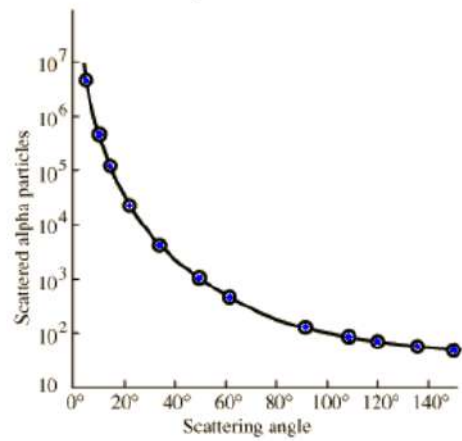
- potenciálová jáma pro p i n
- vysvětluje magická čísla, celkový spin a paritu jader



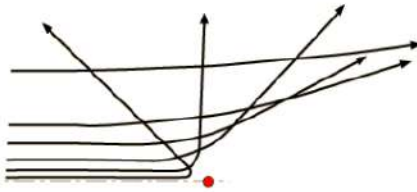
121

Elektronová struktura atomů - spektra

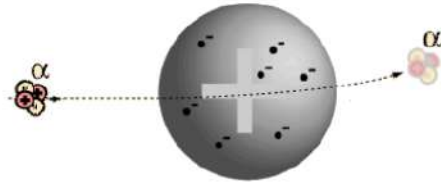
Rutherfordův pokus



Rutherfordův model



~~Thomsonův model~~



$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{Ze'^2}{4E} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}$$

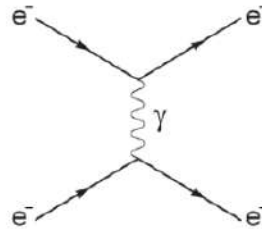
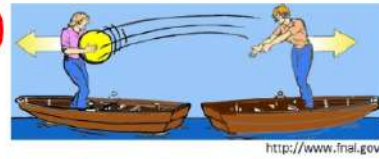
$$e'^2 = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)$$

15.2 Jaderné síly, vazbová energie jádra.

Jaderné síly (1)

- Interakce mezi částicemi se dějí pomocí výměny (virtuální) částice
 - takto popíšeme všechny síly s výjimkou gravitace
- Příklad: výměna fotonu pro **elmg** interakci
 - Coulombický potenciál má "nekonečný dosah"

$$V(r) = \pm \frac{\alpha}{r}$$
 - hmota fotonu $m_\gamma = 0$



- Jaderné síly lze popsat pomocí výměny pionů
 - Yukawův potenciál

$$V(r) \propto -\frac{1}{r} e^{-m_\pi r}$$
 - hmota pionu $m_\pi \approx 140 \text{ MeV}$
 - konečný dosah interakce

$$\frac{\hbar c}{m_\pi c^2} = 1.4 \text{ fm}$$

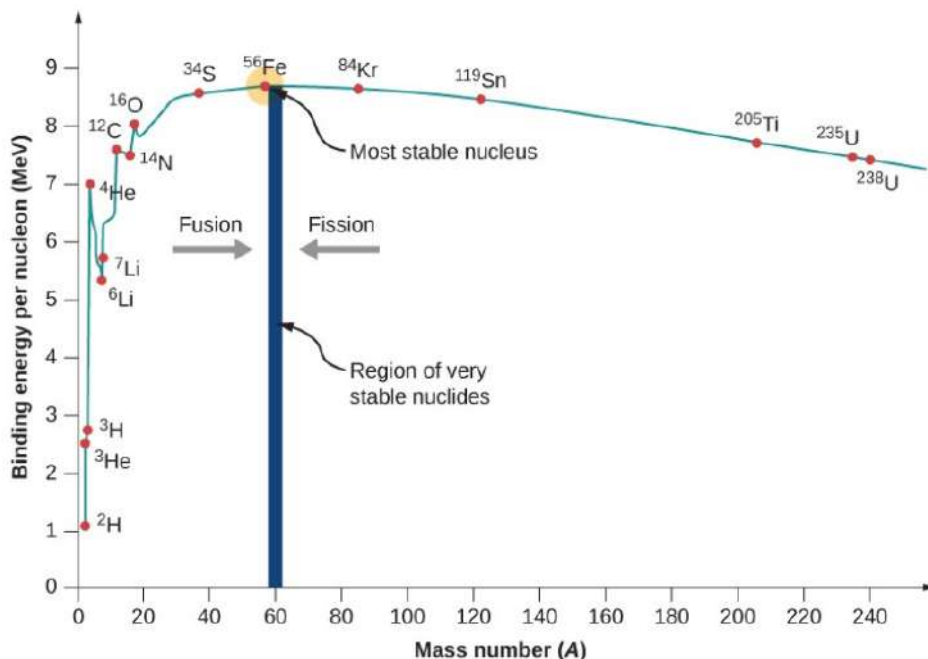
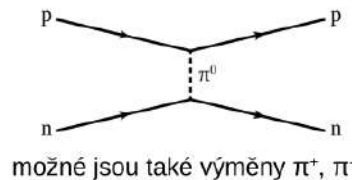
1935: Yukawa přichází s vysvětlením jaderné síly pomocí výměny nových částic - mezonů

1936: Objev mionu ($m=109\text{MeV}/c^2$), nejprve mylně pokládán za hledaný mezon

1947: Objev π mezonu



Hideki Yukawa (1907-1981)



15.3 Radioaktivita, jaderné reakce.



Radioaktivita



- Střední doba života τ , poločas rozpadu $T_{1/2}$
- Aktivita $A(t) = N(t)/\tau$, jednotka Bq
- Rozpady α (silná interakce) ${}^A_Z X \rightarrow {}^{A-4}_{Z-2} Y + \alpha$
 - 4 rozpadové řady
 - dlouhé poločasy rozpadu, tunelový jev
- Rozpady β vlivem slabé interakce
 - β^- (${}^A_Z X \rightarrow {}^A_{Z+1} Y + e^- + \bar{\nu}_e$), β^+ (${}^A_Z X \rightarrow {}^A_{Z-1} Y + e^+ + \nu_e$), K-záchyt ($e^- + {}^A_Z X \rightarrow {}^A_{Z-1} Y + \nu_e$)
 - postulování existence neutrina
- γ přechody (elmg interakce)
 - deexcitace jádra z vyšších hladin do nižších

$$N(t) = N(0) \cdot e^{-t/\tau}$$
$$T_{1/2} = \ln(2) \tau$$

123

Jaderné reakce

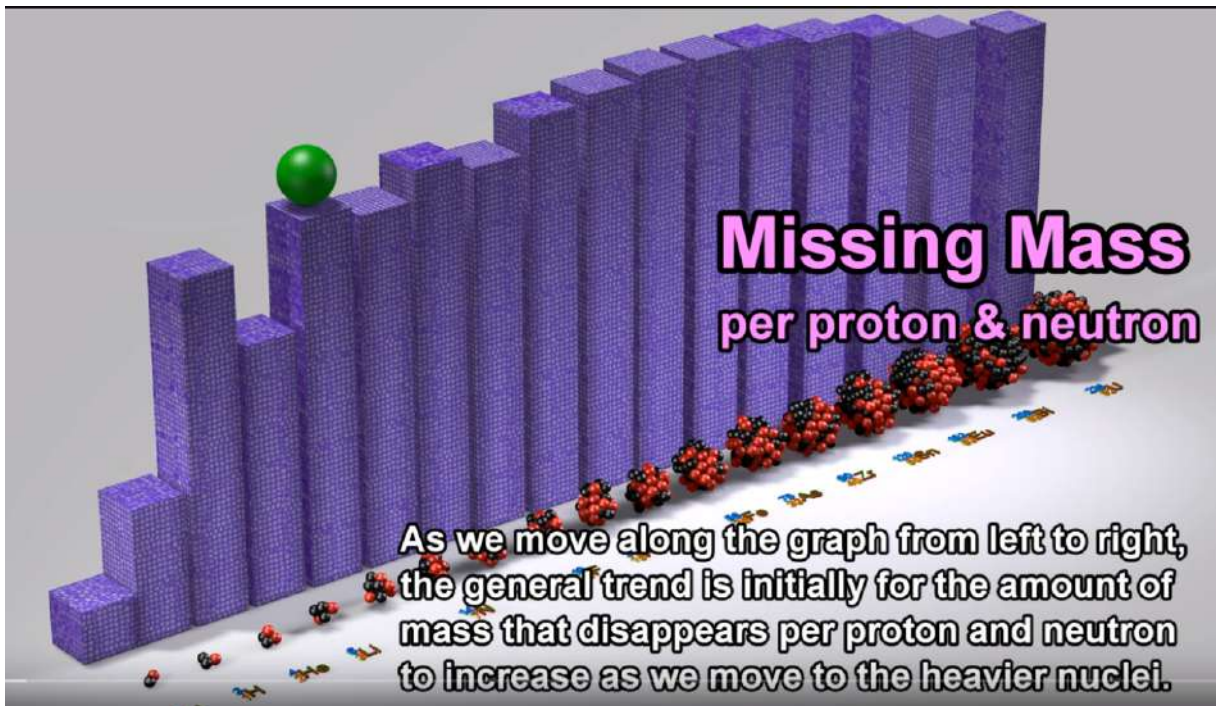
- Mnoho typů: (n,p), (n, γ), (n,f), (α ,n), ...
- Exotermické ($Q > 0$) vs endotermické ($Q < 0$)
- Fúze – slučování lehkých prvků
 - pp a CNO cyklus ve Slunci, $Q = 26.7$ MeV
 - kromě fotonů též produkce ν_e
- Štěpení těžkých prvků v jaderných reaktorech
 - palivo ${}^{235}\text{U}$, nutné obohacení přírodního U (99.3% ${}^{238}\text{U}$)
 - $n + {}^{235}\text{U} \rightarrow X + Y + k \cdot n + m \cdot \gamma$, produkty X, Y se dále rozpadají β , celková bilance $Q \approx 200$ MeV
 - silný zdroj $\bar{\nu}_e$ (v průměru 6 $\bar{\nu}_e$ na jedno štěpení)



Basic Hydrogen Fusion



About 50 electrons worth of mass, which is enough to worry about.



15.4 Jaderné zdroje energie.

v

16 Částicová fyzika

16.1 Fundamentální částice (kvarky, leptony, intermediální bosony).

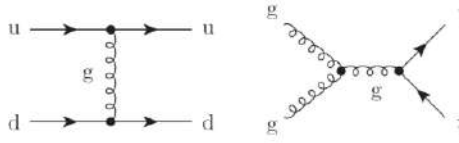
- Podle spinu: **fermiony** vs **bosony**
 - Pauliho princip, Bose-Einsteinova statistika
- Podle interakcí: **hadrony** (baryony, mezony) vs **leptony**
- Kvantová čísla a zákony zachování
 - aditivní: B, L, podivnost S, hypernáboj $Y=B+S$
 - multiplikativní: parita P, nábojová parita C
 - spin-like: spin (orbitální, resp. celkový moment hybnosti) J, izospin I

Veličina	Silná	Elmg	Slabá
E, p, J	✓	✓	✓
B, L	✓	✓	✓
I	✓	✗	✗
S, Y	✓	✓	✗
P	✓	✓	✗
C	✓	✓	✗
CP	✓	✓	"skoro"
CPT	✓	✓	✓

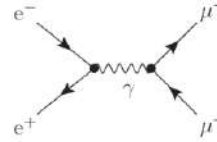
16.2 Základní interakce (elektromagnetická, slabá a silná).

- Příklady interakcí – Feynmanovy diagramy

- silná (kvarky a gluony)

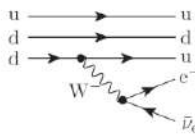


- elmg (nabité částice a foton)

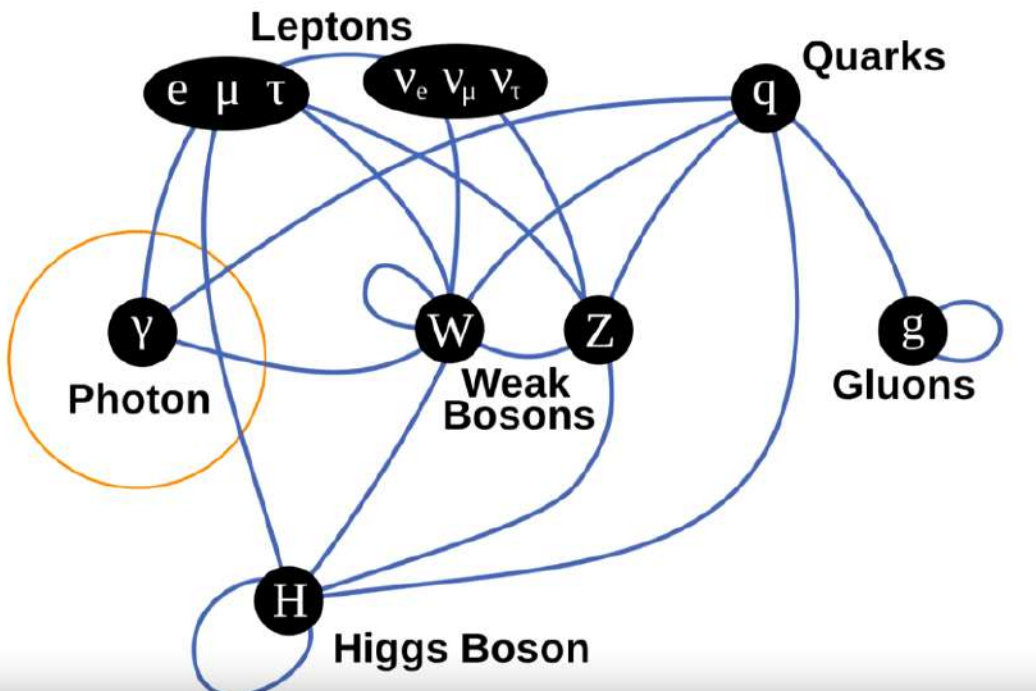
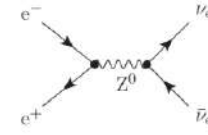
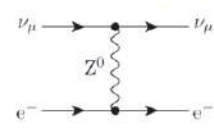


- slabá

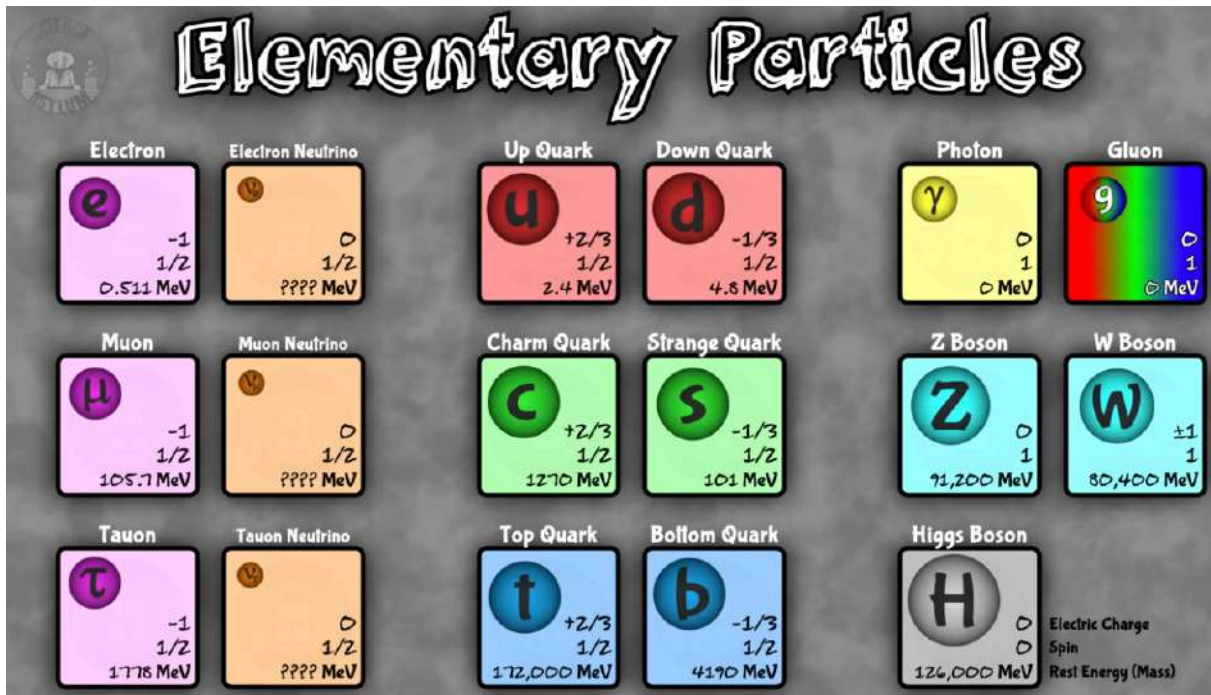
$n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e$ (CC)



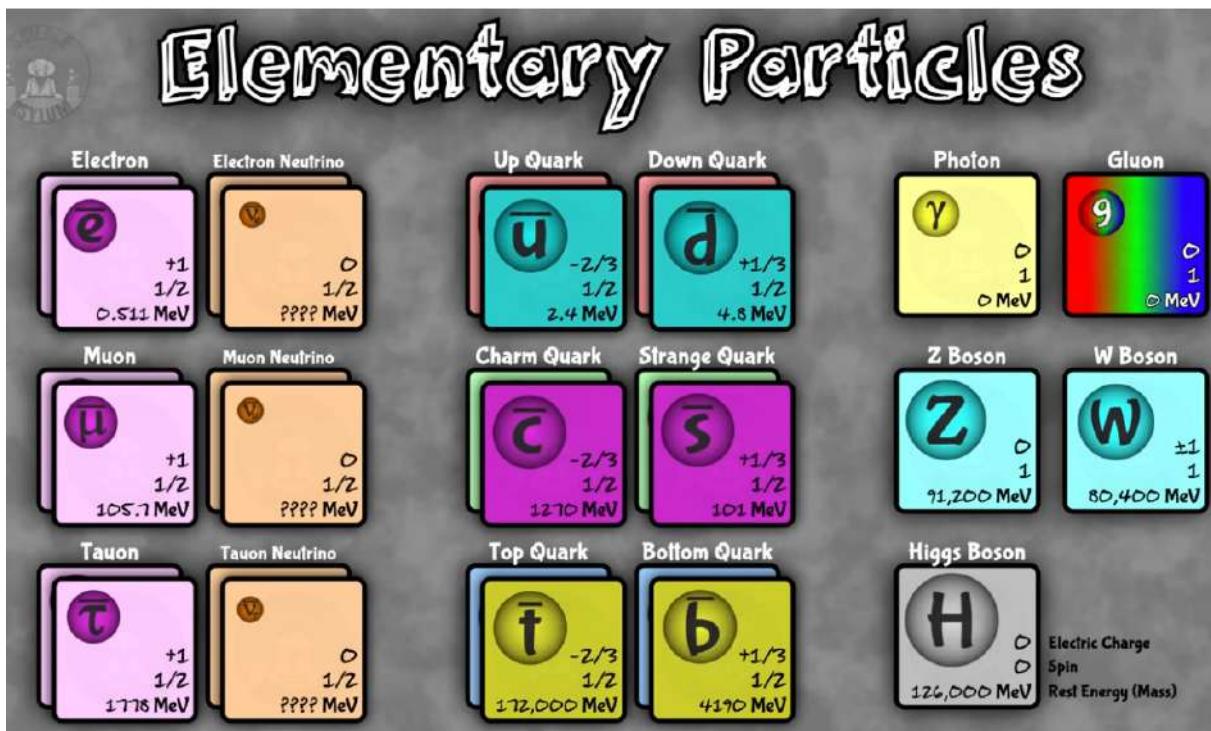
$\nu_\mu + e^- \rightarrow \nu_\mu + e^-$ (NC)



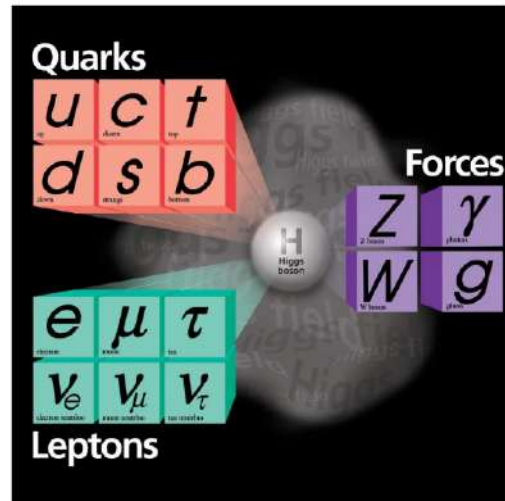
16.3 Standardní model elementárních částic.



Antičástice

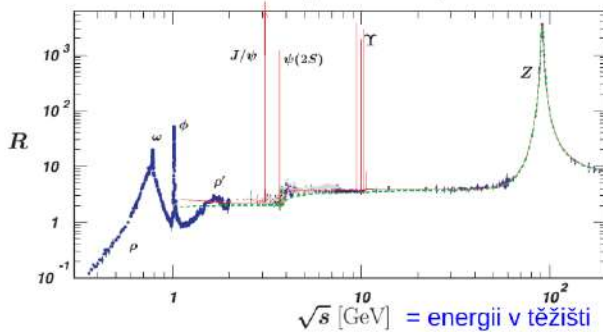


- Celkem 3 rodiny fermionů
 - 6 kvarků, 6 leptonů
- Síly zprostředkovány výměnou bosonů (spin 1)
 - silná: gluony
 - elmg: foton
 - slabá: W^+ , W^- , Z^0
- Higgsův boson (spin 0)
"dává částicím hmotu"

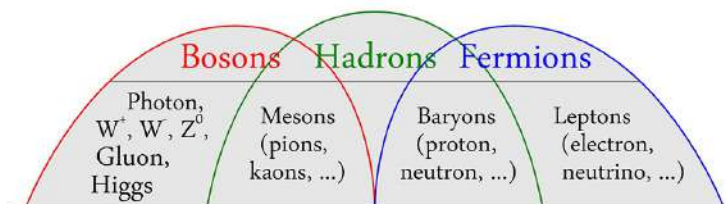


16.4 Vazba částic, barevný náboj, asymptotická volnost, gluony.

- mezony ($q\bar{q}$):
 - základní: π^+ ($u\bar{d}$), π^- ($d\bar{u}$), π^0 ($(u\bar{u}-d\bar{d})/\sqrt{2}$), K^+ ($u\bar{s}$), K^0 ($d\bar{s}$), K^- ($s\bar{u}$), \bar{K}^0 ($s\bar{d}$), ... (tzv. pseudoskalární mezony, $J^P = 0^-$)
- Existence barvy (3 stavy – červená, modrá, zelená)
 - teoretické důvody: Δ^- (ddd), Δ^{++} (uuu), Ω^- (sss) a Pauliho princip
 - experiment: $R = \sigma(e^+e^- \rightarrow \text{hadrony})/\sigma(e^+e^- \rightarrow \mu^+\mu^-) \approx 2$ pro $\sqrt{s} < 3 \text{ GeV}$
 - pozor: hadrony jsou “bezbarvé” (barevné singlety)
- Existují další těžší kvarky (c, b, t), celkem je jich 6
- Kromě teoretických důvodů (antisymetrie celkové vlnové funkce baryonů) se barva projeví i v experimentu
 - měření $R = \sigma(e^+e^- \rightarrow \text{hadrony})/\sigma(e^+e^- \rightarrow \mu^+\mu^-)$
 - nárůst nad prahem produce kvarku c (i b, ale blbě vidět)



- Poznámky:
 - nárůsty jsou špatně vidět díky logaritmické škále na svislé ose
 - píky odpovídají hmotě rezonancí

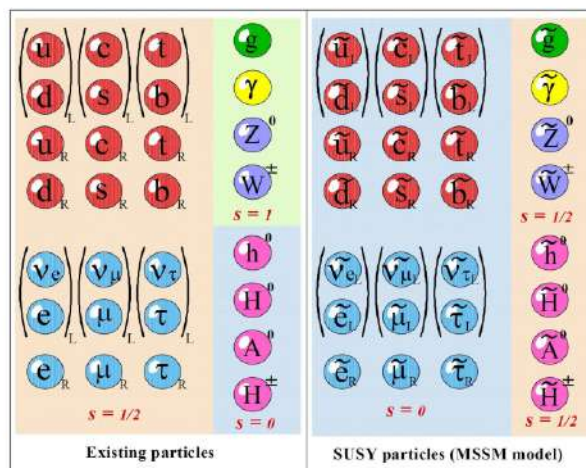


16.5 Symetrie a narušení symetrií.

- Proč právě tři generace částic?
- Původ CP narušení?
 - poměrně detailně měřeno v kvarkovém sektoru, ještě není změřeno s neutriny
 - souvisí s vysvětlením asymetrie hmoty-antihmoty ve vesmíru
- Neutrino
 - CP narušení?
 - hierarchie hmot?
 - Dirac nebo Majorana?

- Podstata Higgsova bosonu?
 - více Higgsových bosonů?

- Supersymetrie?

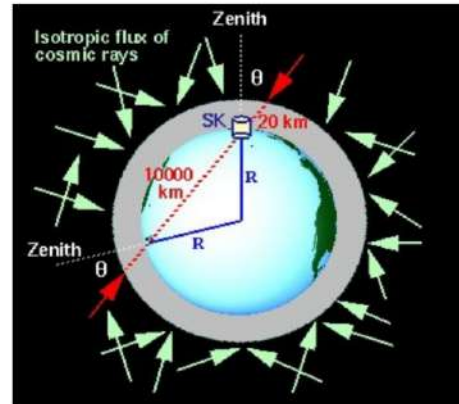


- Neutrino postulováno v β -rozpadu, objeveno později ($\bar{\nu}_e + p \rightarrow n + e^+$). Interaguje pouze slabou interakcí!!
- Tři druhy lehkých neutrin (Z^0 line shape), s výjimkou oscilací se leptonové číslo zachovává po rodinách
- Přímé měření hmoty $\bar{\nu}_e$ v β -rozpadech, zatím jen horní limit (< 0.8 eV); pro ostatní vůně ν_μ , ν_τ také jen horní hranice
- Problém “chybějících” neutrin ...
 - deficit slunečních ν_e
 - Up-Down asymetrie u atmosférických neutrin (ν_μ)
- ... vyřešen oscilacemi neutrin
 - vlastní stav vůně je lineární kombinací vlastních hmotových stavů ν_1, ν_2, ν_3 , které se vyvíjejí v čase
 - zjednodušený popis pro dvě vůně

$$\begin{pmatrix} \nu_\mu \\ \nu_\tau \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta_{23} & \sin \theta_{23} \\ -\sin \theta_{23} & \cos \theta_{23} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \nu_2 \\ \nu_3 \end{pmatrix} \quad P_{\nu_\mu \rightarrow \nu_\mu} = 1 - \sin^2(2\theta_{23}) \cdot \sin^2\left(\frac{\Delta m_{23}^2 L}{4\hbar E c}\right)$$
 - obecná PMNS matice 3x3 (3 úhly a jedna CP-narušující fáze), složitější vztah pro oscilace
- Stále nedořešeno:
 - CP-narušení u neutrin?
 - hmota a hmotová hierarchie?, Dirac vs Majorana?

16.6 Rozpad částic a detekce částic.

- Atmosférická neutrina
 - experiment Super-Kamiokande (Japonsko), obrovský vodní detektor ČZ
 - umí rozlišit mezi e^- a μ^-



- Vnitřní dráhový detektor
 - rekonstrukce drah nabitých částic z přesného měření "hitů"
 - určení hybnosti ze zakřivení dráhy v magnetickém poli
- Elmg a hadronový kalorimetr
 - energie a směr nabitých i neutrálních částic, totální absorpce
 - projdou jen miony a neinteragující částice (neutrina)
- Mionový spektrometr
 - nezávislé měření drah mionů, kombinace s vnitřním detektorem
 - často obsahuje triggerovací detektory
- Chybějící příčná hybnost (energie)
 - ZZ hybnosti v rovině kolmé k ose svazku $\vec{p}_T^{\text{miss}} \equiv -\sum \vec{p}_{T,i}$
 - indikace neutrina či jiné nedetekované částice
- Invariantní hmota
 - odpovídá hmotě rozpadající se částice, např. $Z^0 \rightarrow e^+e^-$, $H \rightarrow \gamma\gamma$, $H \rightarrow Z^0 Z^{0*} \rightarrow 4\ell$
 - často lze použít i pro případy s jedním neutrinem (p_z^{miss} lze dopočítat), např. $t \rightarrow W^+b \rightarrow \ell^+\nu b$
- Příčná hmota
 - nelze-li určit invariantní hmotu, např. $W^\pm \rightarrow \ell^\pm\nu$